Estados ligados como polos de S_ℓ(k)

Ainda com respeito a estados ligados, vamos olhar algumas propriedades analíticas de $S_\ell(k)$ para $\ell = 0$. Para $r \to \infty$, lembre que a parte radial da função de onda é dada por $S_0(k)\dfrac{e^{ikr}}{r} - \dfrac{e^{-ikr}}{r}$. Compare isso com a função de onda para um estado ligado à grandes distâncias $\dfrac{e^{-\kappa r}}{r}$. Note que a existência de um estado ligado (na prática um "encaixamento" da onda no potencial), implica que soluções não triviais existem apenas para determinados valores de κ $(E < 0)$. Pode-se argumentar que $\dfrac{e^{-\kappa r}}{r}$ é o $\dfrac{e^{ikr}}{r}$ com $k = i\kappa$ imaginário puro. Se fizermos uma continuação analítica de $S_0(k)$ no plano complexo, esperaríamos que $S_0(i\kappa)$ fosse tão grande que a onda incidente $\dfrac{e^{-ikr}}{r}$ ficasse insignificante (faz sentido, pois estado ligado não tem onda esférica incidente). $S_0(i\kappa) \to \infty$ é o mesmo que pedir que no plano complexo S_0 tenha um polo em $i\kappa$. Algo do tipo $S_0 = \dfrac{g(k)}{k - i\kappa}$ com $g(i\kappa) \neq 0$.

lousa

Como $|S_0| = 1 \forall k, \Rightarrow |g|^2 = k^2 + \kappa^2$ que tal $g(k) = \begin{cases} e^{i\phi_1(k)}(k - i\kappa) & \text{(não serve)} \\ e^{i\phi_2(k)}(k + i\kappa) \end{cases}$

Estados ligados como polos de $S_\ell(k)$

Assim, temos $S_0 = \dfrac{e^{i\phi_2(k)}(k+i\kappa)}{k-i\kappa}$ satisfazendo $\begin{cases} (1)\ \text{polo simples em } i\kappa \\ (2)\ |S_0| = 1 \end{cases}$

Temos ainda duas condições a serem satisfeitas $\begin{cases} (3)\ \ \lim_{k\to 0} k\cot\delta_0 = -\frac{1}{a} \\ (4)\ \ \lim_{k\to\infty} \delta_0(k) = 0 \end{cases}$ lousa

A condição (3) diz que $\lim\limits_{k\to 0}\delta_0(k)$ não pode ser qualquer número, pois se

$\lim\limits_{k\to 0}\cot\delta_0 = c$ (número) $\Rightarrow \lim\limits_{k\to 0} k\cot\delta_0 = 0$ e não $-\dfrac{1}{a}$. Assim exige-se que

$\lim\limits_{k\to 0}\delta_0(k) = 0, \pm\pi, \ldots \Longrightarrow \boxed{\lim\limits_{k\to 0} S_0(k) = \lim\limits_{k\to 0} e^{2i\delta_0} = 1}\ \therefore\ \lim\limits_{k\to 0} e^{i\phi_2(k)} = -1$

O livro texto escolhe esta solução $S_0 = -\dfrac{(k+i\kappa)}{k-i\kappa}$ e reclama do fato que

$\lim\limits_{k\to\infty} S_0(k) = -1$ e não $1(\lim\limits_{k\to\infty}\delta_0 = 0)$. Para evitar isso, basta fazer

$\lim\limits_{k\to\infty} e^{i\phi_2(k)} = +1 \to \lim\limits_{k\to\infty} S_0(k) = +1$. A solução do livro na região $k \approx 0$

é suficientemente geral. Podemos calcular $f_0 = \dfrac{S_0 - 1}{2ik} = \dfrac{1}{-\kappa - ik}$ e

comparar com $f_0 = \dfrac{1}{k\cot\delta_0 - ik}$ ambas com $k \to 0$. Isso fornece

$(3)\ \lim\limits_{k\to 0} k\cot\delta_0 = -\kappa = -\dfrac{1}{a} \to \begin{cases} \kappa(>0)\ \textit{é o inverso do comprimento} \\ \textit{de espalhamento.}\ \ \lim_{k\to 0}\delta_0(k) = \pi \end{cases}$

estude o sinal de $k\cot\delta_0$

Espalhamento e Princípio da Causalidade

Vamos construir novamente um pacote de ondas espalhadas e analisar o princípio de causalidade (o pacote para ser espalhado, precisa primeiro encontrar o potencial). Vimos que as componentes do pacote são do tipo:

$$\lim_{r\to\infty}\langle \mathbf{x}|\Psi_k^{(+)}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left(e^{ik.z}+\frac{e^{ikr}}{r}f(\theta)\right)$$

e em ondas esféricas do tipo (potencial esfericamente simétrico):

$$\lim_{r\to\infty}\langle \mathbf{x}|\Psi_k^{(+)}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_\ell (2\ell+1)\frac{P_\ell(\cos\theta)}{2ik}\left(\underbrace{[1+2ikf_\ell(k)]}\frac{e^{+ikr}}{r}-\frac{e^{-i(kr-\ell\pi)}}{r}\right)$$

$$e^{2i\delta_\ell}\begin{cases}\textit{o potencial só afeta a}\\ \textit{onda esférica que sai}\end{cases}$$

Construindo o pacote (unidimensional para facilitar)

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t)=\int dk\ g(k)\Psi_k^{(+)}(\mathbf{x})e^{-i\frac{E}{\hbar}t},\ \text{onde}\ g(k)=e^{i\alpha(k)}|g(k)|\rightarrow\begin{cases}|g|\ \text{centrada}\\ \text{em}\ k_0.\end{cases}$$

Vamos supor que o espalhamento é dominado por um dado ℓ, e analizar as fases das ondas incidente e emergente.

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t)=\frac{(2\ell+1)}{(2\pi)^{3/2}}\int dk\frac{P_\ell}{2k}e^{i(\alpha(k)-\pi/2-\frac{E}{\hbar}t)}|g(k)|\left(\frac{e^{+i(kr+2\delta_\ell)}}{r}-\frac{e^{-i(kr-\ell\pi)}}{r}\right)$$

Espalhamento e Princípio da Causalidade

A condição de sobrevivência do pacote é garantir que a derivada com respeito à k das fases, calculada em k_0 (centro do pacote com respeito aos momentos) seja nula. Isto faz a integração em k "construtiva". Assim, temos para a

$$\text{onda que}\begin{cases}\text{sai:} & \frac{d}{dk}[kr + 2\delta_\ell + \alpha - \frac{\hbar k^2}{2m}t]_{k=k_0} = 0 \rightarrow r = \frac{\hbar k_0}{m}t - \frac{d\alpha}{dk}\Big|_{k_0} - 2\frac{d\delta_\ell}{dk}\Big|_{k_0} \\ \text{chega:} & \frac{d}{dk}[kr - \ell\pi - \alpha + \frac{\hbar k^2}{2m}t]_{k=k_0} = 0 \rightarrow r = -\frac{\hbar k_0}{m}t + \frac{d\alpha}{dk}\Big|_{k_0}\end{cases}$$

Considere agora dois eventos acontecendo em r_c e r_s nos instantes, t_c e t_s, respectivamente. Suponha que trata-se do pacote de onda cruzando uma casca esférica (raio a) onde V já é nulo. Primeiro o pacote chegando e depois o pacote saindo. Lembre que a condição acima, define o centro do pacote.

$$\text{Que tal?}\begin{cases}(1)\ r_c = -\frac{\hbar k_0}{m}t_c + \frac{d\alpha}{dk}\Big|_{k_0} \text{ onde } r_c \rightarrow \text{ pacote chegando em } t_c < 0. \\ (2)\ r_s = \frac{\hbar k_0}{m}t_s - \frac{d\alpha}{dk}\Big|_{k_0} - 2\frac{d\delta_\ell}{dk}\Big|_{k_0} \text{ onde } r_s \rightarrow \text{ pacote saindo, em } t_s > 0.\end{cases}$$

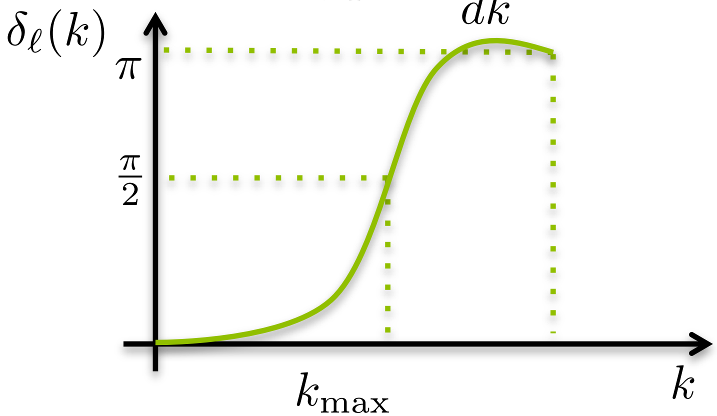
Some as equações (1) + (2) $\Rightarrow r_s + r_c = v(t_s - t_c) - 2\frac{d\delta_\ell}{dk}\Big|_{k_0}$

$$\text{onde}\begin{cases}(t_s - t_c) = \text{intervalo de tempo} \\ \qquad\qquad \text{entre chegar e sair.} \\ v = \frac{\hbar k_0}{m} = \text{velocidade do pacote.}\end{cases} \qquad \textit{Olharemos}\begin{cases}r_c = r_s = a \\ \text{eventos sobre} \\ \text{a casca}\end{cases}$$

Espalhamento e Princípio da Causalidade

Nestas condições $2a + 2\dfrac{d\delta_\ell}{dk} = v\Delta t \geq 0$. Ou seja $\dfrac{d\delta_\ell}{dk} \geq -a$ $\left\{\begin{array}{l}\text{Princípio da} \\ \text{casualidade} \\ \text{de Wigner}\end{array}\right.$

Possível, pois $\dfrac{d\delta_\ell}{dk} \geq -a$

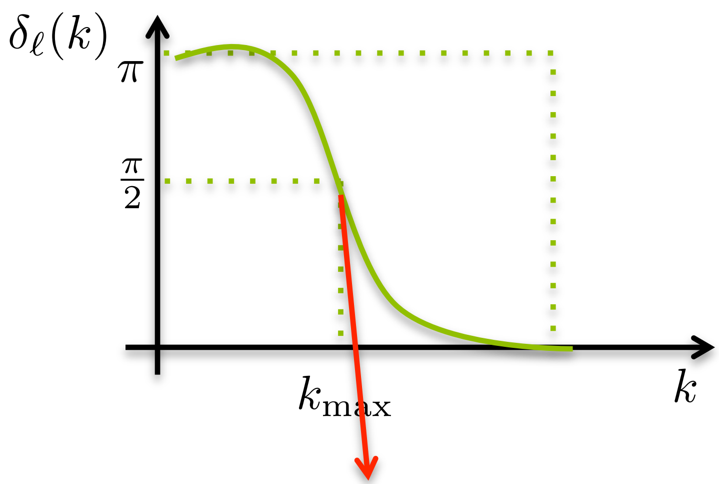


1) Suponha $\left.\dfrac{d\delta_\ell}{dk}\right|_{k=k_0} > 0$

Quanto mais positivo for $\dfrac{d\delta_\ell}{dk}$, maior será Δt, pois assim $v\Delta t - 2\dfrac{d\delta_\ell}{dk}$ permanece constante e igual à $2a$

Δt grande $\rightarrow$ atraso.

Não possível, pois $\dfrac{d\delta_\ell}{dk} \leq -a$



2) Suponha $\left.\dfrac{d\delta_\ell}{dk}\right|_{k=k_0} < 0$

Quanto mais negativo for $\dfrac{d\delta_\ell}{dk}$, menor será Δt, pois assim $v\Delta t - 2\dfrac{d\delta_\ell}{dk}$ permanece constante e igual à $2a$

Δt pequeno $\rightarrow$ adiantamento.

Derivada aqui é muito negativa: $\Delta t < 0$ viola causalidade!

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

Até aqui, resolvemos o problema a partir de $|\Psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V |\Psi^{(\pm)}\rangle$

No formalismo dependente do tempo, temos $|\phi\rangle \underset{V}{\overset{t}{\rightarrow}} |\Psi\rangle$. O que comanda esta mudança é $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\Psi, t\rangle = V|\Psi, t\rangle \rightarrow$ ket depende do tempo na presença de V. Condição de contorno? $t \rightarrow -\infty$ a partícula era livre. Que tal o artifício, já usado antes: $V \rightarrow \lim_{\eta\rightarrow 0} V e^{+\eta t}$. No curso de Física/Matemática, aprendemos que se soubermos a solução do problema: $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = \delta(t-t')$

a equação diferencial completa tem uma equivalente integral dada por:

$$|\Psi^{(+)};t\rangle = |\phi;t\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t,t') V |\Psi^{(+)};t'\rangle dt'.$$

Para verificar isso, aplique $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)$ nos dois lados e obtenha:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\Psi^{(+)};t\rangle = \underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\phi;t\rangle}_{0} +$$

$$+\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t')}_{\delta(t-t')} V|\Psi^{(+)};t'\rangle dt' = V|\Psi^{(+)};t\rangle$$

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

Para obter a solução de $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = \delta(t-t')$ exigimos primeiro que $G_+(t,t')$ só é diferente de zero, se $t > t'$, isto é, impomos a condição de contorno retardada $G_+(t,t') = 0$ se $t < t'$. Para $t > t'$, queremos a solução da equação $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = 0 \xrightarrow{\text{direta}} G_+(t,t') = A(t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$. Em $t = t'$, ela precisa satisfazer $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = \delta(t-t')$. Lembrando que $\frac{\partial}{\partial t}\Theta(t-t') = \delta(t-t')$, sugerimos um G_+ dado por:

$$\boxed{G_+(t,t') = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}}$$

Para verificar a sugestão, substitua $G_+(t,t')$ no lado esquerdo da equação do topo e obtenha

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t,t') = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)[-\frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}] =$$

$$= [\frac{\partial}{\partial t}\Theta(t-t')]e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} + \Theta(t-t').\frac{-i}{\hbar}H_0e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} +$$

$$+ \frac{i}{\hbar}H_0.\Theta(t-t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} = \delta(t-t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} = \delta(t-t') \text{ c.q.d.}$$

usamos na última passagem que $f(x)\delta(x-x_0) = f(x_0)\delta(x-x_0)$

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

Assim $|\Psi^{(+)};t\rangle = |\phi;t\rangle + \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t,t')V|\Psi^{(+)};t'\rangle dt'$, com

$$G_+(t,t') = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}$$

- *Note que o $+\infty$ pode ser trocado por t (devido a função degrau);*
- *Note também que a exponencial é o operador de evolução temporal.*
- *Será que a condição de contorno está correta?*

  Quanto vale $|\Psi^{(+)};t\rangle$ quando $t \to -\infty$? $|\Psi^{(+)};t\rangle = |\phi;t\rangle$, pois $t < t'$ e a função degrau zera a contribuição da integral.
- *Como relacionar esta equação com a equação de Lippmann-Schwinger independente do tempo?*

Suponha que $\begin{cases} |\Psi^{(+)};t\rangle \text{ é solução estacionária de } H \\ \\ |\phi;t\rangle \text{ é solução estacionária de } H_0 \end{cases}$

O que equivale à $\begin{cases} |\Psi^{(+)};t\rangle = |\Psi^{(+)}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ \\ |\phi;t\rangle = |\phi\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \end{cases} \Longrightarrow$ note o mesmo E.

Como já havíamos discutido a energia é a mesma, independente se o potencial está ligado ou não. Coloque isso na equação do topo.

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

$$|\Psi^{(+)}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = |\phi\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + \int_{-\infty}^{t} -\frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}V|\Psi^{(+)}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et'}dt',$$

que em $t=0$, temos

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \int_{-\infty}^{0} -\frac{i}{\hbar}\underbrace{\Theta(-t')}_{1,\ \text{porque}\ -t'\ \text{é sempre positivo}} e^{+\frac{i}{\hbar}(H_0-E)t'}V|\Psi^{(+)}\rangle dt'.$$

Lembrando que $V(t)=e^{\eta t}V$, podemos escrever:

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar}\lim_{t''\to-\infty}\int_{t''}^{0} e^{+\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t'}V|\Psi^{(+)}\rangle dt' =$$

$$= |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar}\lim_{t''\to-\infty}\frac{\hbar}{i(H_0-E-i\eta)}e^{+\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t'}\Big|_{t''}^{0}V|\Psi^{(+)}\rangle$$

$$= |\phi\rangle + \frac{1}{(E-H_0+i\eta\hbar)}\left(1-\underbrace{\lim_{t''\to-\infty}e^{+\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t''}}_{0,\ \text{pois}\ \lim_{t''\to-\infty}e^{\eta\hbar t''}=0}\right)V|\Psi^{(+)}\rangle$$

E assim, obtemos a Eq. de Lippmann-Schwinger (independente do tempo)

$$\boxed{|\Psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\eta\hbar}V|\Psi^{(+)}\rangle}$$

Instituto de Física Gleb Wataghin

slide 1

O Apêndice B.5 traz as soluções de problemas centrais (potenciais esfericamente simétricos $V=V(r)$). Tomando $u_E(r)=rR_E(r)$, em $\psi_E(r,\theta,\phi)=R_E(r)Y_\ell^m(\theta,\phi)$, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_E}{dr^2}+\left[V(r)+\frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right]u_E=Eu_E.$$

Para regiões onde

$$V_{\text{eff}}=V(r)+\frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2}=0\Rightarrow u_E(r)\propto e^{-\kappa r},\ \text{e}\ R_E(r)\propto\frac{e^{-\kappa r}}{r}\ \text{com}\ E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}.$$

slide 2

lousa

Isso tem um argumento sutil, baseado em uma propriedade de continuidade da fase, com respeito à k. Pede-se que após atingir um máximo próximo de $\pi/2$ decresça até atingir zero quando k for infinito.

Joachain, em "Quantum Collision Theory

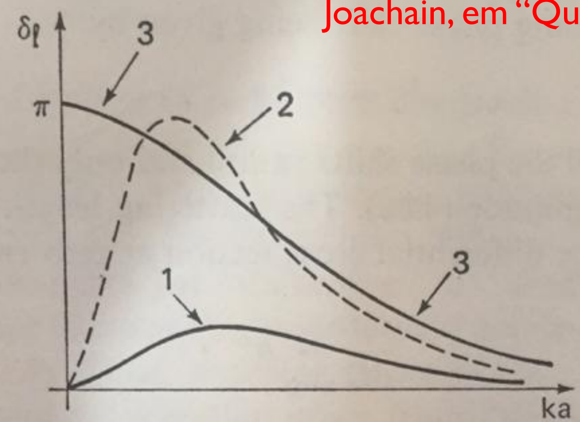


Fig. 4.7. The low-energy behaviour of a phase shift δ_l for $l > 0$. Curve 1 corresponds to a very weak potential, curve 2 to a potential which nearly supports one bound state of angular momentum l and curve 3 to a potential which can produce one loosely bound state having the angular momentum l.

Let us now consider the phase shifts δ_l at high energies, for which $ka \gg l$. In this case we can use the asymptotic forms (C.12a) and (C.12b) to deduce from eqs. (4.113a) and (4.153) that

$$\delta_l(k) \underset{ka \gg l}{\simeq} -(ka - \tfrac{1}{2}l\pi) + \tan^{-1}\left[\frac{k}{\kappa}\tan(\kappa a - \tfrac{1}{2}l\pi)\right]. \qquad (4.176)$$

Hence, if we require that the phase shift be a continuous function of k, we see from eq. (4.176) that for $ka \gg l$ the quantity δ_l will decrease continuously as k increases [36] until

$$\lim_{k\to\infty} \delta_l(k) = 0. \qquad (4.177)$$

Instituto de Física Gleb Wataghin