F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
22/03/2023
Aula 6

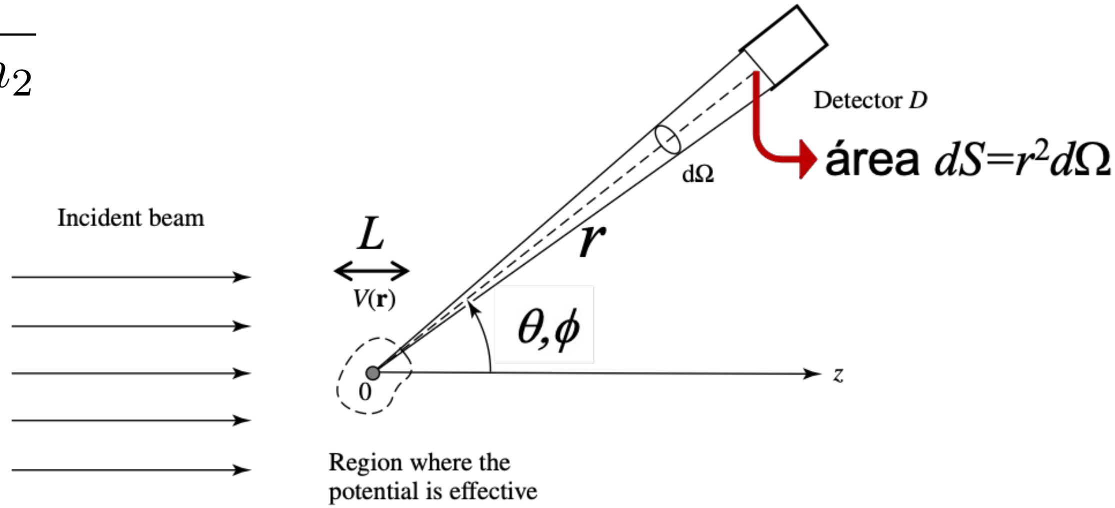
Aula passada

Espalhamento potencial entre duas partículas que interagem com $V(\mathbf{r}_1\text{-}\mathbf{r}_2)$:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \qquad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Seção de choque diferencial:

$$\boxed{\sigma(\theta, \phi) = \frac{dn}{F_i d\Omega}}$$



dn: número de partículas no detector por unidade de tempo.
F_i: número de partículas no feixe incidente por unidade de tempo e de área.
$d\Omega=dS/r^2$: elemento de ângulo sólido subentendido pelo detector.

Seção de choque total:

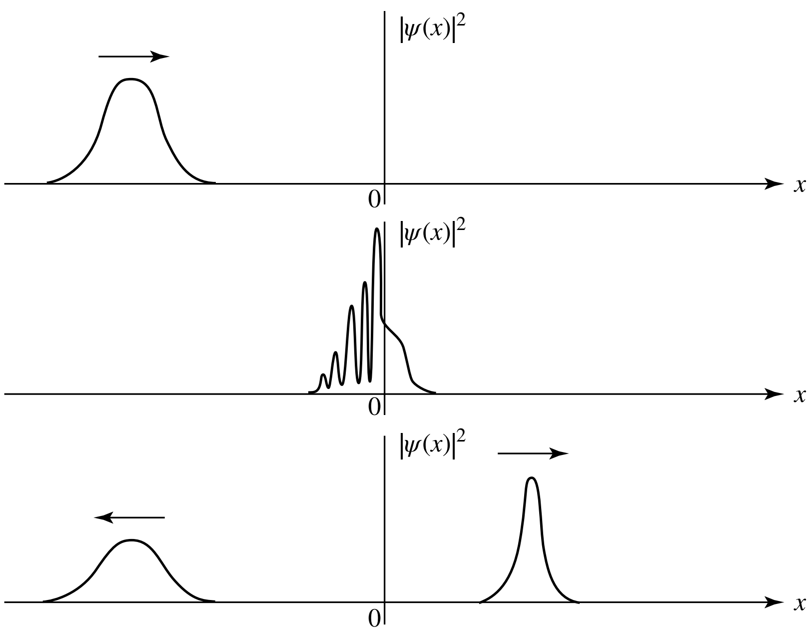
$$\boxed{\sigma = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sigma(\theta, \phi) \sin\theta d\theta}$$

Aula passada

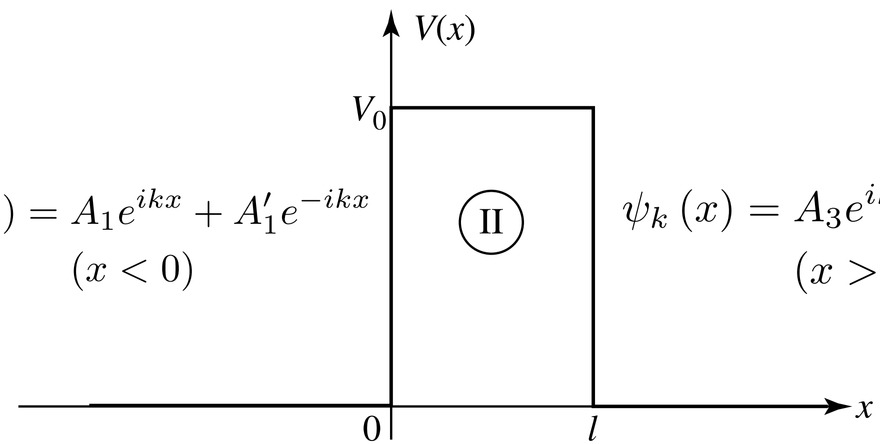
Descrição completa do processo de espalhamento: pacotes de onda dependentes do tempo; muito complicado, pouco prático.

Alternativa: utilizar estados estacionários (de quadrado não integrável) com condições de contorno fisicamente apropriadas e extrair as informações físicas desses estados.

Pacotes de ondas (1D)



Estados estacionários (1D)



$$\psi_k(x) = A_1 e^{ikx} + A_1' e^{-ikx} \quad (x < 0)$$

$$\psi_k(x) = A_3 e^{ikx} \quad (x > l)$$

Quantidade física: $R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2$

$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$

Aula passada

Estados estacionários de espalhamento em 3D: equação de Schrödinger (ind. do tempo) com $E>0$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2 + V\left(\mathbf{r}\right)\right]\psi\left(\mathbf{r}\right) = E\psi\left(\mathbf{r}\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\psi\left(\mathbf{r}\right)$$

E>0 (ESTADOS DE ESPALHAMENTO)

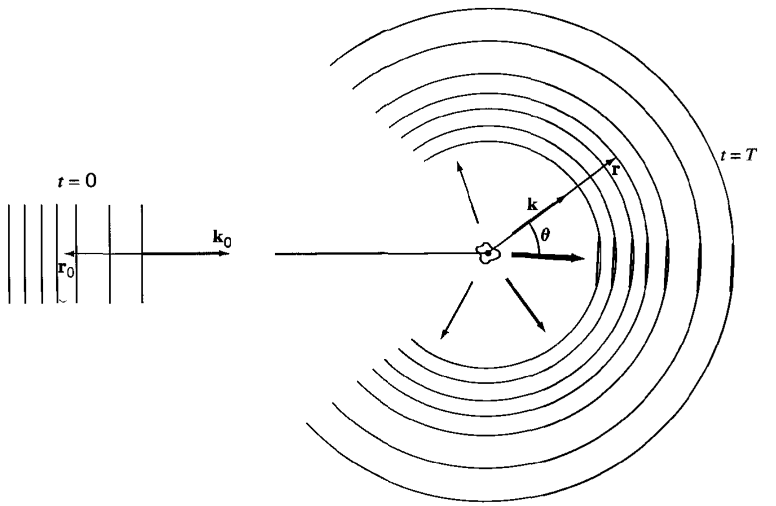
$$V\left(\mathbf{r}\right) = \frac{\hbar^2}{2\mu}U\left(\mathbf{r}\right) < 0$$

$$\boxed{\left[\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2 - U\left(\mathbf{r}\right)\right]\psi\left(\mathbf{r}\right) = 0}$$

Condições de contorno com onda incidente/transmitida e onda espalhada:

$$\boxed{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\left(\mathbf{r}\right) \xrightarrow[|\mathbf{r}|\to\infty]{} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_k\left(\theta,\phi\right)\frac{e^{ikr}}{r}}$$

Amplitude de espalhamento: $\boxed{f_k\left(\theta,\phi\right)}$



Cálculo da seção de choque

ANÁLOGO A ED: AS CORRENTES DE PROBABILIDADE

DENSIDADE DE PROBABILIDADE : $\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$

CORRENTE " " : $\vec{J}(\vec{r},t) = \mathrm{Re}\left[\psi^*(\vec{r},t)\left(\frac{\hbar\vec{\nabla}}{i\mu}\right) \times \psi(\vec{r},t)\right]$

MEC. QUANT. I :

$$\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t) = 0$$

CORRENTE $\vec{J}$ = "QUANTIDADE DE PROBABILIDADE" NA DIREÇÃO ∥ a $\vec{J}$ POR UNIDADE DE ÁREA POR UNIDADE DE TEMPO

PARA UMA ONDA PLANA INCIDENTE : $\psi_i(\vec{r},t) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$$\vec{J}_i(\vec{r},t) = \mathrm{Re}\left[e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\left(\frac{\hbar\vec{\nabla}}{i\mu}\right)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right] = \mathrm{Re}\left[e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\left(\frac{\hbar\vec{k}}{\mu}\right)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right]$$

$$= \frac{\hbar\vec{k}}{\mu} = \frac{\vec{p}}{\mu}$$

$$F_i = |\vec{J}_i(\vec{r},t)| = \frac{\hbar k}{\mu}$$

$$\psi_s(\vec{r},t) = f_k(\theta,\phi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \Rightarrow \vec{J}_s(\vec{r},t) = \mathrm{Re}\left[f^*\frac{e^{-ikr}}{r}\left(\frac{\hbar\vec{\nabla}}{i\mu}\right)\left(f\,\frac{e^{ikr}}{r}\right)\right]$$

USAR COORD. ESFÉRICAS:

$$J_{sr}(r,\theta,\phi,t) = \frac{\hbar k}{\mu r^2}|f_k(\theta,\phi)|^2$$

$$J_{s\theta}(r,\theta,\phi,t) = \frac{\hbar}{\mu r^3}\mathrm{Re}\left[\frac{f^*}{i}\frac{\partial f}{\partial\theta}\right]$$

$$J_{s\phi}(r,\theta,\phi,t) = \frac{\hbar}{\mu r^3\sin\theta}\mathrm{Re}\left[\frac{f^*}{i}\frac{\partial f}{\partial\phi}\right]$$

$J_{s\theta}, J_{s\phi} << J_{sr}$

$r \to \infty$

$$\vec{J}_s(\vec{r},t) \xrightarrow[r\to\infty]{} J_{sr}\hat{r} = \frac{\hbar k}{\mu r^2}|f_k(\theta,\phi)|^2\hat{r} \to$$ CORRENTE QUE CHEGA NO DETECTOR

$$dn = |J_{sc}|\, \underbrace{dS}_{r^2 d\Omega} = \frac{\hbar k}{\mu \cancel{r^2}} |f_k(\theta,\phi)|^2 \cancel{r^2}\, d\Omega = \frac{\hbar k}{\mu} |f_k(\theta,\phi)|^2 d\Omega$$

$$\sigma(\theta,\phi) = \frac{dn}{F_i\, d\Omega} = \frac{\cancel{(\hbar k/\mu)} |f_k(\theta,\phi)|^2 \cancel{d\Omega}}{\cancel{(\hbar k/\mu)}\, \cancel{d\Omega}} = |f_k(\theta,\phi)|^2$$

A equação integral de espalhamento

PROBLEMA A SER RESOLVIDO: $\left[\nabla^2 + k^2 - U(\vec{r})\right]\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) = 0$ (1)

SUJEITA À CONDIÇÃO DE CONTORNO (ASSINTÓTICA):

$$\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f_k(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} \quad (2)$$

VAMOS CONDENSAR (1) E (2) NUMA ÚNICA EQUAÇÃO INTEGRAL: MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN

1) SEJA UMA SOLUÇÃO DA SEGUINTE EQUAÇÃO:

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]G(\vec{r}) = \delta^{(3)}(\vec{r})$$

$\delta^{(3)}(\vec{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) =$ DELTA DE DIRAC EM 3D

2) SEJA $\varphi_0(\vec{r})$ UMA SOLUÇÃO DE:

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]\varphi_0(\vec{r}) = 0$$

SE $\psi(\vec{r})$ FOR SOLUÇÃO DE:

$$\psi(\vec{r}) = \varphi_0(\vec{r}) + \int d^3r'\, G(\vec{r}-\vec{r}')\, U(\vec{r}')\, \psi(\vec{r}') \qquad (3)$$

ENTÃO, ELA É SOLUÇÃO DE (1). APLICO $[\nabla^2+k^2]$ EM (3)

$$[\nabla^2+k^2]\psi(\vec{r}) = \underbrace{[\nabla^2+k^2]\varphi_0(\vec{r})}_{=0} + [\nabla^2+k^2]\int d^3r'\, G(\vec{r}-\vec{r}')U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$

$$= \int d^3r'\, U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\,[\nabla^2+k^2]G(\vec{r}-\vec{r}') = (*)$$

$$[\nabla^2+k^2]G(\vec{r}) = \delta^{(3)}(\vec{r}) \xrightarrow[\vec{r}\to\vec{r}-\vec{r}']{} [\nabla^2+k^2]G(\vec{r}-\vec{r}') = \delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$(*) = \int d^3r'\, U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\,\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}') = U(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

$$\left[\frac{df(x)}{dx} = g(x) \longrightarrow \frac{df(x-x_0)}{dx} = g(x-x_0)\right]$$

$$\Rightarrow [\nabla^2+k^2-U(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = 0 \qquad (1) \checkmark$$

$(3) \Rightarrow (1)$ E TAMBÉM, PODE-SE PROVAR, $(1) \Rightarrow (3)$

ESCOLHENDO CRITERIOSAMENTE $\varphi_0(\vec{r})$ É $G(\vec{r})$ PODEMOS ACHAR UMA $\psi(\vec{r})$ QUE TAMBÉM SATISFAZ A COND. CONTORNO (2)

$$\varphi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad [\nabla^2 + k^2]\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 0 \checkmark$$

$$G^{(\pm)}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

(VER PROVA NAS NOTAS)

PARA SATISFAZER A (2) USAREMOS A $G^{(+)}(\vec{r})$

LEVANDO NA EQ (3):

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi}\int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}')\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') \quad (4)$$

* LEMBRETE: SE $\nabla^2\phi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_0}$

$$\nabla^2 G(\vec{r}) = \delta^{(3)}(\vec{r}) \Rightarrow G(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi r} \Rightarrow \phi(\vec{r}) = \int d^3r'\, G(\vec{r}-\vec{r}')\left(-\frac{\rho(\vec{r}')}{\epsilon_0}\right)$$

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d^3r' \, \frac{\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}$$

$$\left[(1+x)^{1/2} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{3}{2}\,x^2 + \dots \right]$$

VAMOS MOSTRAR QUE (4) SATISFAZ A COND. CONTORNO (2

$$|\vec{r}| \longmapsto \infty$$

SE $U(\vec{r})$ TEM ALCANCE $\underline{L}$, OU SEJA, $U(\vec{r}) \xrightarrow[|\vec{r}| \gg L]{} 0$

A REGIÃO DE INTEGRAÇÃO EM $\vec{r}\,'$ ESTÁ CONFINADA A VALORES DE $\vec{r}\,'$, TAIS QUE $|\vec{r}\,'| \leq L$

$$|\vec{r}-\vec{r}\,'| = \left[r^2 + r'^2 - 2\,\vec{r}\cdot\vec{r}\,' \right]^{1/2} = r\left[1 + \frac{r'^2}{r^2} - \frac{2\,\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r^2} \right]^{1/2} =$$

$$\left[|\vec{A} - \vec{B}|^2 = |\vec{A}| + |\vec{B}| - 2\,\vec{A}\cdot\vec{B} \right] \qquad \hat{r}$$

$$\simeq r\left[1 - \frac{\cancel{2}\,\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{\cancel{2}\,r^2} \right] = r - \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r} = r - \hat{r}\cdot\vec{r}\,'$$

LEVANDO ESSA EXPANSÃO EM (4)

$$\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi}\int d^3r'\, U(\vec{r}')\,\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}')\,\underbrace{\frac{e^{ik[r-\hat{r}\cdot\vec{r}']}}{r}}_{\frac{e^{ikr}}{r}\, e^{-ik\hat{r}\cdot\vec{r}'}}$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi}\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)\int d^3r'\, e^{-ik\hat{r}\cdot\vec{r}'}\,U(\vec{r}')\,\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}')$$

QUE É DA FORMA:

$$\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f_k(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (2)$$

A INTEGRAL SÓ DEPENDE DE $\hat{r}$:

$\hat{r} = \frac{\vec{r}}{r} = (\sin\theta\cos\phi\,\hat{x} + \sin\theta\sin\phi\,\hat{y} + \cos\theta\,\hat{z})$ QUE SÓ DEPENDE DE (θ,ϕ). ALÉM DISSO:

$$f_k(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\, e^{-ik\hat{r}\cdot\vec{r}'}\,U(\vec{r}')\,\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}')$$

Equação de Lippmann-Schwinger

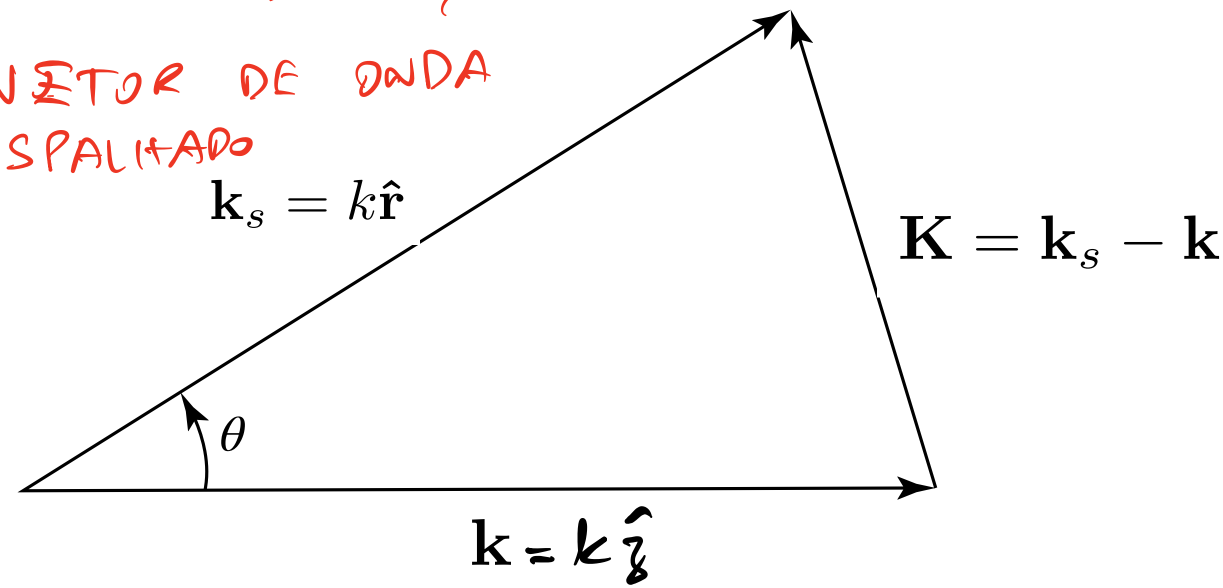
$$\boxed{\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int d^3r' G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, U(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}') \\ \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi}\int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')\end{aligned}}$$

$$f_k(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\, e^{-ik\hat{r}\cdot\vec{r}\,'}\, U(\vec{r}\,')\, \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}\,')$$

Vetor de onda de espalhamento

$k\hat{n} \Rightarrow$ MÓDULO E DIREÇÃO DETERMINADA POR θ, ϕ

$k\hat{n} = \vec{k}_s$ = VETOR DE ONDA ESPALHADO



$\vec{k}$ = VETOR DE ONDA INCIDENTE

$\vec{K} = \vec{k}_s - \vec{k}$ = VETOR DE ONDA DE ESPALHAMENTO OU DE TRANSFERÊNCIA

$\vec{K} = k\hat{n} - \vec{k} = k\hat{n} - k\hat{z} = k(\hat{n} - \hat{z})$ PARA INCIDÊNCIA NA DIREÇÃO $\hat{z}$.