MÉTODO DE ONDAS PARCIAIS

QUANDO O POTENCIAL É CENTRAL, $V(r)$, O PROBLEMA SE TORNA MAIS SIMPLES E UM MÉTODO, CHAMADO DE ONDAS PARCIAIS, É BASTANTE PODEROSO.

PRIMEIRAMENTE, DEVEMOS NOTAR QUE O PROBLEMA DE ESPALHAMENTO NUM POTENCIAL CENTRAL TEM SIMETRIA CILÍNDRICA EM RELAÇÃO À DIREÇÃO DO FEIXE INCIDENTE, QUE TOMAMOS COMO A DIREÇÃO $\hat{z}$: $\vec{k} = k\hat{z}$. PORTANTO, OS ESTADOS ESTACIONÁRIOS DE ESPALHAMENTO, QUANDO ESCRITOS EM COORDENADAS ESFÉRICAS NÃO DEPENDEM DE ϕ:

$$\psi_k^{(+)}(\vec{r}) \equiv \psi_k^{(+)}(r,\theta)$$

NOTEM QUE O SUB-ÍNDICE PASSA A SER ESCRITO COMO MÓDULO DE $\vec{k}$ JÁ QUE SUA DIREÇÃO AGORA É FIXA EM $\hat{z}$. COMO O POTENCIAL É CENTRAL, $[H, L^2] = [H, L_z] = 0$ E PODEMOS ESCREVER:

$$\psi_k^{(+)}(\vec{r}) = \sum_{l,m} D_{l,m}(k) R_{k,l}(r) Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

COMO VIMOS NO CAPÍTULO 7. ENTRETANTO, COM A FUNÇÃO DE ONDA DE ESPALHAMENTO NÃO DEPENDE DE ϕ, ELA É AUTO-FUNÇÃO DE

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

COM AUTO-VALOR NULO $(m=0)$. PORTANTO, APENAS TERMOS COM $m=0$ APARECEM NA EXPANSÃO. COMO:

$$Y_{\ell,0}(\theta,\phi) \propto P_\ell(\cos\theta)$$

PODEMOS ESCREVER:

$$\psi_k^{(+)}(r,\theta) = \sum_\ell C_\ell(k)\, R_{k,\ell}(r)\, P_\ell(\cos\theta)$$

$$= \sum_\ell C_\ell(k)\, \frac{u_{k,\ell}(r)}{r}\, P_\ell(\cos\theta)$$

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

COM $u_{k,\ell}(r) \propto r^{(\ell+1)}$ QUANDO $r \to 0$.

QUANDO $r \to \infty$, PODEMOS DESPREZAR O POTENCIAL $U(r)$ E:

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

AS SOLUÇÕES DESSA EQUAÇÃO SÃO DA FORMA:

$$R_{k,\ell}(r)=\frac{u_{k,\ell}(r)}{r}=A_\ell\, j_\ell(kr)+B_\ell\, n_\ell(kr)$$

ONDE $j_\ell(x)$ E $n_\ell(x)$ SÃO AS FUNÇÕES DE BESSEL E DE NEUMANN ESFÉRICAS DE ORDEM $\underline{\ell}$. ELAS PODEM SER ESCRITAS EM TERMOS DE FUNÇÕES ELEMENTARES ATRAVÉS DAS FÓRMULAS:

$$j_\ell(x)=(-x)^\ell\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell\left(\frac{\sin x}{x}\right)$$

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

AO LADO, AS PRIMEIRAS $j_\ell(x)$ E $n_\ell(x)$

$$j_0(z)=\frac{\sin z}{z},\qquad j_1(z)=\frac{\sin z}{z^2}-\frac{\cos z}{z}$$

$$j_2(z)=\left(\frac{3}{z^3}-\frac{1}{z}\right)\sin z-\frac{3}{z^2}\cos z$$

$$n_0(z)=-\frac{\cos z}{z},\qquad n_1(z)=-\frac{\cos z}{z^2}-\frac{\sin z}{z}$$

$$n_2(z)=-\left(\frac{3}{z^3}-\frac{1}{z}\right)\cos z-\frac{3}{z^2}\sin z$$

O COMPORTAMENTO ASSINTÓTICO DESSAS FUNÇÕES É TAL QUE:

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} \xrightarrow[r\to\infty]{} A_\ell \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{kr} - B_\ell \frac{\cos(kr - \ell\pi/2)}{kr}$$

PARTÍCULA LIVRE:

VAMOS PRIMEIRAMENTE ESTUDAR O PROBLEMA DA PARTÍCULA LIVRE, OU SEJA, $V(r)=0$ EM TODO O ESPAÇO. NESSE CASO, A SOLUÇÃO RADIAL, VÁLIDA PARA TODO r

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} = A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(kr)$$

TEM QUE SER SUBMETIDA À CONDIÇÃO DE CONTORNO:

$$r \to 0, \quad R_{k,\ell}(r) \propto r^\ell, \quad u_{k,\ell}(r) \propto r^{(\ell+1)}$$

MAS $n_\ell(x) \propto \frac{1}{x^{(\ell+1)}}$ QUANDO $x \to 0$. PORTANTO,

$B_\ell = 0$, E:

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} = A_\ell j_\ell(kr)$$

DE FATO:

$$j_\ell(x) \propto x^\ell \qquad (x \to 0)$$

COMO DEVE SER.

QUANDO FORMOS ESTUDAR A FORMA ASSINTÓTICA DA FUNÇÃO DE ONDA, A PARTE NÃO ESPALHADA SE COMPORTA COMO UMA ONDA PLANA:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$$

ESSA FUNÇÃO PODE SER EXPANDIDA NA BASE ANTERIOR:

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_\ell A_\ell \, j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta)$$

PODE-SE MOSTRAR QUE: $A_\ell = i^\ell(2\ell+1)$ DONDE:

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

ASSINTOTICAMENTE:

$$e^{ikr\cos\theta} \xrightarrow[r\to\infty]{} \sum_\ell i^\ell (2\ell+1) \frac{\sin(kr-\ell\pi/2)}{kr} P_\ell(\cos\theta)$$

VOLTANDO AGORA AO PROBLEMA COM $V(r) \neq 0$, VIMOS QUE:

$$R_{k,\ell}(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} A_\ell \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{kr} - B_\ell \frac{\cos(kr - \ell\pi/2)}{kr}$$

PORTANTO, O COEFICIENTE $B_\ell \neq 0$ É CONSEQUÊNCIA DO PROCESSO DE ESPALHAMENTO. PODEMOS DEFINIR:

$$\frac{B_\ell}{A_\ell} = -\tan\delta_\ell(k)$$

A QUANTIDADE δ_ℓ É CHAMADA DE DEFASAGEM OU "PHASE SHIFT". NOTEM QUE:

(a) $A_\ell, B_\ell \in \mathbb{R}$, PORQUE AS SOLUÇÕES RADIAIS SEMPRE PODEM SER ESCOLHIDAS REAIS

(b) SE $V(r) = 0 \Rightarrow \delta_\ell = 0$ PARA TODO ℓ POIS VIMOS QUE, NESSE CASO, $B_\ell = 0$

(c) δ_ℓ DEPENDE DA ENERGIA OU DE k

ASSIM:

$$R_{k,\ell}(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{A_\ell}{kr}\left[\sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right) + \tan\delta_\ell \cos\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right)\right]$$

$$= \frac{(A_\ell/\cos\delta_\ell)}{kr}\left[\cos\delta_\ell \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right) + \sin\delta_\ell \cos\left(kr - \ell\frac{\pi}{2}\right)\right]$$

$$R_{k,\ell}(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{A'_\ell}{kr}\sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell\right)$$

ONDE REDEFINIMOS $A'_\ell = \dfrac{A_\ell}{\cos\delta_\ell}$.

COMPARANDO O CASO LIVRE $(V(r)=0)$ COM O CASO $V(r)\neq 0$, VEMOS QUE, ASSINTOTICAMENTE QUANDO $r\to\infty$, O EFEITO DO POTENCIAL PODE SER INTEIRAMENTE CONTIDO NAS DE~~FASA~~SAGENS $\delta_\ell(k)$.

ASSIM, PODEMOS EXPANDIR A FUNÇÃO DE ONDA PROCURADA COMO:

$$\psi_k^{(+)}(r,\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell(k)\, R_{k,\ell}(r)\, P_\ell(\cos\theta)$$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty}\left[A_\ell\, j_\ell(kr) + B_\ell\, n_\ell(kr)\right] P_\ell(\cos\theta)$$

$$\xrightarrow[r\to\infty]{} \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{A'_\ell}{kr}\sin\left(kr-\ell\frac{\pi}{2}+\delta_\ell\right)P_\ell(\cos\theta) \quad (1)$$

AGORA, TEMOS TODOS OS ELEMENTOS PARA DEFINIR COMPLETAMENTE O PROBLEMA. A FUNÇÃO DE ONDA TOTAL DEVE SE COMPORTAR, QUANDO $r \to \infty$, COMO:

$$\psi_k^{(+)}(r,\theta) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{ikr\cos\theta} + f_k(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1)\frac{\sin(kr-\ell\pi/2)}{kr} + f_k(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

USANDO:

$$\sin(kr-\ell\pi/2) = \frac{1}{2i}\left[e^{i(kr-\ell\pi/2)} - e^{-i(kr-\ell\pi/2)}\right] =$$

$$= \frac{1}{2i}\left[(-i)^\ell e^{ikr} - (i)^\ell e^{-ikr}\right]$$

JÁ QUE $e^{\pm i\pi/2} = (\pm i)$, TEMOS:

$$\psi_k^{(+)}(r,\theta) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{2ikr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left[e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}\right]P_\ell(\cos\theta) + f_k(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \quad (2)$$

A EQUAÇÃO (1) TAMBÉM PODE SER ESCRITA EM TERMOS DE $e^{\pm ikr}$:

$$\sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell\right) = \frac{1}{2i}\left[(-i)^\ell e^{i\delta_\ell} e^{ikr} - (i)^\ell e^{-i\delta_\ell} e^{-ikr}\right]$$

$$\psi_k^{(+)}(r,\theta) \xrightarrow[r\to\infty]{}$$

$$\xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{2ikr}\sum_{\ell=0}^{\infty} A_\ell' \left[(-i)^\ell e^{i\delta_\ell} e^{ikr} - (i)^\ell e^{-i\delta_\ell} e^{-ikr}\right] P_\ell(\cos\theta) \quad (3)$$

COMPARANDO OS TERMOS EM e^{-ikr}:

$$A_\ell' e^{-i\delta_\ell} (i)^\ell = (-1)^\ell (2\ell+1)$$

$$\Rightarrow \boxed{A_\ell' = i^\ell e^{i\delta_\ell} (2\ell+1)} \quad (4)$$

COMPARANDO OS TERMOS EM e^{ikr}:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} A_\ell' (-i)^\ell e^{i\delta_\ell} P_\ell(\cos\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) + (2ik) f_k(\theta)$$

OU, USANDO (4):

$$f_k(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{\left(e^{2i\delta_\ell} - 1\right)}{2ik} P_\ell(\cos\theta)$$

QUE NOS DÁ A AMPLITUDE DE ESPALHAMENTO (E, PORTANTO, A SEÇÃO DE CHOQUE) EM TERMOS DAS DEFASAGENS $\delta_\ell(k)$.
SIMPLIFICANDO UM POUCO MAIS:

$$\frac{e^{2i\delta_\ell}-1}{2i}=\frac{e^{i\delta_\ell}}{2i}\left(e^{i\delta_\ell}-e^{-i\delta_\ell}\right)=e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell$$

E FINALMENTE:

$$\boxed{f_k(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell\,P_\ell(\cos\theta)}$$

A SEÇÃO DE CHOQUE É $\sigma_k(\theta)=|f_k(\theta)|^2$.
A SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL É:

$$\sigma_k=\int_0^\pi \sigma_k(\theta)\,2\pi\sin\theta\,d\theta=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{\ell,\ell'}(2\ell+1)(2\ell'+1)e^{i(\delta_\ell-\delta_{\ell'})}$$

$$\sin\delta_\ell\sin\delta_{\ell'}\underbrace{\int_0^\pi \sin\theta\,P_\ell(\cos\theta)P_{\ell'}(\cos\theta)\,d\theta}_{\frac{2\delta_{\ell,\ell'}}{2\ell+1}}$$

$$\Rightarrow\quad\boxed{\sigma_k=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell(k)}$$

TODO O PROBLEMA DE ESPALHAMENTO SE RESUME AO CÁLCULO DAS DEFASAGENS. PARA ISSO, BASTA RESOLVER:

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

$u_{k,\ell}(r) \propto r^{(\ell+1)}$ QUANDO $r \to 0$

E, APÓS, COMPARAR O COMPORTAMENTO ASSINTÓTICO DE $u_{k,\ell}(r)$ COM:

$$u_{k,\ell}(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} \sin\left(kr-\ell\frac{\pi}{2}+\delta_\ell\right)$$

PARA OBTER $\delta_\ell(k)$.

É IMPORTANTE NOTAR QUE $\delta_\ell(k)$ SE TORNA MUITO PEQUENO À MEDIDA QUE ℓ CRESCE. ISSO PORQUE $u_{k,\ell} \sim r^{(\ell+1)}$ E A FUNÇÃO NÃO "PENETRA" MUITO NA REGIÃO PERTO DA ORIGEM. PARA UM POTENCIAL DE ALCANCE a APENAS $\delta_\ell(k)$ COM $\ell \lesssim \ell_{max}$ É APRECIÁVEL, ONDE:

$$ka \simeq \sqrt{\ell_{max}(\ell_{max}+1)}$$

PORTANTO, PARA ENERGIAS BAIXAS E/OU ALCÂNCES CURTO, APENAS AS PRIMEIRAS DEFASAGENS SÃO IMPORTANTES.

EXEMPLO: ESFERA DURA

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

FORA DA ESFERA:

$$R_{k,l}(r) = A_l \, j_l(kr) + B_l \, n_l(kr)$$
$$\propto C_l \left[\cos \delta_l \, j_l(kr) - \sin \delta_l \, n_l(kr) \right]$$

COMO O POTENCIAL É INFINITO DENTRO DA ESFERA:

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

$$\Rightarrow \tan \delta_l(k) = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}$$

(i) $l = 0$: $j_0(ka) = \dfrac{\sin(ka)}{ka}$

$$n_0(ka) = -\frac{\cos(ka)}{ka}$$

$$\Rightarrow \tan \delta_0(k) = -\tan(ka)$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta_0(k) = -ka \qquad (\mathrm{mod}\ \pi)}$$

(ii) $\ell = 1$

$$j_1(ka) = \frac{\sin(ka)}{(ka)^2} - \frac{\cos(ka)}{ka}$$

$$n_1(ka) = -\frac{\cos(ka)}{(ka)^2} - \frac{\sin(ka)}{ka}$$

$$\tan\delta_1(k) = \frac{\sin(ka) - ka\cos(ka)}{-\cos(ka) - ka\sin(ka)}$$

$$= \frac{ka - \tan(ka)}{1 + ka\tan(ka)}$$

SE $b \equiv \tan^{-1}(ka)$:

$$\tan\delta_1(k) = \frac{\tan b - \tan(ka)}{1 + \tan b\tan(ka)}$$

$$= \tan(b - ka)$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta_1(k) = -ka + \tan^{-1}(ka) \quad (\mathrm{mod}\ \pi)}$$

ASSIM: $e^{i\delta_0(k)} = \pm e^{-ika}$

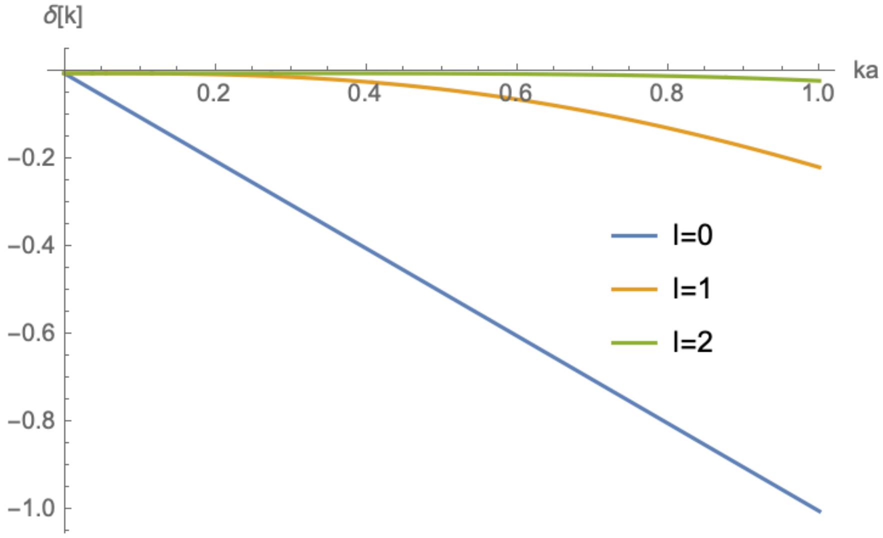
$$\sin\delta_0(k) = \mp\sin(ka)$$

$$e^{i\delta_0(k)}\sin\delta_0(k) = -e^{-ika}\sin(ka)$$

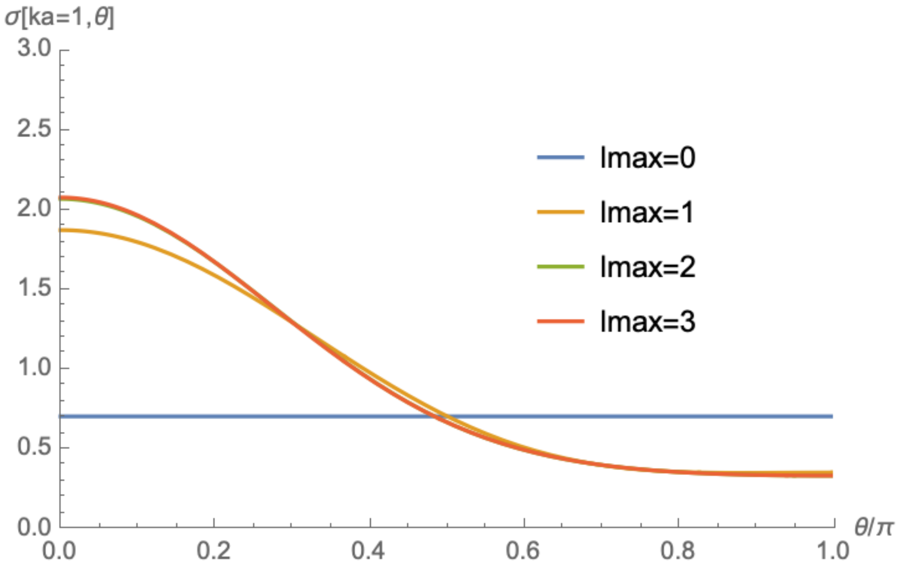
$$f_k^{(0)}(\theta) = -\frac{1}{k}e^{-ika}\sin(ka)$$

$$\sigma_k^{(0)}(\theta) = \frac{\sin^2(ka)}{k^2} \qquad \sigma_k^{(0)} = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2(ka)$$

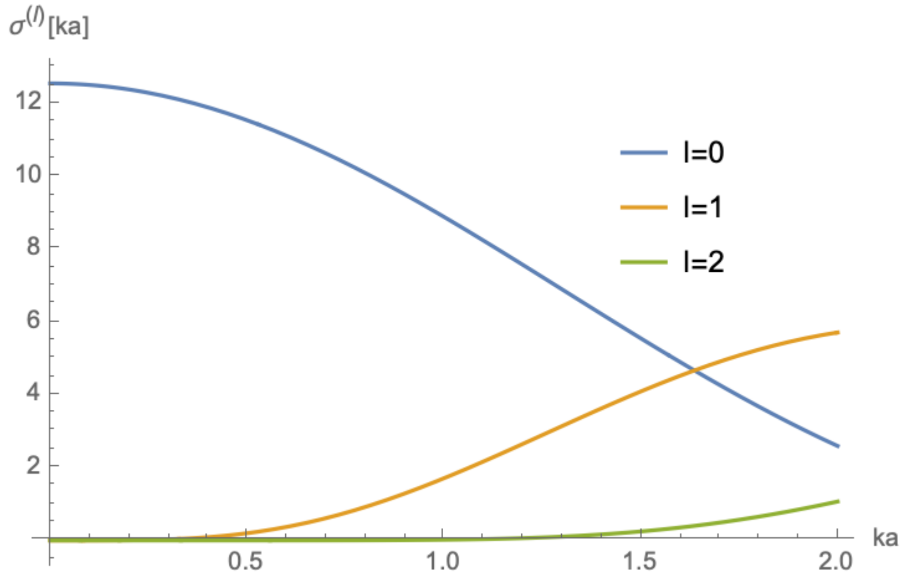
DEFASAGENS:



SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL TRUNCADA EM l_{max} $(ka=1)$



SEÇÕES DE CHOQUE PARCIAIS



SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL COM A SOMA EM l TRUNCADA EM l_{max}