EXPANSÃO EM ONDAS PLANAS E ESFÉRICAS

Essas notas tem como objetivo introduzir as propriedades gerais da expansão em ondas planas e esféricas de funções genéricas (esse procedimento é o mesmo que o visto em Métodos II quando estudamos as Séries de Fourier generalizadas). Além disso discutiremos como expressar as funções de uma base em outra.

Apesar de num primeiro momento ser um território um pouco árido, uma boa referência para aprofundar os conhecimentos sobre espalhamento via pacotes de onda é o livro do Merzbacher (caps. 11, 12 e 13).

Expansão em ondas planas

Em problemas físicos que envolvem propagação de ondas, em geral, encontramos a seguinte função

$$f(x,y,z) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{1}$$

Convenientemente, usando coordenadas esféricas e escolhendo o sistema de coordenadas tal que $\vec{k}//\hat{z}$, podemos escrever:

$$f(z) = e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = f(r,\theta). \tag{2}$$

Logo notamos que a função (2) independe da coordenada ϕ, em outras palavras, a função apresenta uma simetria azimutal. Devido a essa simetria, somos induzidos a expressar essa função na forma de uma expansão em funções que apresentam a mesma simetra, os polinômios de Legendre (lembre-se do curos de Eletromagnetismo I):

$$f(r,\theta) = \sum_{n\geq 0} A_n(r) P_n(\cos(\theta)) \tag{3}$$

onde n é um número inteiro não negativo. Note que a depedência em r foi mantida na constante de expansão (algo que não precisa ser feito). Usando a ortgonalidade dos polinômios de Legendre

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_n(x)P_m(x) = \int_0^{\pi} d\theta \sin(\theta)\, P_n(\cos(\theta))P_m(\cos(\theta)) = \frac{2}{2n+1}\delta_{m,n} \tag{4}$$

podemos determinar a constante de expansão

$$\begin{aligned}
\int_0^\pi d\theta \sin(\theta) f(r,\theta) P_m(\cos(\theta)) &= \sum_n A_n(r) \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) P_n(\cos(\theta)) P_m(\cos(\theta)) \\
&= \frac{2}{2n+1} \sum_n A_n(r) \delta_{m,n} \\
&= \frac{2}{2m+1} A_m(r)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow A_m(r) = \frac{2m+1}{2} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) f(r,\theta) P_m(\cos(\theta)). \tag{5}$$

No nosso caso, Eq.(2), obtemos:

$$A_m(r) = \frac{2m+1}{2} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) e^{ikr\cos(\theta)} P_m(\cos(\theta)) \tag{6}$$

Antes de prosseguirmos, precisamos relembrar uma das representações integrais da função de Bessel esférica de primeira espécie dada por

$$j_\ell(x) = \frac{1}{2i^\ell} \int_{-1}^1 d\xi e^{i\xi x} P_\ell(\xi) = \frac{1}{2i^\ell} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) e^{ix\cos(\theta)} P_\ell(\cos(\theta)) \tag{7}$$

e com ela, podemos expressar (6) como

$$\begin{aligned}
A_m(r) &= (2m+1) i^m \frac{1}{2i^m} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) e^{ikr\cos(\theta)} P_m(\cos(\theta)) \\
\Rightarrow A_m(r) &= (2m+1) i^m j_m(kr).
\end{aligned} \tag{8}$$

Substituindo (8) em (3) e trocando m por ℓ (variáveis mudas) obtemos

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell \geq 0} (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos(\theta)) \tag{9}$$

Note que o aparecimento da função de Bessel esférica de primeira espécie como a parte radial da expressão de $A_m(r)$ é algo esperado já que ela é a solução do problema da partícula livre escrito em coordenadas esféricas. Lembre-se ainda que nos problemas de espalhamento supomos que temos uma partícula livre antes e depois dela interagir com o potencial espalhador !!

Podemos generalizar o resultado encontrado em (9) para um vetor $\vec{k}$ em qualquer direção, para isso, usamos a seguinte propriedade do produto escalar

$$\cos(\theta) = \frac{\vec{k} \cdot \vec{r}}{kr} = \hat{k} \cdot \hat{r} \tag{10}$$

e escrevemos

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\ell\geq 0}(2\ell+1)i^{\ell}j_{\ell}(kr)P_{\ell}(\hat{k}\cdot\hat{r}). \tag{11}$$

Note que na Eq.(11) podemos ter uma dependência explícita no ângulo azimutal ϕ e se torna interessante expressarmos nossas funções na base formada pelos harmônicos esféricos. Para fazemos isso, utilizaremos o *teorema da adição dos harmônicos esféricos* que é dado por

$$P_{\ell}(\hat{k}\cdot\hat{r}) = P_{\ell}(\cos(\theta^{'})) = \frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\left[Y_{\ell}^{m}(\beta,\alpha)\right]^{*}Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi). \tag{12}$$

e escrevemos (11) como

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 4\pi\sum_{\ell\geq 0}\sum_{m=-\ell}^{\ell}i^{\ell}j_{\ell}(kr)\left[Y_{\ell}^{m}(\beta,\alpha)\right]^{*}Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi). \tag{13}$$

Mas o que significa o teorema da adição dos harmônicos esféricos? Considere dois sistemas de referência (x,y,z) e $(x^{'},y^{'},z^{'})$, o teorema da adição é a fórmula que expressa as autofunções $P_{\ell}(\cos(\theta^{'}))$ do momento angular em torno do eixo $z^{'}$ em termos das autofunções $Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi)$ de L_z. Um dado vetor posição $\vec{r}$ tem coordenadas angulares (θ,ϕ) num sistema de coordenadas e $(\theta^{'},\phi^{'})$ no outro. A direção do eixo $z^{'}$ no espaço é especificada pelo seu ângulo polar β e seu ângulo azimutal α em relação ao sistem "sem linha".

Expressando ondas esféricas na base de ondas planas

Dadas as funções

$$\psi(\vec{r}) = \left\langle\vec{r}|\vec{k}\right\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{14}$$

e

$$\varphi_{k,\ell,m}(r,\theta,\phi) = \langle\vec{r}|\varphi_{k,\ell,m}\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,k\,j_{\ell}(kr)\,Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi), \tag{15}$$

e as relações de ortogonalidae

$$\left\langle\vec{k}^{'}|\vec{k}\right\rangle = \delta\left(\vec{k}-\vec{k}^{'}\right) \tag{16}$$

$$\left\langle \varphi_{k',\ell',m'} | \varphi_{k,\ell,m} \right\rangle = \frac{2}{\pi} k k' \int_0^\infty dr\, r^2\, j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r) \int d\Omega \left[Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi) \right]^* Y_\ell^m(\theta,\phi)$$
$$= \delta\left(k - k'\right)\, \delta_{\ell\ell'}\, \delta_{mm'}, \tag{17}$$

queremos escrever a representação da onda esférica Eq.(15) em termos da base de ondas planas Eq.(14), isto é, queremos determinar

$$\varphi_{k,\ell,m}(k') = \left\langle \vec{k}' | \varphi_{k,\ell,m} \right\rangle. \tag{18}$$

Como sabemos as representações de ondas planas e esféricas na base de posição, escrevemos a Eq.(18) como

$$\varphi_{k,\ell,m}(k') = \int d^3r \left\langle \vec{k}' | \vec{r} \right\rangle \langle \vec{r} | \varphi_{k,\ell,m} \rangle$$
$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\, j_\ell(kr)\, Y_\ell^m(\theta,\phi). \tag{19}$$

Agora, tomando o complexo conjugado da Eq.(13) temos

$$e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 4\pi \sum_{\ell'\geq 0} \sum_{m=-\ell'}^{\ell'} (-i)^{\ell'}\, j_{\ell'}(kr) \left[Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi) \right]^* Y_{\ell'}^{m'}(\beta,\alpha). \tag{20}$$

Substituindo (20) em (19), obtemos

$$\varphi_{k,\ell,m}(k') = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{4\pi k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell'\geq 0} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} (-i)^{\ell'}\, Y_\ell^m(\beta,\alpha) \int_0^\infty dr\, r^2\, j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r) \int d\Omega \left[Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi) \right]^* Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi) \tag{21}$$

Para usarmos a relação de ortogonalidade expressa em (17) multiplicamos e dividimos a Eq.(21) pelo fator $\frac{2}{\pi}kk'$ e obtemos

$$\varphi_{k,\ell,m}(k') = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{4\pi k}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\pi}{2kk'} \sum_{\ell'\geq 0} (-i)^{\ell'} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} Y_{\ell'}^{m'}(\beta,\alpha) \delta\left(k-k'\right) \delta_{\ell\ell'}\, \delta_{mm'}$$
$$\Rightarrow \varphi_{k,\ell,m}(k') = \frac{(-i)^{\ell'}}{k'} Y_{\ell'}^{m'}(\beta,\alpha)\, \delta\left(k-k'\right) \tag{22}$$

Lembre-se que β e α são os ângulos polar e azimutal do eixo z' onde o vetor de onda $\vec{k}'$ está escrito em relação ao sistema de eixos em que o vetor de onda $\vec{k}$ está expresso, respectivamente. Com isso, tomamos $\beta = \theta_{\vec{k}'}$ e $\alpha = \phi_{\vec{k}'}$ e obtemos

$$\varphi_{k,\ell,m}(k') = \frac{(-i)^{\ell'}}{k'} Y_{\ell'}^{m'}\left(\theta_{\vec{k}'}, \phi_{\vec{k}'}\right) \delta\left(k-k'\right). \tag{23}$$

Curiosidade

A título de curiosidade, se vocês procurarem na literatura sobre expansão em ondas planas para a função (2), uma possibilidade é expressá-la diretamente como uma expansão em harmônicos esféricos

$$f(r,\theta) = \sum_{\ell,m} C_{\ell,m}(r) Y_\ell^m(\theta,\phi)\,, \tag{24}$$

porém, como a função apresenta simetria azimutal, não são todos os harmônicos que contribuirão para essa expansão. Sabemos que os harmônicos esféricos podem ser escritos em termos dos polinômios de Legendre associados como

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell-m)!}} e^{im\phi} P_\ell^m(\cos(\theta)). \tag{25}$$

Logo, tomando $m = 0$, eliminamos a dependência azimutal em (25)

$$Y_\ell^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell^0(\cos(\theta)), \tag{26}$$

além disso, usando o fato de que quando $m = 0$, os polinômios associados de Legendre são os próprios polinômios de Legendre, obtemos que

$$f(r,\theta) = \sum_{\ell\geq 0} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} C_{\ell,0}(r) P_\ell(\cos(\theta)). \tag{27}$$

Note que a menos do fator $\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}$, a Eq.(27) é semelhante à Eq.(3) e repetindo os mesmos passos da primeira seção, obtemos

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell\geq 0} \sqrt{4\pi(2\ell+1)}\, i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos(\theta)). \tag{28}$$