F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023

27/03/2023

Aula 7

Aula passada

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

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

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

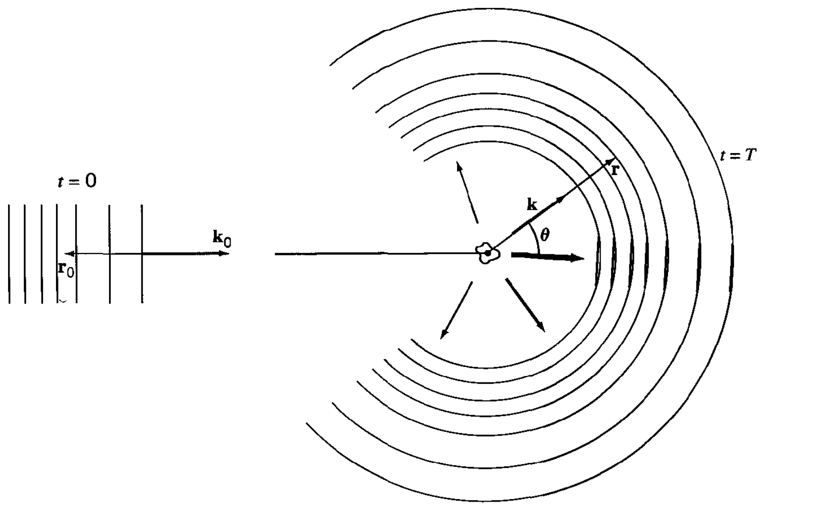
$$\boxed{\left[\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2 - U(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = 0}$$

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

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

Seção de choque diferencial:

$$\boxed{\sigma(\theta,\phi) = |f_k(\theta,\phi)|^2}$$



Aula passada

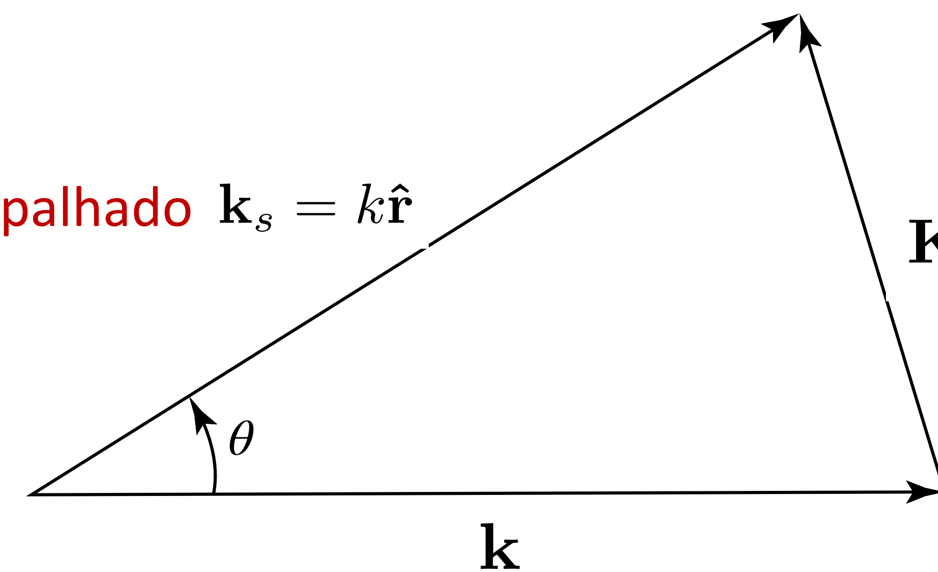
$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2 - U(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad + \quad \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow[|\mathbf{r}|\to\infty]{} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_k(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

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

Equação de Lippmann-Schwinger

Uma vez resolvida a equação de LS: $f_k(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')$

vetor de onda espalhado $\mathbf{k}_s = k\hat{\mathbf{r}}$



$\mathbf{K} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}$

vetor de onda de espalhamento ou transferido

A série de Born

$$\boxed{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) + \int d^3r' G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')}$$

$$G^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\psi_{k}^{(+)}(\vec{r}') = \psi_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{r}') + \int d^3r''\, G^{(+)}(\vec{r}'-\vec{r}'')\, U(\vec{r}'')\, \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}'')$$

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3r'\, G^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}')\, U(\vec{r}') \left[\psi_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{r}') + \int d^3r''\, G^{(+)}(\vec{r}'-\vec{r}'')\, U(\vec{r}'')\, \psi_{k}^{(+)}(\vec{r}'')\right] =$$

$$= \psi_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3r'\, G^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}')\, U(\vec{r}')\, \psi_{k}^{(0)}(\vec{r}') +$$

$$+ \int d^3r'\, d^3r''\, G^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}')\, U(\vec{r}')\, G^{(+)}(\vec{r}'-\vec{r}'')\, U(\vec{r}'')\, \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}'')$$

FAZENDO REPETIDAMENTE ESSAS SUBSTITUIÇÕES OBTÉM-SE A FUNÇÃO PROCURADA COMO UMA SÉRIE DE POTÊNCIAS NO POTENCIAL $U(\vec{r})$.
POR EXEMPLO, ATÉ 1ª ORDEM:

$$\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) \cong \psi^{(0)}_{\vec{k}}(\vec{r}) + \int d^3r' \, G^{(+)}(\vec{r}-\vec{r}\,') \, U(\vec{r}\,') \, \psi^{(0)}_{\vec{k}}(\vec{r}\,')$$

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

A AMPLITUDE DE ESPALHAMENTO É:

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

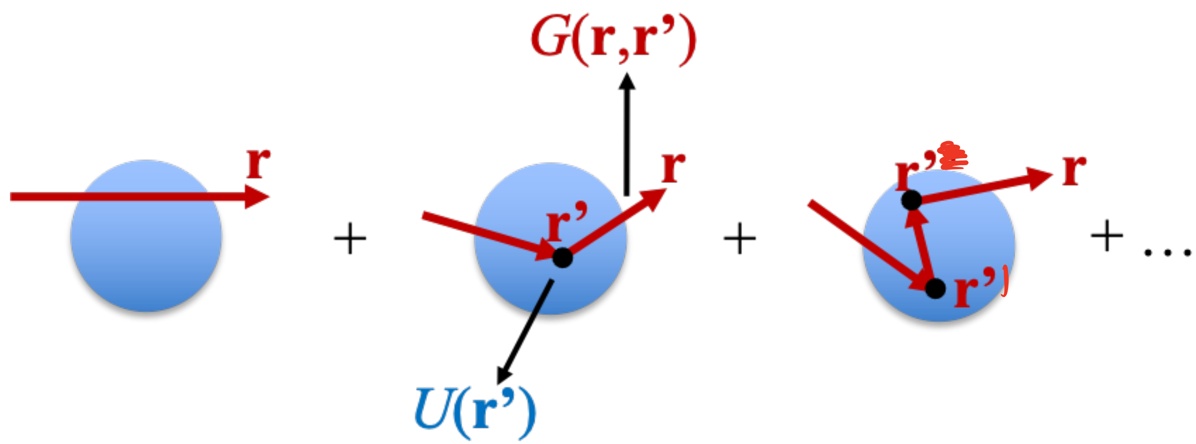
EM 1ª ORDEM EM $U(\vec{r})$ BASTA: $\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

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

"APROXIMAÇÃO DE BORN"

A série de Born

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) + \int d^3r' G^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,U(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}')$$
$$+ \int d^3r' \int d^3r'' G^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,U(\mathbf{r}')\,G^{(+)}(\mathbf{r}',\mathbf{r}'')\,U(\mathbf{r}'')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}'') + \ldots$$



$$U(\vec{r}) = V_0 \frac{e^{-r/a}}{r}$$

A aproximação de Born

$$\psi^{(+)}_{\vec{k}}(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

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

"APROXIMAÇÃO DE BORN"

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}\int d^3r'\, e^{-i\underbrace{[k\hat{r}-\vec{k}]}_{\vec{K}}\cdot\vec{r}'}\, V(\vec{r}')$$

$$\vec{K} = k\hat{r} - \vec{k} = k\hat{r} - k\hat{z} = k(\hat{r}-\hat{z})$$

$$f^{(1)}_{k}(\theta,\phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}'}\, V(\vec{r}')$$

$\tilde{V}(\vec{K})$ = TRANSFORMADA DE FOURIER DO POTENCIAL EM $\vec{K}$

A SEÇÃO DE CHOQUE É:

$$\sigma_k^{(1)}(\theta,\phi) = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int d^3r'\, e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}\,'}\, V(\vec{r}\,')\right|^2$$

PARA O CASO DE UM POTENCIAL CENTRAL: $V(r)$

$$\int d^3r\, e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}\, V(r) = \int_0^\infty r^2\, dr \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{2\pi} \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, e^{-iKr\cos\theta}\, V(r)$$

$$\vec{K}\cdot\vec{r} = Kr\cos\theta$$

$$\boxed{\tilde{V}(\vec{K}) = \frac{4\pi}{K}\int_0^\infty r\sin(Kr)\, V(r)\, dr}$$

$$f_k^{(1)}(\Omega) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 K}\int_0^\infty r\, V(r)\sin(Kr)\, dr$$

$$\sigma_k^{(1)}(\Omega) = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 K^2}\left|\int_0^\infty r\, V(r)\sin(Kr)\, dr\right|^2$$

$$|\vec{K}|^2 = K^2 = |k(\hat{r}-\hat{z})|^2 = k^2|\hat{r}-\hat{z}|^2 = k^2[1+1-2\hat{r}\cdot\hat{z}]$$

$$\hat{r}\cdot\hat{z} = \cos\theta \qquad = 2k^2(1-\cos\theta) = 4k^2\sin^2(\theta/2)$$

$$\hat{r} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$

$$|\vec{A}-\vec{B}|^2 = A^2+B^2-2\vec{A}\cdot\vec{B}$$

$$\Rightarrow \boxed{K = 2k\sin(\theta/2)}$$

A SEÇÃO DE CHOQUE SÓ DEPENDE DE $\underline{\theta}$ E NÃO DE ϕ.

A aproximação de Born

$$f_k^{(B1)}(\theta,\phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{K} = k\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{k}$$

Se o potencial é central: $V(r)$

A aproximação de Born
para potenciais centrais

$$f_k^{(B1)}(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 K}\int_0^\infty rV(r)\sin(Kr)\,dr$$

$$K = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

Exemplo

Potencial de Yukawa: $V(r) = V_0 \frac{e^{-r/a}}{(r/a)} = (aV_0)\frac{e^{-r/a}}{r}$

$$\int_0^\infty \cancel{r}\, dr \sin(Kr)\,(aV_0)\frac{e^{-r/a}}{\cancel{r}} = (aV_0)\int_0^\infty e^{-r/a}\sin(Kr)\,dr$$

$$K = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

$$= (aV_0)\,\frac{K}{K^2 + (1/a)^2}$$

$$f_K^{(B1)}(\theta) = -\overbrace{\left(\frac{2\mu}{\hbar^2 k^2}\right)}^{E_0^{-1}} V_0 \frac{a}{(4\sin^2\theta/2) + (ka)^{-2}}$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

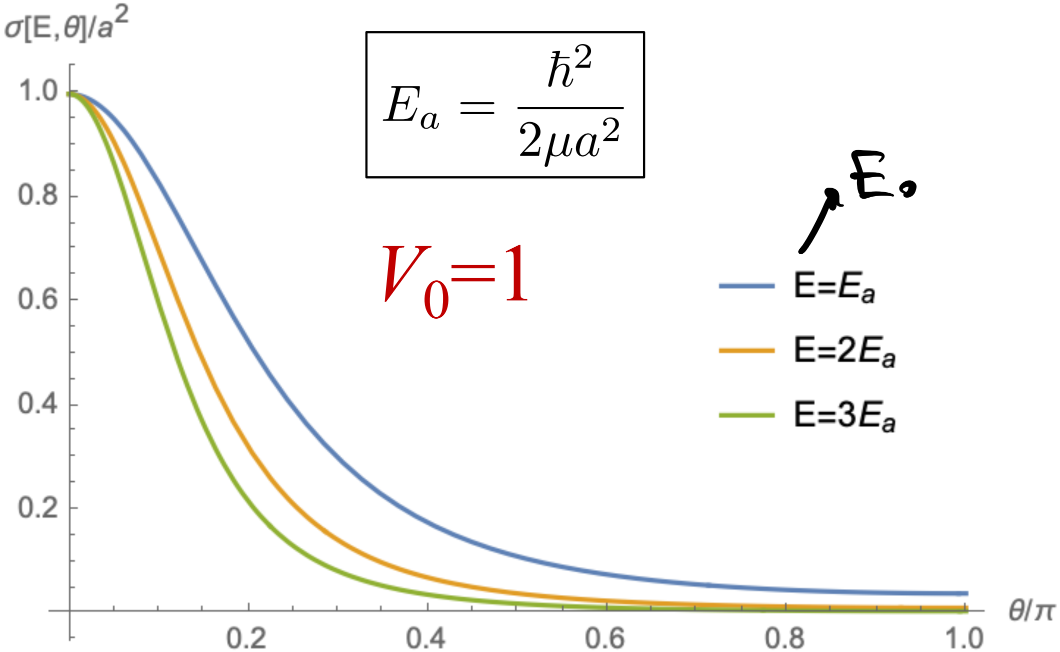
$$= -\left(\frac{V_0}{E_0}\right)\frac{a}{4\sin^2\theta/2 + (ka)^{-2}}$$

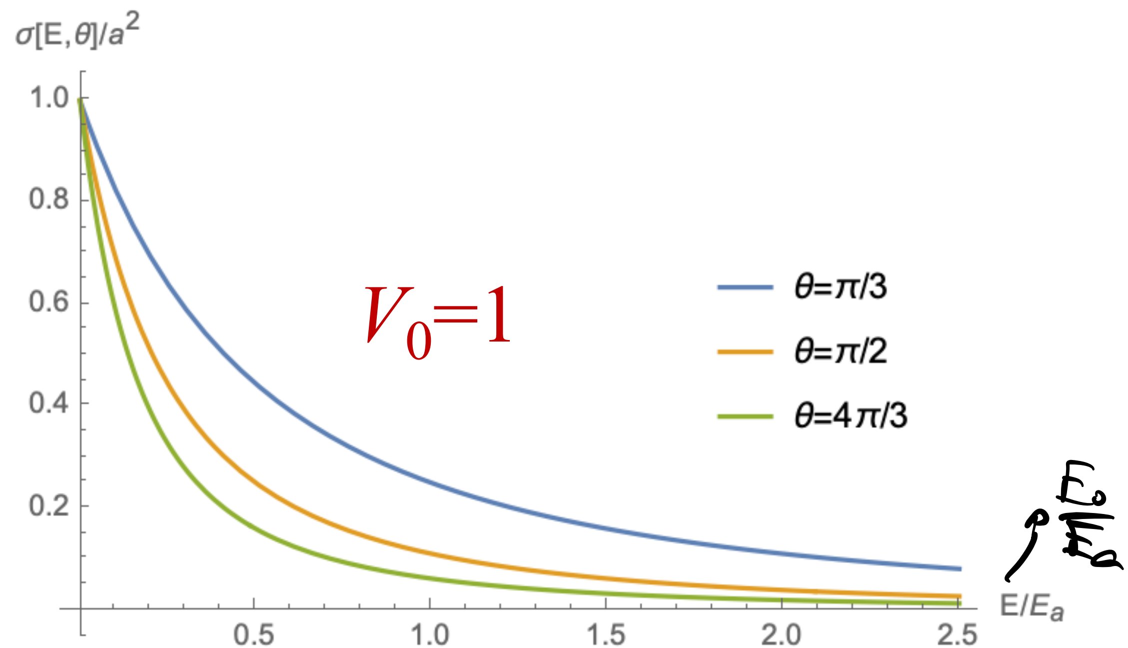
$$E_a = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}$$

$$\frac{1}{k^2a^2} = \frac{E_a}{E_0}$$

$$\sigma_K^{(B1)}(\theta) = \left(\frac{V_0}{E_0}\right)^2 \frac{a^2}{\left[4\sin^2\theta/2 + \left(\frac{E_a}{E_0}\right)\right]^2}$$

$$E_a = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}$$





SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL:

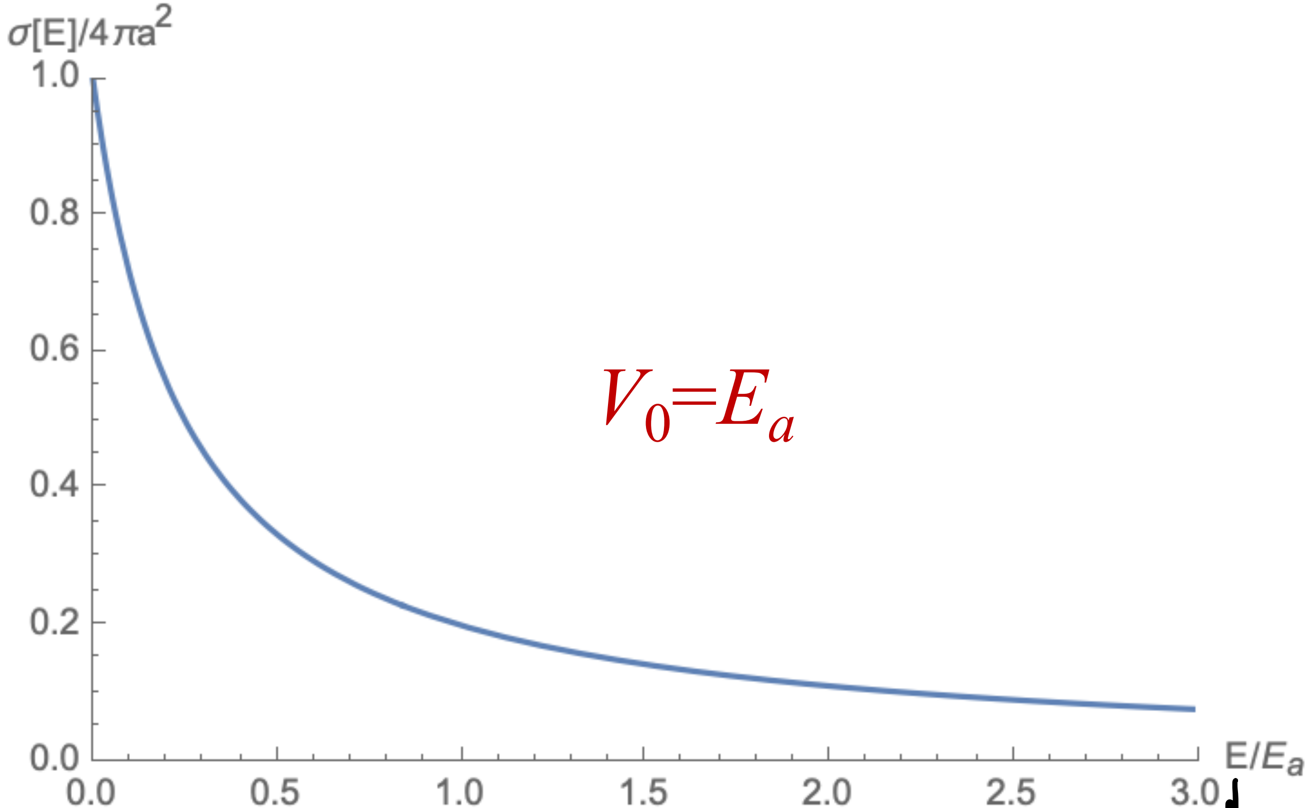
$$\sigma_k^{(B1)} = 2\pi \int_0^\pi \sigma_k^{(B1)}(\theta) \sin\theta \, d\theta = 4\pi a^2 \frac{(V_0/E_a)^2}{1 + 4E/E_a}$$

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-r/a}}{(r/a)} = \underset{\infty}{(aV_0)} \frac{e^{-r/a}}{r}$$

SE $\left.\begin{array}{l} a \to \infty \\ aV_0 \to \pm e^2 \end{array}\right\} V(r) \to \pm \frac{e^2}{r}$

$$\sigma_k^{(COUL)(B1)}(\theta) = \frac{e^4}{16 E_0^2} \frac{1}{\sin^4 \theta/2}$$

QUE É IGUAL AO RESULTADO CLÁSSICO (RUTHERFORD) E AO " QUÂNTICO EXATO !! ISSO É UMA TREMENDA COINCIDÊNCIA



$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

Validade da aproximação de Born

IMPONDO, COMO ESTIMATIVA, QUE O TERMO DE 1ª ORDEM SEJA, EM MÓDULO, MUITO MENOR QUE O TERMO DE ORDEM ZERO:

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

COMO $\dfrac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$ CAI COM $\vec{r}$, PODEMOS ESTIMAR EM $\vec{r}$. FAZENDO OS CÁLCULOS (VER NOTAS), OBTÉM-SE A SEGUINTE ESTIMATIVA:

$$\frac{\mu V_0 L}{\hbar^2 k} \ll 1$$

$V_0 \rightarrow$ INTENSIDADE DO POTENCIAL

$L \rightarrow$ ALCANCE DO POTENCIAL

A APROXIMAÇÃO DE BORN É TÃO MELHOR QUANTO MAIOR A ENERGIA $\left(\frac{V_0}{k}\right)$ E QUANTO MENOR O ALCANCE DO POTENCIAL.

O método das ondas parciais

O método das ondas parciais

Válido <u>somente</u> para potenciais centrais $V(r)$.

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

Vamor tomar o vetor de onda incidente $\mathbf{k}$ aponta na direção de z positivo.

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xrightarrow[\mathbf{k}=k\hat{\mathbf{z}}]{} e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$$

De maneira geral essa escolha de $\mathbf{k}$ mais o potencial central define uma simetria azimutal: a função de onda procurada não depende de ϕ.

$$\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}} \text{ e } V(r) \Rightarrow \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(r,\theta,\phi) \rightarrow \psi_{k}^{(+)}(r,\theta)$$

$e^{im\phi}$

Como o potencial é central: $$\psi_{k}^{(+)}(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \bar{a}_{l,m} R_{k,l}(r) Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

Mas: $L_z\psi_k^{(+)}(r,\theta) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_k^{(+)}(r,\theta)}{\partial\phi} = 0 \Rightarrow m = 0$ $\Rightarrow$ só há $m=0$ na soma acima.

Como $Y_{l,0}(\theta,\phi) \propto P_l(\cos\theta)$

$$\boxed{\psi_k^{(+)}(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{k,l}(r) P_l(\cos\theta)}$$