

AULA 7

MECÂNICA QUÂNTICA II

AULA 7

2.4) Validade da Aproximação de Born

$$\psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}) - e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}')$$

para potenciais de curto alcance o maior efeito vem da região próxima a $r=0$

$$\left| \cancel{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}} - \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}) \right|_{\vec{x}=0} = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'}}{|\vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}')$$

$$\approx \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'}}{|\vec{x}'|} V(\vec{x}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'}$$

$$= \frac{2\mu}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr e^{ikr} \sin(kr) V(r) \equiv I \quad \left(\text{para um potencial esfericamente simétrico} \right)$$

Vejamos quando o desvio da solução correta ($\approx I$) é pequeno;
o que ocorre nos seguintes casos:

(1) Altas energias: se o potencial tiver alcance $\underline{a}$ para $ka \gg 1$ o lema de Riemann $\Rightarrow$ a integral I se anula.

(2) Baixas energias i.e. $ka \ll 1$.

Nesse caso

$$I \rightarrow \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr \, r V(r) \Rightarrow \left| \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr \, r V(r) \right| \ll 1 \quad (28)$$

Condição de validade.

EXEMPLO :

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases}$$

a condição de validade da aproximação de Born para
 $ka \ll 1$ e'

$$\left| \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^a (-V_0) r dr \right| = \frac{2\mu}{\hbar^2} |V_0| \frac{a^2}{2} \ll 1. \text{ que é a condição para não existir estado ligado}$$

2.5) Propriedades de Simetria de Amplitude de Espalhamento

Elastico

(1) se a interação for invariante por rotação

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle, \text{ a amplitude de}$$

espalhamento elástico, só pode depender de quantidades
invariantes i.e. $\vec{k}^2 = \vec{k}'^2 = k^2$ e $\vec{k} \cdot \vec{k}'$

$$\therefore f(\vec{k}', \vec{k}) = f(k, \theta) = f_k(\theta) \quad (29)$$

(2) se a interação for invariante por paridade

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = f(-\vec{k}', -\vec{k}) \quad (30)$$

(3) se a interação for invariante por reversão temporal

Vimos que

$$\langle a | A | b \rangle = \langle b^R | I_t A^\dagger I_t^{-1} | a^R \rangle$$

$$\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle = \langle -\vec{k} | I_t T^\dagger I_t^{-1} | -\vec{k}' \rangle \xrightarrow{\text{invariante}} \langle -\vec{k} | T | -\vec{k}' \rangle$$

$$\Rightarrow \therefore f(\vec{k}', \vec{k}) = f(-\vec{k}, -\vec{k}') \quad (31)$$

Já vimos isso em 1D, em problemas de espalhamento com potencial $V(x)$ arbitrário (que não é invariante por reflexão) as amplitudes de espalhamento (transmissão e reflexão) não dependem se a onda incidente vem de esquerda ou de direita do potencial! c.f. (16)

$$I_t |\vec{k}^+\rangle = |-\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon} \overset{\text{invariante}}{V} I_t |\vec{k}^+\rangle$$

onde espalha de para a entrar (não sair)!

Isso permite definir

$$|\vec{k}^-\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon} V |\vec{k}^-\rangle \quad (32)$$

~~2.5)~~ esse estado é um estado com uma onda esférica entrando que espalha produzindo o autoestado de momento $|\vec{k}\rangle$ de acordo com (32)

$$I_t |\vec{k}^+\rangle = |-\vec{k}^-\rangle \quad (33)$$

(2.6) Ondas Parciais

Existe uma representação da amplitude de espalhamento que é especialmente conveniente para potenciais sfericamente simétricos. Como a onda incidente $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ é invariante por rotação em torno do eixo z e H é invariante sob rotação, então a função de onda deve ser invariante por rotação em torno do eixo z , i.e. independente do ângulo azimutal ϕ . Podemos escrever a função de onda completa:

$$\psi_{\vec{k}}^+(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) \quad (34)$$

soma de ondas parciais

a onda plana pode ser escrita como

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) \quad (35)$$

onde $j_l(kr)$ são as funções de Bessel esféricas

Para achar a amplitude de espalhamento, precisamos considerar a diferença de (34) e (35) para $r \rightarrow \infty$

$$j_e(kr) \sim \frac{1}{2ikr} \left(e^{i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} - e^{-i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} \right) \quad r \rightarrow \infty \quad (36)$$

Superposição de ondas esféricas entrando e saindo.

Embora $R_e(k)$ seja desconhecido na região da interação, sua forma assintótica deve ser

$$R_e(r) \sim \frac{1}{2ikr} \left(\eta_e(k) e^{i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} - e^{-i(kr - \frac{1}{2}l\pi)} \right) \quad r \rightarrow \infty \quad (37)$$

Causalidade requer que ondas entrando sejam inalteradas pela interação.

Conservação de probabilidade implica que a amplitude da onda saindo deve ser igual ou menor que a da onda entrando, $|\eta_e(k)| \leq 1$

No caso de espalhamento elástico, $|\eta_e(k)| = 1$. pois a probabilidade de emergir do colisão com a energia incidente deve ser igual a de ser incidente com esse energia. Nesse caso é conveniente introduzir a chamada defasagem $S_e(k)$

$$\eta_e(k) = e^{2iS_e(k)} \quad (38)$$

Nesse caso

$$R_e(r) \sim \frac{1}{kr} e^{iS_e} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + S_e\right) \quad r \rightarrow \infty \quad (39)$$

para um processo puramente elástico.

Note que existe sempre um processo elástico, mesmo que não haja processo inelástico.

$$\psi_{el}(\vec{r}) = e^{ikz} + \psi_{sc}(\vec{r}) \quad (40)$$

(18)

$$\psi_{\text{esp}}(\vec{r}) \sim \frac{1}{2ik} \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\gamma_l - 1) P_l(\cos\theta) \quad (41)$$

assim vemos que

c.f. (14')

$$\psi_{\text{el}}(\vec{r}) \sim e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f_{\text{el}}(\theta) \quad (42)$$

de forma que a amplitude de espalhamento elástico é

$$\begin{aligned} f_{\text{el}}(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\gamma_l - 1) P_l(\cos\theta) \\ &\equiv \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \quad (43) \end{aligned}$$

$f_l(k)$ é chamada de amplitude de onda parcial. Assim

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} = |f_{\text{el}}(\theta)|^2$$

$$\text{mas } \int d\Omega P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}$$

$$\sigma = \int \frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} d\Omega = \int |f_{\text{el}}(\theta)|^2 d\Omega = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1) (2l'+1)$$

$$|f_l(k)|^2 P_l(\cos\theta) P_l(\cos\theta) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |f_l(k)|^2 \quad (44a)$$

$$= \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |\gamma_l - 1|^2 \quad (44b)$$

A contribuição maior de qualquer onda parcial é $|\eta_l - 1| = 2$, e logo a seção de choque de onda parcial

$$\sigma_{el}(l) = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |\eta_l - 1|^2 \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (45)$$

Esse limite é dado pela conservação de probabilidade, e não pode ser atingido. $\eta_l = -1 \Rightarrow$ não pode haver espalhamento inelástico nessa seção de choque parcial.

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

$$= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos\theta) \quad (46)$$

$$\sigma_{el} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (47)$$

Note que

$$j_l(kr) \rightarrow \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \quad r \rightarrow 0 \quad (48)$$

como

$$(2l+1)!! \equiv \frac{\Gamma(2l+2)}{2^l \Gamma(l+1)} \sim 2^{l+\frac{3}{2}} \left(\frac{l}{e}\right)^{l+1} \left(1 + \frac{1}{l}\right)^{l+1} \quad l \gg 1 \quad (49)$$

fórmula de Sterling

$$f_l(kr) \rightarrow \frac{e}{l} \left(1 + \frac{1}{l}\right)^{-l-1} \frac{\sqrt{2}}{4} \left(\frac{e kr}{2l}\right)^l, \quad l \gg 1.$$

assim se $ka \equiv l_0$, onde a é o alcance da interação, então vemos que para $l \gg l_0$ a onda incidente dificilmente chega até o ponto de interação e podemos esperar que $\eta_l \rightarrow 1$ para esses valores de l . Isso fez com que a expansão em ondas parciais seja útil especialmente à baixas energias, p/ k pequeno, pois nesse caso apenas poucas ondas parciais constituem para a região de choque.

Experimentalmente precisamos determinar nesse espalhamento elástico de baixa energia poucos parâmetros complexos η_l e usamos para isso as distribuições angulares, i.e. se $ka \leq 1$

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{1}{4k^2} \left| (\eta_0 - 1) + 3(\eta_1 - 1) \cos \theta \right|^2 \simeq \frac{1}{4k^2} (|\eta_0 - 1|^2 + \epsilon \cos \theta)$$

$$\epsilon = 6 \operatorname{Re} [(\eta_0 - 1)(\eta_1^* - 1)] \ll 1$$

2.7) Partícula livre em coordenadas esféricas (revisão MQI)

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu}, \quad \vec{L}^2 \text{ e } L_z \text{ podem ser diagonalizados simultaneamente } \{ |Elm\rangle \}$$

$$\langle \vec{x} | Elm \rangle = R_l(r; E) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

onde $R_\ell(r; E)$ satisfaz a equação radial:

$$\frac{d^2 R_\ell(r; E)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_\ell(r; E)}{dr} + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_\ell(r; E) = 0$$

$$\text{com } k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

esta é a equação de Bessel esférica com solução geral

$$R_\ell(r; k) = A j_\ell(kr) + B n_\ell(kr) \quad \text{ou} \quad C h_\ell^{(1)}(kr) + D h_\ell^{(2)}(kr)$$

onde as funções de Bessel esféricas são dadas por:

$$h_\ell^{(1)} = j_\ell(x) + i n_\ell(x) \quad h_\ell^{(2)}(x) = j_\ell(x) - i n_\ell(x)$$

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

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

Comportamento assintótico para $x \rightarrow 0$ e'

$$j_\ell(x) \rightarrow \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!}$$

$$n_\ell(x) \rightarrow -\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}}$$

enquanto que para $x \rightarrow \infty$

$$j_\ell(x) \rightarrow \frac{\sin(x - \ell\pi/2)}{x}$$

$$n_\ell(x) \rightarrow -\frac{\cos(x - \ell\pi/2)}{x}$$

$$h_e^{(1)}(x) \rightarrow -i e^{-ix/2} \frac{e^{ix}}{x}$$

$$h_e^{(2)}(x) \rightarrow i e^{ix/2} \frac{e^{-ix}}{x}$$

2.8) Espalhamento Ressonante

No formalismo de ondas parciais, podemos escrever

$$\sigma_{el} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad \text{onde} \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Dizemos que temos um espalhamento ressonante na onda l , se $\sin^2 \delta_l$ for máximo a energia $\bar{E}$. Para energias próximas a $\bar{E}$, σ_l tem um "comportamento universal". De fato para $\delta_l(\bar{E}) = \pi/2$ expandimos

$$\cotg \delta_l(E) \cong \cotg \delta_l \Big|_{\bar{E}} - \frac{2}{\Gamma} (E - \bar{E}) + \dots \quad (50)$$

$$\text{Escrevendo: } e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \frac{1}{\cotg \delta_l - i} \Rightarrow \sin \delta_l = \frac{-\Gamma/2}{(E - \bar{E}) + i\Gamma/2}$$

$$\Rightarrow \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - \bar{E})^2 + \Gamma^2/4} \quad (51)$$

EXEMPLO: Considere o potencial $V(r) = -\frac{\lambda \hbar^2}{2\mu} \delta(r-a)$

A equação radial para $l=0$ é

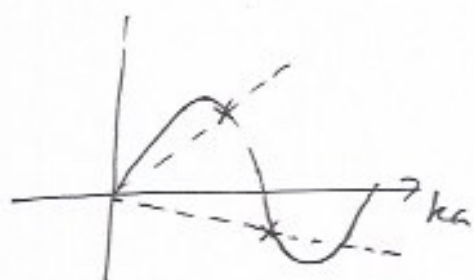
$$\frac{d^2 u_0}{dr^2} + \lambda \delta(r-a) u_0 = -k^2 u_0$$

$$\Rightarrow u_0(r) = \begin{cases} A \sin kr & r < a \\ B \sin(kr + \delta_0) & r \geq a \end{cases}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{continuidade em } r=a \\ \text{salto da derivada em } r=a \end{array} \right\} \begin{array}{l} A \sin ka = B \sin(ka + \delta_0) \\ k B \cos(ka + \delta_0) - k A \cos ka = -\lambda A \sin ka \end{array}$$

$$\tan \delta_0 = -\frac{\lambda}{k} \frac{\sin^2 ka}{1 + \frac{\lambda}{2k} \sin(2ka)}$$

Para termos uma ressonância $\sin(2ka) = -\frac{2ka}{\lambda a}$
a existência de ressonância depende do valor de λ !

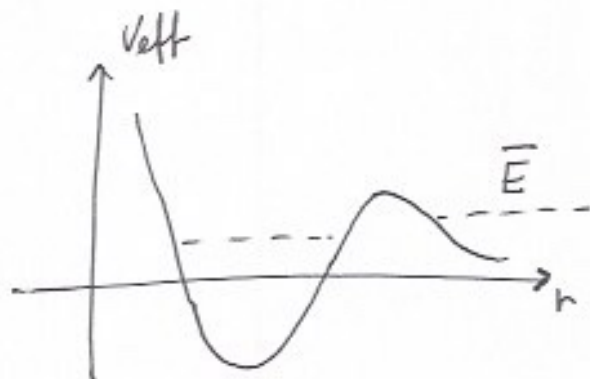


Qual o origem das ressonâncias?

Dado $V(r)$ temos que resolver

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_e}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) u_e = E u_e$$

$$\text{onde } V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2}$$



Na energia $\bar{E}$ temos um estado ligado,
mas como a barreira é finita temos um estado
quase "livre".