

F 789 – Mecânica Quântica II


1^o Semestre de 2023

29/03/2023

Aula 8

Aula passada

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


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

Equação de Lippmann-Schwinger

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

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

Aula passada

A série de Born: série em potências de $U(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) &= \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) + \int d^3r' G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}') \\ &+ \int d^3r' \int d^3r'' G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G^{(+)}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}'') + \dots\end{aligned}$$

A aproximação de Born: $\left(\frac{V}{E}\right) (ka) \ll 1$

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) &\approx \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ f_k^{(B1)}(\theta, \phi) &\approx -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \\ f_k^{(B1)}(\theta, \phi) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \\ \mathbf{K} &= k\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{k}\end{aligned}$$

Para potenciais centrais $V(r)$:

$$\begin{aligned}f_k^{(B1)}(\theta) &= -\frac{2\mu}{\hbar^2 K} \int_0^\infty r V(r) \sin(Kr) dr \\ K &= 2k \sin \frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

O método das ondas parciais

Válido somente para potenciais centrais $V(r)$.

Se o vetor de onda incidente aponta na direção de z positivo: **simetria azimutal**, **função de onda não depende de ϕ** .

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

A onda plana incidente é: $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xrightarrow{\mathbf{k}=k\hat{\mathbf{z}}} e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$

Além disso, 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, como não depende de ϕ , só entram termos com $m=0$: $Y_{l,0}(\theta, \phi) \propto P_l(\cos \theta)$

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

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0 \quad R_{k,l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^l$$

Potencial nulo: $V(r)=0$

Vamos primeiro escrever a onda plana na forma: $e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{k,l}(r) P_l(\cos \theta)$

A onda plana é solução da equação de Schrödinger pra $V(r)=0$

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0 \quad R_{k,l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^l$$

Soluções (complemento A_{VIII}): $R_{k,l}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)$

Portanto:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} [A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)] P_l(\cos \theta)$$

$j_l(x) \rightarrow$ FUNÇÃO DE BESSEL ESFÉRICA DE ORDEM l
 $n_l(x) \rightarrow$ " " NEUMANN " " " "

Propriedades das funções esféricas

Fórmula geral:
$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\sin x}{x} \right)$$

$$n_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\cos x}{x} \right)$$

Comportamento assintótico:

$$j_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{2^l l!}{(2l+1)!} x^l$$

$$j_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin \left(x - \frac{l\pi}{2} \right)$$

$$n_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{2l!}{2^l l!} \frac{1}{x^{(l+1)}}$$

$$n_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} -\frac{1}{x} \cos \left(x - \frac{l\pi}{2} \right)$$

Exemplos: combinações de senos, cossenos e potências

Bessel functions $j_l(r)$	Neumann functions $n_l(r)$
$j_0(r) = \frac{\sin r}{r}$	$n_0(r) = -\frac{\cos r}{r}$
$j_1(r) = \frac{\sin r}{r^2} - \frac{\cos r}{r}$	$n_1(r) = -\frac{\cos r}{r^2} - \frac{\sin r}{r}$
$j_2(r) = \left(\frac{3}{r^3} - \frac{1}{r} \right) \sin r - \frac{3 \cos r}{r^2}$	$n_2(r) = -\left(\frac{3}{r^3} - \frac{1}{r} \right) \cos r - \frac{3}{r^2} \sin r$

Onda plana na direção \mathbf{z}

Pode-se provar que a expansão é: como $U_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r^{l+1}}$ $B_l = 0$

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \underbrace{i^l (2l+1)}_{A_l} j_l(kr) P_l(\cos \theta)$$

Comportamento assintótico $r \rightarrow \infty$:

$$e^{ikr \cos \theta} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l (2l+1)}{kr} \sin\left(kr - \frac{2l\pi}{2}\right) P_l(\cos \theta)$$

Comportamento assintótico da função de espalhamento

$$\psi_k^{(+)}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{k,l}(r) P_l(\cos \theta) \quad \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0$$

Se $V(r) \neq 0$, mas $r \rightarrow \infty$, na região fora do alcance de $V(r)$: $V(r) \approx 0 \quad |r| > L$

$$R_{k,l}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \left[A_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - B_l \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \right]$$

SE $V(r) = 0 \Rightarrow B_l = 0$. PORTANTO, O EFEITO DE $V(r) \neq 0$ QUANDO $r \rightarrow \infty$ É GERAR $B_l \neq 0$.

DEFINIMOS, POR CONVENIÊNCIA, A DEFASAGEM (OU "PHASE SHIFT") $\delta_l(k)$:

$$\frac{B_l}{A_l} = -\tan[\delta_l(k)]$$

(i) $A_l, B_l \in \mathbb{R}$

(ii) SE $V(r) = 0 \Rightarrow \delta_l(k) = 0$

$$R_{ee}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \left[A_e \sin(kr - 2\frac{\pi}{2}) + A_e \tan \delta_e \cos(kr - 2\frac{\pi}{2}) \right]$$

$$= \frac{A_e}{kr \cos \delta_e} \left[\cos \delta_e \sin(kr - 2\frac{\pi}{2}) + \sin \delta_e \cos(kr - 2\frac{\pi}{2}) \right]$$

$$= \frac{A_e'}{kr} \sin \left[kr - 2\frac{\pi}{2} + \delta_e(k) \right]$$

$$A_e' = \frac{A_e}{\cos \delta_e}$$

PORTANTO:

$$\Psi_k^{(+)}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_{le}(r) P_l(\cos \theta)$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_e'}{kr} \sin \left[kr - 2\frac{\pi}{2} + \delta_e(k) \right] P_l(\cos \theta) \quad (1)$$

QUEREMOS ESCRIBIR $\Psi_k^{(+)}(r, \theta)$, QUANDO $r \rightarrow \infty$, NA FORMA

$$\Psi_k^{(+)}(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikr \cos \theta} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\tilde{\sigma}_u x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$$

Resumindo

Onda plana
incidente/transmitida:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

$$e^{ikz} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l (2l+1)}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\theta)$$

Estados estacionários
de espalhamento:

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

$$\psi_k^{(+)}(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{kr} \sin\left[kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right] P_l(\cos\theta)$$

Diferença:

$$\psi_k^{(+)}(r, \theta) - e^{ikz} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Importante: a diferença só tem ondas esféricas com e^{ikr} , não e^{-ikr}

$$e^{i\frac{\pi}{2}} = i \quad e^{-i\frac{\pi}{2}} = -i$$

A amplitude de espalhamento

$$e^{ikz} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l (2l+1)}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l (2l+1)}{kn} \left[\frac{e^{ikn} e^{-il\frac{\pi}{2}} - e^{-ikn} e^{+il\frac{\pi}{2}}}{2i} \right] \times$$

$$\times P_l(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l (2l+1)}{2ikn} \left[(-i)^l e^{ikn} - (i)^l e^{-ikn} \right] P_l(\cos\theta) \quad (2)$$

$$\psi_k^{(+)}(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{kr} \sin\left[kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right] P_l(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{2ikn} \left[e^{ikn} (-i)^l e^{i\delta_l} - e^{-ikn} (i)^l e^{-i\delta_l} \right]$$

$$\times P_l(\cos\theta) \quad (3)$$

$$\Rightarrow (3) - (2) = f_k(\theta) \frac{e^{ikn}}{n} \Rightarrow \text{O LADO DIREITO SÓ TEM } e^{ikn}$$

\Rightarrow PRECISAMOS IMPOR QUE OS TERMOS EM e^{-ikn} SE

CANCELEM: $i^l (2l+1) \left[-(-i)^l \right] = C_l \left[-(-i)^l \right] e^{-i\delta_l}$

$$\Rightarrow C_l = e^{i\delta_l} i^l (2l+1)$$

$$(3) - (2) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{e^{i\delta_l} \cancel{i^l} (2l+1) \cancel{(i)^l} e^{i\delta_l} e^{ikr} P_l(\cos\theta)}{2ikr}$$

$$- \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\cancel{i^l} (2l+1) \cancel{(i)^l} e^{ikr} P_l(\cos\theta)}{2ikr} = f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} \left(e^{i\delta_l} - 1 \right) P_l(\cos\theta) = f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\Rightarrow f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos\theta)$$

$$\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2i} = e^{i\delta_l} \frac{(e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l})}{2i} = e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

$$f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin[\delta_l(k)] P_l(\cos\theta)$$

Seção de choque total

SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL:

$$\sigma_k(\theta) = |f_k(\theta)|^2 = \left| \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{iS_\ell(k)} \sin[S_\ell(k)] P_\ell(\cos\theta) \right|^2$$

SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL: (VER NOTAS)

$$\sigma_k = \int_0^\pi \sigma_k(\theta) 2\pi \sin\theta d\theta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2[S_\ell(k)]$$

PARA CADA ℓ , O VALOR MÁXIMO DA CONTRIBUIÇÃO
PARA σ_k ACONTECE QUANDO $S_\ell(k) = \frac{\pi}{2}$
(LIMITE UNITÁRIO)

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$$

$$\sigma_k = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Procedimento

Resolver:
$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0$$

$$R_{k,l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^l$$

$$R_{k,l}(r) = \frac{u_{k,l}(r)}{r}$$

ou, equivalentemente:
$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \right] u_{k,l}(r) = 0$$

$$u_{k,l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^{(l+1)}$$

Tomar o limite $r \rightarrow \infty$, comparar e achar as defasagens:

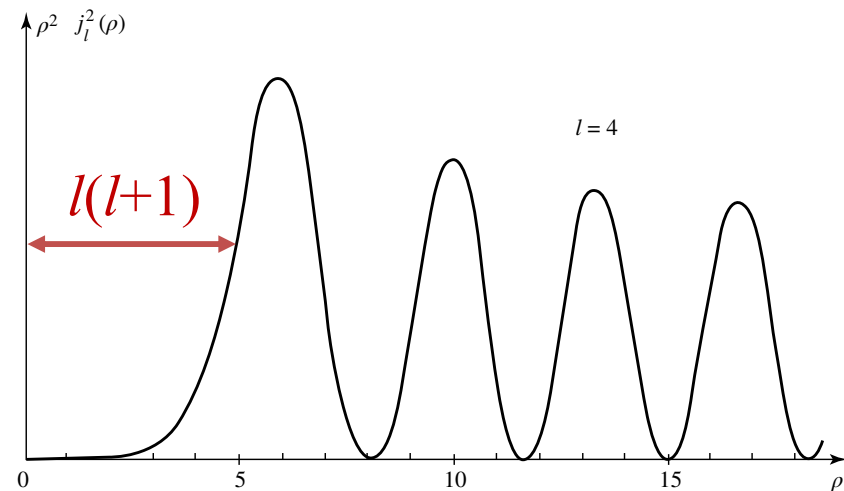
$$u_{k,l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin \left[kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k) \right]$$

Poucas defasagens são necessárias

A função radial tem um “buraco” perto da origem, tanto maior quanto maior l .

$$u_{k,l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^{(l+1)}$$

$$\delta_l(k) \sim k^{(2l+1)}$$



Para um potencial de alcance a e vetores de onda k , apenas defasagens $\delta_l(k)$ com $l < l_{\max}$ são apreciáveis:

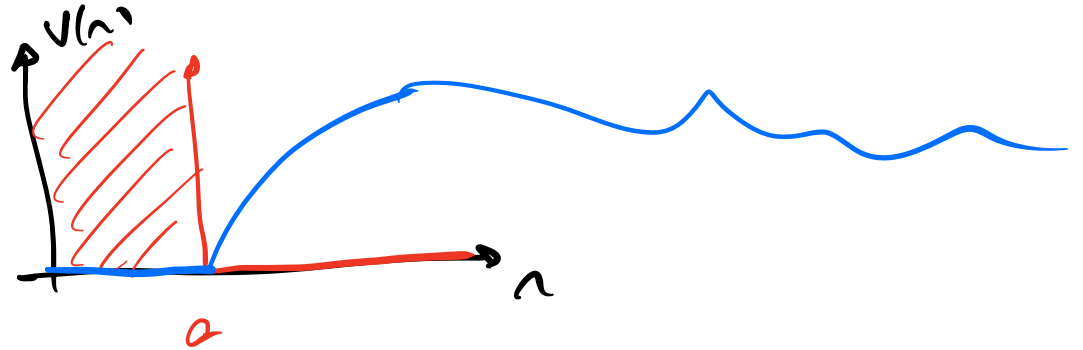
$$ka \lesssim \sqrt{l_{\max}(l_{\max} + 1)}$$

$$ka \gg 1 \Rightarrow ka \lesssim l_{\max}$$

Em baixas energias, poucos l são necessários: método bom para baixas energias

Esfera dura

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > a \\ \infty & r < a \end{cases}$$



$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \right] R_{k,l}(r) = 0$$

$$r < a \Rightarrow R_{k,l}(r) = 0$$

$$r > a \Rightarrow U(r) = 0 \Rightarrow R_{k,l}(r) = A_e j_l(kr) + B_e n_l(kr)$$

CONDIÇÃO SOBRE $R_{k,l}(r)$ EM $r=a$: $R_{k,l}(r)$ É CONTÍNUA EM $r=a$:

$$\Rightarrow R_{k,l}(a) = A_e j_l(ka) + B_e n_l(ka) = 0$$

$$\tan[\delta_l(k)] = -\frac{B_e}{A_e} = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}$$

$$(i) \ell = 0 : \quad j_\ell(ka) = \frac{\sin(ka)}{ka} \quad n_\ell(ka) = -\frac{\cos(ka)}{ka}$$

$$\tan[\delta_0(k)] = -\tan(ka) \Rightarrow \delta_0(k) = -ka \pmod{2\pi}$$

TODA DEFASAGEM PARA $\ell = 0$ É DO TIPO

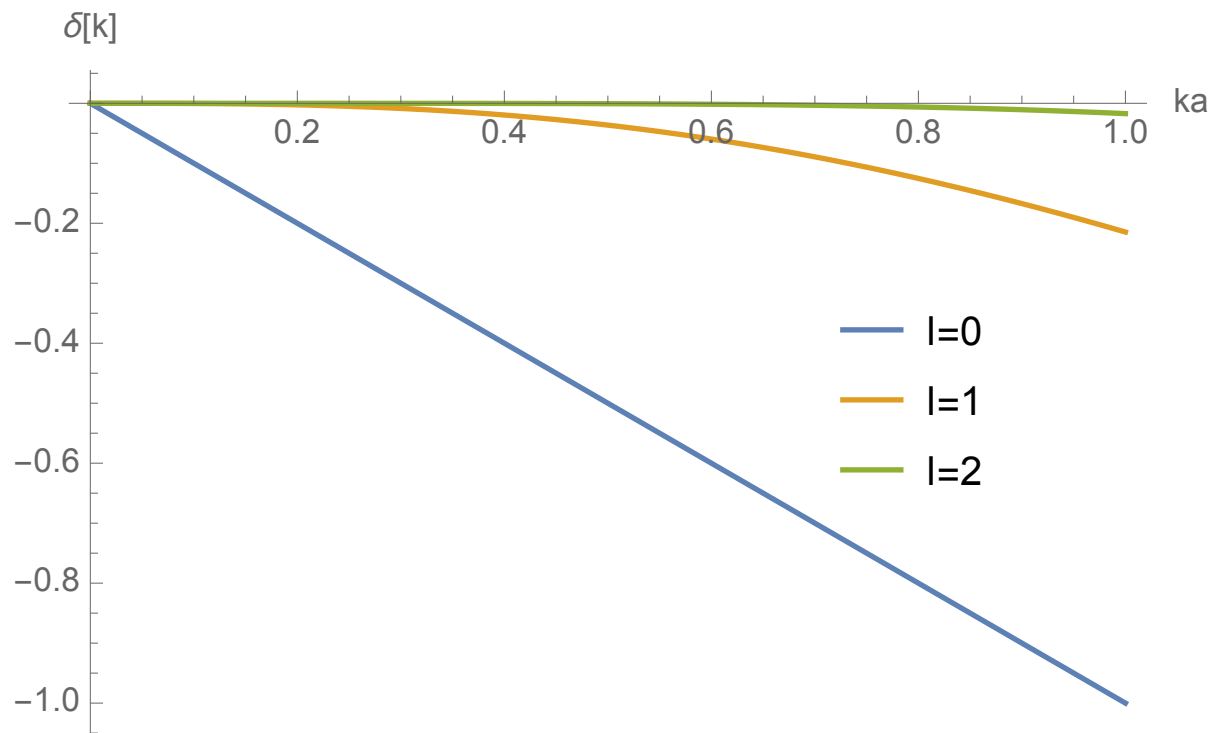
$$\delta_0(k) = -k\ell$$

$\ell =$ COMPRIMENTO DE
ESPALHAMENTO

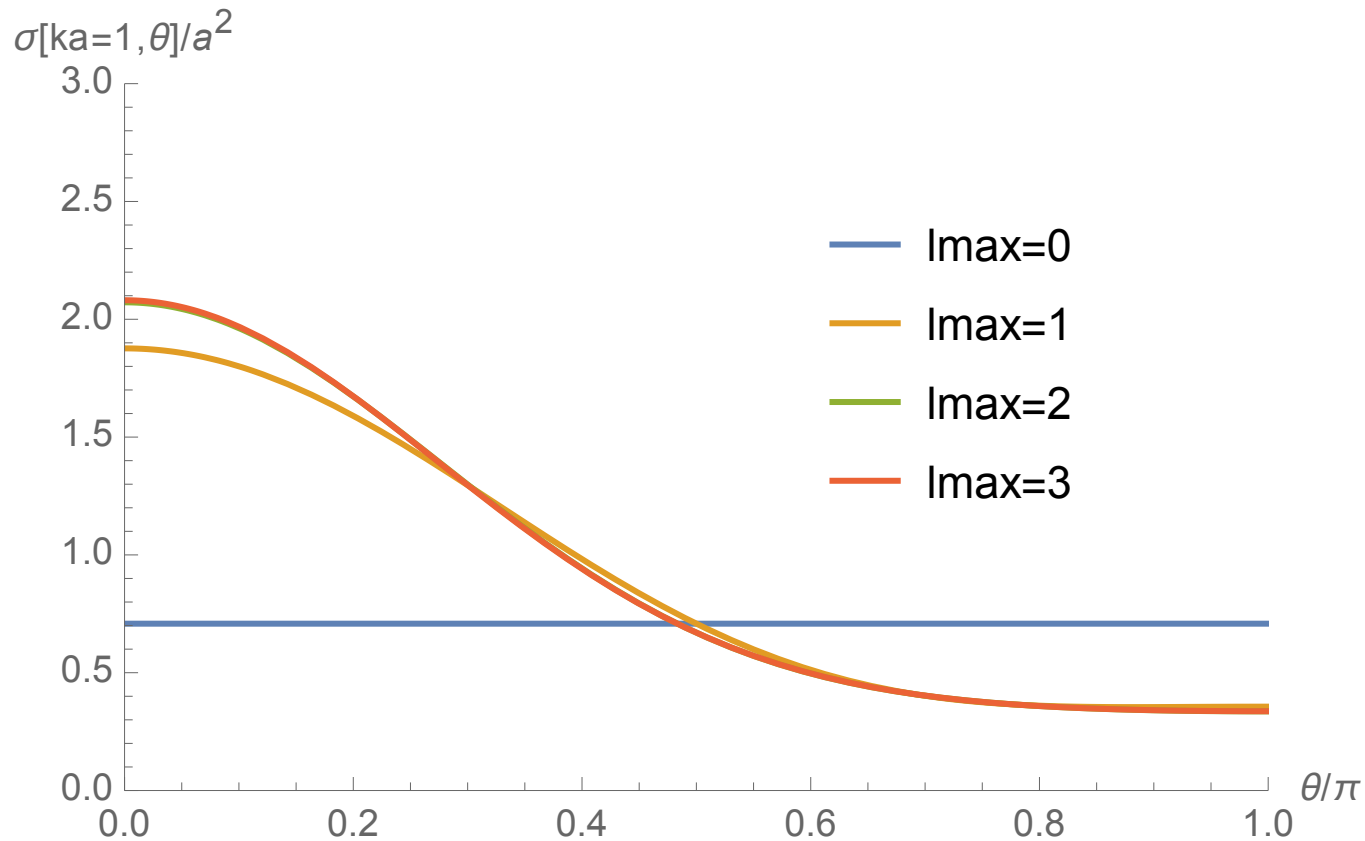
(ii) $\ell = 1$ (VER NOTAS)

$$\delta_1(k) = -ka + \arctan(ka) \pmod{2\pi}$$

Defasagens mais baixas para a esfera dura, como função de k .
Notem que as contribuições decrescem com o aumento de l .

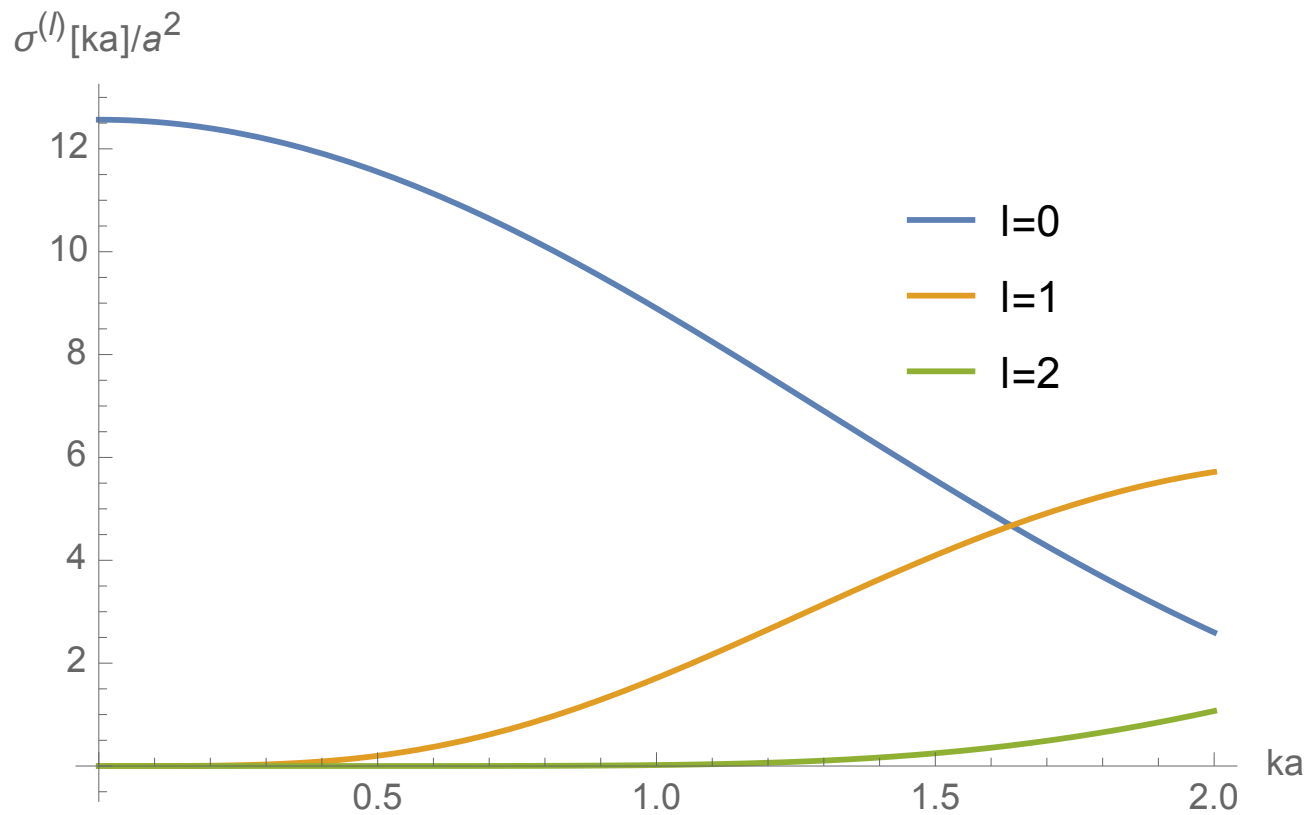


Seção de choque diferencial para a esfera dura ($ka=1$), truncada em l_{\max} , como função do ângulo θ . A série já convergiu para $l_{\max}=2$.



Contribuições de cada l para a **seção de choque total** da esfera dura, como função de k .

Notem que as contribuições decrescem com o aumento de l .



Seção de choque total para a esfera dura, truncada em l_{\max} , como função de k . Em $ka=10$ série converge para $l_{\max} \cong 10$.

