

Estados da Partícula livre: Ondas planas versus ondas esféricas

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad \text{escolha a base}$$

que tal

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$$

$$|k_x\rangle \rightarrow p_x |k_x\rangle = \hbar k_x |k_x\rangle$$

$$\text{constrói } |\vec{k}\rangle = |k_x\rangle \otimes |k_y\rangle \otimes |k_z\rangle$$

$$H |\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} |\vec{k}\rangle$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |\vec{k}\rangle = \frac{p^2}{2m} |\vec{k}\rangle$$

$|\vec{k}\rangle \cdot \vec{r}$

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}}$$

No fundo o que fizemos foi provar
que $[H_0, \vec{p}] = 0$ e usamos uma base de
autoestados de $\vec{p} \rightarrow |\vec{k}\rangle$ ou se quiser $|E, \hat{k}\rangle$

Acontece que $[H, L^2] = [H, L_z] = 0$

então talvez devemos procurar por uma base

$|E, l, m\rangle$ onde

$$H^2 |E, l, m\rangle = E |E, l, m\rangle$$

$$L^2 |E, l, m\rangle = l(l+1) \hbar^2 |E, l, m\rangle$$

$$L_z |E, l, m\rangle = m \hbar |E, l, m\rangle$$

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta_{E'E} \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

Existindo tal base, talvez fosse interessante
fazer conexões

$$|E, l, m\rangle = \int d^3k |k\rangle \underbrace{\langle k | E, l, m \rangle}_{\text{coeficiente}}$$

provamos achar isto

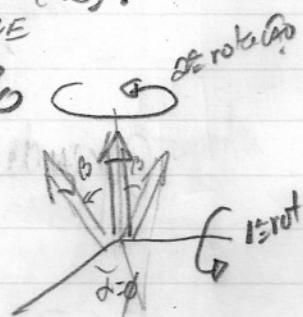
um chute (baseado nas propriedades esperadas)

$$\langle k | E, l, m \rangle = A g_{lE}(k) Y_l^m(\hat{k})$$

como provar? o que você espera de $g_{lE}(k)$?

Se acharmos $|k\hat{z}\rangle$, podemos rodá-lo

$$|k\rangle = D(\alpha=\phi, \beta=\theta, \gamma=0) |k\hat{z}\rangle$$



Assim vamos atrás de $|k\hat{z}\rangle$

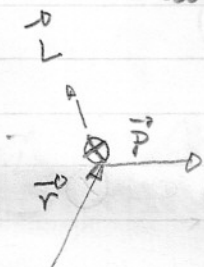
$$|k\hat{z}\rangle = |k_x=0, k_y=0, k_z\rangle$$

$$\langle z | k\hat{z} \rangle = (x p_y - y p_x) |k_x=0, k_y=0, k_z\rangle = 0$$

$$\text{pois } p_y (ou p_x) |k_x=0, k_y=0, k_z\rangle = 0$$

momento angular é nulo na direção de propagação

Classicamente $\vec{r} \times \vec{p}$



$$\vec{L} \cdot \vec{p} = (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{p} = \underline{\underline{0}}$$

mas se $\langle z | k\hat{z} \rangle = 0 \rightarrow |k\hat{z}\rangle$ é autovet de L_z com autovalor 0

$$\text{e } \langle z | E, l, m \rangle = m\hbar |E, l, m\rangle$$

$$\text{então } \langle E', l', m' | k\hat{z} \rangle = 0 \text{ se } m' \neq 0$$

autovet de um
operador Hermitiano
com autovalores distintos
são ortogonais

Aprendemos algo

$$|k\hat{z}\rangle = \sum_{E', l', m'} \int dE' |E', l', m'\rangle \langle E', l', m' | k\hat{z} \rangle \text{ pode ser reduzido a}$$

$$|k\hat{z}\rangle = \sum_{e'} \int dE' |E', l', m'=0\rangle \langle E', l', m'=0 | k\hat{z}\rangle$$

uma vez que $|\vec{k}\rangle = \mathcal{D}(\alpha=\phi, \beta=\theta, \gamma=0) |k\hat{z}\rangle$

$$\langle E, l, m | \vec{k}\rangle = \sum_{e'} \int dE' \langle E, l, m | \mathcal{D}(\alpha=\phi, \beta=\theta, \gamma=0) | E', l', m'=0\rangle$$

• $\langle E', l', m'=0 | k\hat{z}\rangle$

lembram que $\mathcal{D}$ é de fato um operador

que depende apenas de L_i e $\therefore$ é

incapaz de mudar l' e E' ($\mathcal{D} = \exp\left(-i\frac{J_z\alpha}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{J_y\beta}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{J_x\gamma}{\hbar}\right)$)

assim

$$\langle E, l, m | \vec{k}\rangle = \sum_{e'} \int dE' \delta(E-E') \delta_{ee'} \mathcal{D}_{m0}^{(e)}(\alpha=\phi, \beta=\theta, \gamma=0) \langle E', l', m'=0 | k\hat{z}\rangle$$

$$= \mathcal{D}_{m0}^{(e)}(\alpha, \phi, \beta=\theta, \gamma=0) \langle E, l, m=0 | k\hat{z}\rangle$$

isto é contido
3.6.52

$$\downarrow$$

$$\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^m(\hat{k}) \langle E, l, m=0 | k\hat{z}\rangle$$

$$\therefore \langle \vec{k} | E, l, m\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} g_{lE}(\vec{k}) Y_l^m(\hat{k}) \quad (\text{compare com prop. inicial})$$

concluímos que $g_{lE}^*(\vec{k}) = \langle E, l, m=0 | k\hat{z}\rangle$

$$g_{EE}(k)?$$

$$(H_0 - E) |E, l, m\rangle = 0$$

multiplicando por $\langle \vec{k} |$

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \langle \vec{k} | E, l, m \rangle = 0$$

assim $\langle \vec{k} | E, l, m \rangle$ deve ser zero sempre que $E \neq \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (i.e. função delta)

isto pode ser escrito como

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) g_{EE}(k) Y_l^m(\hat{k}) = 0$$

$g_{EE}(k)$ deve ser algo do tipo $N \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)$

lembre que $f(x) \delta(x-x_0) = f(x_0) \delta(x-x_0)$

precisamos achar N

que tal usarmos

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta(E' - E) \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$= \int d^3 k'' \langle E', l', m' | \vec{k}'' \rangle \langle \vec{k}'' | E, l, m \rangle$$

$$= \frac{4\pi}{2l+1} \int k''^2 dk'' \int d\Omega_{k''} \frac{1}{N} \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E\right) Y_l^{m'}(\hat{k}'')^* Y_l^m(\hat{k}'')$$

$$\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} = E'' \quad \rightarrow$$

$$\therefore \frac{\hbar^2 k''}{m} dk'' = dE''$$

$$\therefore k''^2 dk'' = \frac{m}{\hbar^2} k'' dE''$$

norm factor

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \frac{4\pi}{2l+1} \int \frac{m}{\hbar^2} k'' dE'' \int d\Omega_{k''} |N|^2 \delta(E'' - E') \delta(E'' - E) \\ Y_{l'}^{m'}(\hat{k}'') Y_l^m(\hat{k}'')$$

$$= \frac{4\pi}{2l+1} \frac{m}{\hbar^2} k |N|^2 \delta(E' - E) \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

$$= \delta(E' - E) \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad \therefore |N|^2 = \frac{\hbar^2}{mk} \frac{2l+1}{4\pi}$$

$$N = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

$$\langle \vec{k} | E, l, m \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_l^m(\hat{k})$$

$$\therefore \langle \vec{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar}{mk} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_l^m(\hat{k})$$

Assim como

$$|\vec{k}\rangle = \sum_l \sum_m \int dE |E, l, m\rangle \langle E, l, m | \vec{k}\rangle$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} |E, l, m\rangle \left| \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} Y_l^m(\hat{k}) \right|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

$$\langle \vec{x} | \vec{k}\rangle = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_l \sum_m \langle \vec{x} | E, l, m\rangle \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} Y_l^m(\hat{k})$$

Onde $\langle \vec{x} | E, l, m\rangle = C_l j_l(kr) Y_l^m(\hat{r})$

use teorema da Adição

$$\sum_m Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k}) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\hat{k}\cdot\hat{r})$$

exercício
mostre
sendo

que $C_l = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}}$

$$\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}}$$

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i} \int_{-1}^1 e^{ikr \cos\theta} P_l(\cos\theta) d(\cos\theta)$$

$$l=1$$

$$l=0$$

$$l=0$$

$$J=1$$

→

$$J=1$$

$$l=0 \rightarrow l=1$$

↓

$$\langle \vec{k} | E, l, m\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) Y_l^m(\hat{k})$$

$$|Y_1^{\pm 1}|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta$$

$$|Y_1^0|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta$$

$$Y_1^0$$

Método de Ondas Parciais

$V \neq 0$ mas (pl simplificar) $V(\vec{x}) = V(r)$

mas então se $[V, L^2] = [V, \vec{L}] = 0 \rightarrow$

$$T = V + V G_0^{(+)} V + V G_0^{(+)} V G_0^{(+)} V + \dots$$

Ab comuta com L^2 e $\vec{L}$ $\therefore T$ é um operador escalar

Apliação do teorema de Wigner Eckart (qdo S é operador escalar)

$$\langle \alpha', l', m' | S | \alpha, l, m \rangle = \delta_{l'l'} \delta_{m'm} \frac{\langle \alpha' l' || S || \alpha l \rangle}{\sqrt{2l+1}}$$

A banda dupla simples
que não depende de m e m'

Assim

$$\boxed{\langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle = T_E(E) \delta_{l'l'} \delta_{m'm}}$$

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{-1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$$

$$= \frac{-1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \sum_{l, m} \sum_{l', m'} \int dE \int dE' \langle \vec{k}' | E', l', m' \rangle \langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle$$

$\langle E, l, m | \vec{k} \rangle$ usando o fato de

$$\downarrow$$
$$\langle \vec{k} | E, l, m \rangle = \frac{1}{\sqrt{mk}} \delta(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) Y_l^m(\hat{k})$$

$$\therefore f(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{-1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{mk} \sum_{\substack{l, m \\ \text{somma}}} T_E(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} Y_l^m(\hat{k}') Y_l^{m*}(\hat{k})$$

$$\text{Assim } f(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{-4\pi^2}{k} \sum_{l, m} T_l(E) \left|_{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \right. Y_l^m(\hat{k}') Y_l^m(\hat{k})^*$$

Para obter a dependência angular da amplitude de espalhamento vamos escolher $\hat{k}$ na direção z

$$Y_l^m(\hat{k}) = Y_l^m(\hat{z}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0}$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

$$P_l^m(\cos\theta) = (1-\cos^2\theta)^{m/2} \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta)$$

$$P_l(\cos\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l (1-\cos^2\theta)^l}{d(\cos\theta)^l}$$

note

$$P_l(\cos\theta=1) = 1 \quad \forall \quad l \quad \begin{cases} l=0 \rightarrow 1 \\ l=1 \rightarrow \frac{-1}{2} \frac{d(1-\cos^2\theta)}{d\cos\theta} \Big|_{\cos\theta=1} = 1 \end{cases}$$

$$P_l^m(\cos\theta=1) \neq 0 \text{ só se } m=0 \text{ e se } m=0$$

$$P_l^0(\cos\theta) = P_l(\cos\theta)$$

$$\text{Assim } Y_l^0(\hat{k}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$$

só $m=0$ contribui

$$\text{defundo } f(k) = \frac{-\pi T_l(k)}{k} \quad \text{tenho}$$

$$f(\vec{k}', k) = f(\theta) = +4\pi \sum_{l,m} \left(-\frac{\pi T_l}{k} \right) \left| \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\theta) \right| \left| \frac{2l+1}{4\pi} S_{lm} \right|$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta)$$

¶ entender o significado físico de $f_l(k)$, vamos estudar o comportamento a longas distâncias de

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle \xrightarrow{r \text{ grande}} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}', \vec{k}) \right]$$

↓

$$\sum_l (2l+1) i^l f_l(k) P_l(\hat{k} \cdot \hat{r})$$

$$p| \quad r \rightarrow \infty \quad f_l(kr) \rightarrow \frac{e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)}}{2ikr} = \frac{-i}{2} \left[\frac{e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)}}{2ikr} \right]$$

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle \xrightarrow{\text{grande } r} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \frac{e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)}}{2ikr} + \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos\theta)}{2ik} \left[\left[1 + 2ik f_l(k) \right] \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr - l\pi)}}{r} \right]$$

↓

O potencial só afeta a onda esférica que sai

resumindo

$$\lim_{r \text{ grande}} \langle \alpha | \psi^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l}{2ik} \left[(1 + 2ik f_l(k)) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right]$$

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta)$$

haver e não haver espalhamento
 $\downarrow \qquad \qquad \downarrow$
 $1 + 2ik f_l(k) \rightarrow 1$ coeficiente do $\frac{e^{ikr}}{r}$

Se construíssemos pacotes, o pacote associado a $\frac{e^{ikr}}{r}$
 seria p/ $t \rightarrow cte \leq t \leq \infty$ e o
 associado a $\frac{e^{-ikr}}{r}$ p/ $-\infty \leq t \leq cte$

Assim com o $\psi^{(+)}$ contém a informação completa
 (antes e depois) o de se esperar que

$$\int_{\text{superfície}} \vec{J} \cdot d\vec{S} = 0$$

as partículas que entram devem sair
 (se não há fontes e sumidouros)

O fluxo associado a $\frac{e^{ikr}}{r}$ deve ser igual
 ao fluxo associado a $\frac{e^{-ikr}}{r}$. Isto
 deve valer p/ cada onda parcial

se definirmos $S_e \equiv 1 + 2ik f_e(k)$

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{im} \text{Im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi)$$

$$\int r^2 d\Omega \text{Im} \left(S_e \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} S_e \frac{e^{-ikr}}{r} \right) = \int r^2 d\Omega \text{Im} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} \right)$$

$$4\pi |S_e|^2 = 4\pi$$

reflexo da
conservação de fluxo

se $|S_e| = 1$ é sugestiva a seguinte definição: $S_e = e^{2i\delta_e}$
 Se δ_e é 2 p/convensão

O que deixa mais claro que a existência do potencial pode no máximo infligir uma mudança de fase na onda esférica emergente

A partir desta definição de $S_e = 1 + 2ik f_e = e^{2i\delta_e}$

podemos retomar a $f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_e(k) P_l(\cos\theta)$

$$f_e = \frac{e^{2i\delta_e} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_e} \text{sen} \delta_e}{k} = \frac{\text{sen} \delta_e}{k e^{-i\delta_e}} = \frac{\text{sen} \delta_e}{k(\cos \delta_e - i \text{sen} \delta_e)}$$

$$= \frac{1}{k(\cot \delta_e - i)}$$

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_e} \text{sen} \delta_e P_l(\cos\theta)$$

Para deduzir isto

usamos

apenas: Invariância Rotacional e conservação de Probabilidade