

AULA 11

MECÂNICA QUÂNTICA II

(ii) Espalhamento Spin 1/2 ⊗ Spin 1/2

Nesse caso o espaço dos spins tem dimensão $N_S = 4$.
Dado que a soma de 2 spins 1/2 resulta em um spin total 0 (singlete) ou 1 (triplete) no caso de partículas distinguíveis podemos escrever para interações invariantes por paridade

$$M(\vec{k}_i, \vec{k}_f) = M_S(\vec{k}_i, \vec{k}_f) + M_T(\vec{k}_i, \vec{k}_f) \quad (3.93)$$

onde $M_S(T)$ atua apenas sobre o singlete (triplete) como vimos }
p/spin total zero $\Rightarrow l = 0, 2, 4, \dots$ par
p/spin total 1 $\Rightarrow l = 1, 3, 5, \dots$ ímpar

Logo se a interação for invariante por paridade não há mistura entre esses estados de l par e ímpar.
 \Rightarrow não há mistura entre estados singlete e triplete!

* Importante: Mesmo para interações independentes de spin, o princípio de Pauli leva a correlação entre spins
exemplo: a baixa energia o espalhamento elástico é dominado por ondas s ($l=0$) \Rightarrow o estado é singlete, i.e. os spins devem ser anti-paralelos.

Para partículas idênticas: M_S deve ser simetrizado enquanto M_T deve ser anti-simetrizado

$$M(\vec{k}_i, \vec{k}_f) = [M_S(\vec{k}_i, \vec{k}_f) + M_S(\vec{k}_f, \vec{k}_i)] + [M_T(\vec{k}_i, \vec{k}_f) - M_T(\vec{k}_f, \vec{k}_i)] \quad (3.94)$$

Se $\mathcal{P}_{S(T)}$ é o projetor do singlete (triplete) podemos escrever (3.93) como

$$M = f_S(k, \theta) \mathcal{P}_S + f_T(k, \theta) \mathcal{P}_T \quad (3.93')$$

enquanto que (3.94) toma a forma

$$M = [f_S(k, \theta) + f_S(k, \pi - \theta)] \mathcal{P}_S + [f_T(k, \theta) - f_T(k, \pi - \theta)] \mathcal{P}_T \quad (3.94')$$

Explicitamente

$$\mathcal{P}_S = \frac{1}{4} [1 - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2] \quad \mathcal{P}_T = \frac{1}{4} (3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (3.95)$$

vimos que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{Tr} [M \rho_i M^\dagger]$$

onde ρ_i é a matriz densidade do estado inicial

$$\rho_f = \frac{M \rho_i M^\dagger}{\frac{d\sigma}{d\Omega}}$$

A forma mais geral de ρ_i é

$$\rho_i = \frac{1}{4} (\mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{P}_1 \otimes \mathbb{1}_2 + \mathbb{1}_1 \otimes \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{P}_2 + \sum_{j,k} c_{jk} \sigma_{1,j} \sigma_{2,k})$$

como o caso não polarizado corresponde a $\vec{P}_1 = \vec{P}_2 = 0$
 c_{jk} , assim no caso de estados inicialmente não polarizados

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{Tr} \left[\left\{ (f_S(\theta) + f_S(\pi-\theta)) \mathcal{P}_S + (f_T(\theta) - f_T(\pi-\theta)) \mathcal{P}_T \right\} \right]$$

$$\frac{1}{4} \mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \left\{ (f_S^*(\theta) + f_S^*(\pi-\theta)) \mathcal{P}_S + (f_T^*(\theta) - f_T^*(\pi-\theta)) \mathcal{P}_T \right\}$$

$$= \text{Tr} \left[\left\{ (f_S(\theta) + f_S(\pi-\theta)) \frac{1}{4} (\mathbb{1} - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) + (f_T(\theta) - f_T(\pi-\theta)) \frac{1}{4} (\mathbb{1} + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \right\} \right]$$

$$\frac{1}{4} \left\{ (f_S^*(\theta) + f_S^*(\pi-\theta)) \frac{1}{4} (\mathbb{1} - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) + (f_T^*(\theta) - f_T^*(\pi-\theta)) \frac{1}{4} (\mathbb{1} + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \right\}$$

$$= \frac{1}{4} |f_S(\theta) + f_S(\pi-\theta)|^2 + \frac{3}{4} |f_T(\theta) - f_T(\pi-\theta)|^2 \quad (3.96)$$

obtendo o resultado que havíamos previsto!

3.11) Estados Ligados e Amplitude de Espalhamento

Vimos que a equação de Lippmann-Schwinger leva à equação integral na representação de coordenadas

$$\psi_E^{(+)}(\vec{r}) = \psi_E^{(+)}(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_E^{(+)}(\vec{r}')$$

onde $U(\vec{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}')$

É útil também descrever o problema de estado ligado em termos de uma equação integral, nesse caso não há solução para a equação $(E - H_0) |\psi\rangle = 0$ para energias negativas

assim
$$\psi_{\text{bound}}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_{\text{bound}}(\vec{r}') \quad (3.97)$$

$k \rightarrow i\alpha$, $E_b = -\frac{\alpha^2}{2m}$

se o potencial cair suficientemente rápido de forma que $\frac{r'}{r} \rightarrow 0$ e $r \rightarrow +\infty$, a forma assintótica de

função de onda ligada é

$$\psi_{\text{bound}}(\vec{r}) \sim \frac{e^{-\alpha r}}{r} C \quad E_b = -\frac{\alpha^2}{2m}$$

Essa é uma relação universal entre a energia de ligação e a forma assintótica de ψ_{bound} leva ao aparecimento de polos na amplitude de espalhamento p/ $\text{Im} k > 0$ (k puramente imaginária!) ligados aos estados ligados.

É possível mostrar que

$$-\frac{e^{ikR}}{4\pi R} = \sum_{lm} G_k^{(l)}(r; r') Y_{lm}^*(\hat{r}) Y_{lm}(\hat{r}') \quad (3.98)$$

onde $G_k^{(l)}(r; r') = -ik j_l(kr_{<}) h_l(kr_{>}) \quad (3.99)$

onde $r_{<} (r_{>})$ significa o menor (maior) entre r e r' .

Podemos fazer a decomposição de (3.97) usando (3.98) e

(3.99): $Re(k; r) \rightarrow F_\alpha(\alpha; r), \quad k \rightarrow i\alpha$

~~$$F_\alpha(\alpha; r) = \alpha \int_0^\infty r'^2 dr' j_\alpha(i\alpha r_{<}) h_\alpha(i\alpha r_{>}) U(r') F_\alpha(\alpha; r')$$~~

$$F_\alpha(\alpha; r) = \alpha \int_0^\infty r'^2 dr' j_\alpha(i\alpha r_{<}) h_\alpha(i\alpha r_{>}) U(r') F_\alpha(\alpha; r') \quad (4.0)$$

lembrando que

$$Re(k; r) = j_c(kr) + \int_0^\infty r'^2 dr' G_k^{(l)}(r, r') U(r') Re(k; r') \quad (4.1)$$

$k \rightarrow z$

Definimos $Re(z; r)$ onde $z \in \mathbb{C}$, mas

$j_\alpha(zr)$ diverge exponencialmente com $|zr| \rightarrow \infty$ a não ser que $\text{Im } z = 0$. O termo de espalhamento, por outro

lado converge com $|zr| \rightarrow \infty$ se $\text{Im } z > 0$ pois h_α cai exponencialmente nesse caso. Consideremos

$$(z-z_0) Re(z; r) = (z-z_0) j_\alpha(zr) - i z \int_0^\infty r'^2 dr' j_\alpha(zr_{<}) h_\alpha(zr_{>})$$

$$U(r') (z-z_0) Re(z; r') \quad (4.2)$$

P/ valores arbitrários de z_0 esta equação deve refletir

$$0 = 0 \quad \text{p/ } z = z_0$$

Se R_ℓ tiver um polo simples em z_0 , então nas vizinhanças desse ponto

$$R_\ell(z; r) = \frac{F_\ell(z_0; r)}{z - z_0} + \text{res.} \quad \begin{array}{l} \swarrow \\ \text{função regular} \\ \text{em } z_0 \end{array}$$

O resíduo $F_\ell(z_0; r)$ no polo deve satisfazer:

$$F_\ell(z_0; r) = -i z_0 \int_0^\infty r'^2 dr' J_\ell(z_0 r') Y_\ell(z_0 r') U(r') F_\ell(z_0, r)$$

isso é exatamente (4.0) c) $\alpha \rightarrow -i z_0$, logo $F_\ell(z_0, r)$ é uma solução quadrado integrável de equação radial com autovalor $z_0^2/2m$, mas todas as soluções quadrado integráveis tem autovalores reais, negativos $\rightarrow z_0$ deve estar no eixo imaginário positivo

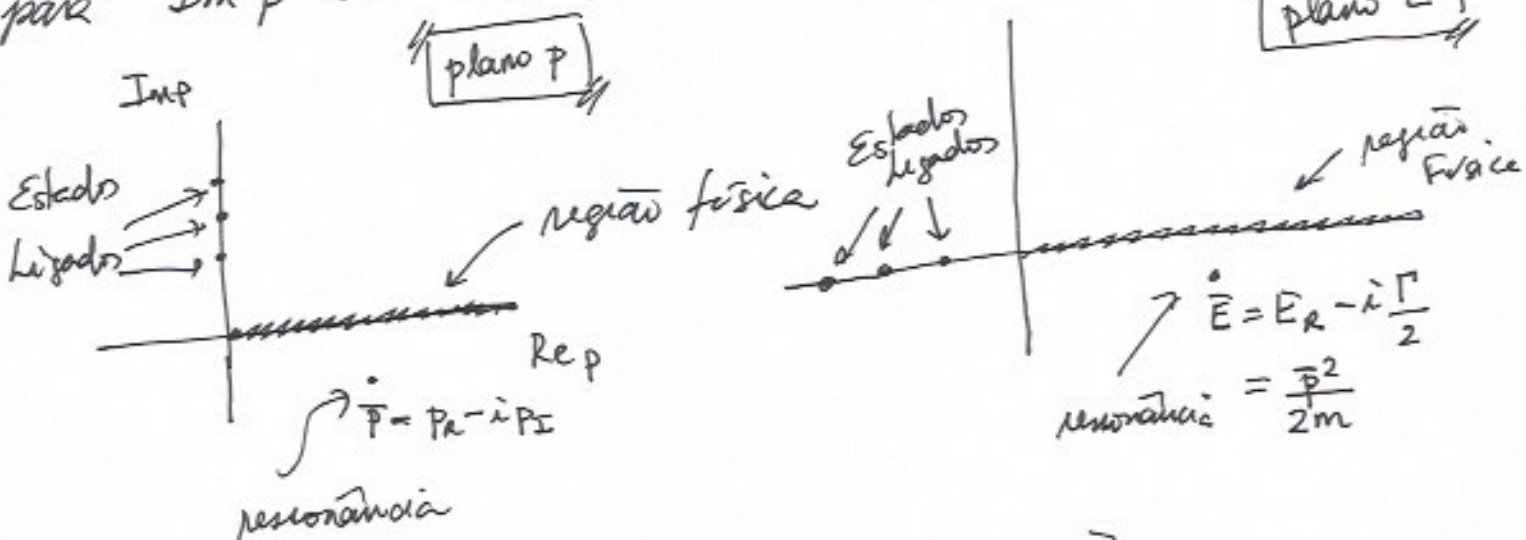
\therefore Soluções radiais do contínuo $R_\ell(k; r)$ devem ter polos no eixo imaginário positivo de k . nos pontos $i \frac{\sqrt{2m|E_\ell|}}{\hbar}$, onde E_ℓ é autovalor do estado ligado de momento angular ℓ , com resíduo igual à função de onda radial do estado ligado! Nesse argumento assumimos que os polos são simples, de fato eles o são, o que não vamos provar aqui. $R_\ell(k; r)$ não pode ter singularidade em outros pontos do plano superior $\text{Im } k > 0$, mas nada pode ser concluído com relação ao plano $\text{Im } k < 0$

3.12) Espalhamento, Estados Ligados e Ressonância

O momento $p = |\vec{p}|$ da partícula incidente é uma quantidade real e positiva. Mas para estudar as propriedades de Equação radial e suas soluções é útil admitir que p possa ser um número complexo arbitrário. É possível mostrar que para certos potenciais polos $S_e(k)$, onde

$$f_e(k, \theta) = \frac{S_e(k) - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_e(k)} \sin \delta_e(k)}{k}; \quad S_e(k) = e^{2i\delta_e(k)}$$

para $\text{Im } p > 0$ correspondem a estados ligados
 para $\text{Im } p < 0$ correspondem a ressonâncias



[Cap 12 e 13. Scattering Theory, John R. Taylor]

Vamos dar um exemplo usando o potencial

$$V(r) = \gamma \delta(r - r_0)$$

há poucos potenciais que podem ser calculados analiticamente de forma simples e que exibem ressonâncias

Se $\gamma < 0$ esse potencial tem estados ligados. Por outro lado se $\gamma \rightarrow \infty$ as regiões $r < r_0$ e $r > r_0$ estão desacopladas. Vamos calcular S_0 , i.e. $l=0$

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) - k^2 \right] (r R_0) = 0$$

$$u_0 = R_0(r) r \quad u_0(r) = \begin{cases} A \sin kr & r < r_0 \\ B \sin(kr + S_0) & r > r_0 \end{cases}$$

$$u_0(0) = 0$$

continuidade em $r = r_0$

$$A \sin kr_0 = B \sin(kr_0 + S_0)$$

salto da derivada em $r = r_0$

$$k A \cos kr_0 - k B \cos(kr_0 + S_0) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2} A \sin kr_0$$

$$\Rightarrow \frac{A \sin kr_0}{k A \cos kr_0 + \frac{2m\gamma}{\hbar^2} A \sin kr_0} = \frac{B \sin(kr_0 + S_0)}{k B \cos(kr_0 + S_0)}$$

$$\Rightarrow \frac{\tan(kr_0)}{k + \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \tan(kr_0)} = \frac{1}{k} \tan(kr_0 + S_0)$$

$$\Rightarrow \boxed{\tan S_0 = \frac{-\frac{\lambda}{k} \sin^2(kr_0)}{1 + \frac{\lambda}{k} \sin(kr_0) \cos(kr_0)}} ; \quad \lambda = \frac{2m\gamma}{\hbar^2}$$

$$\frac{e^{i\delta_0} - e^{-i\delta_0}}{e^{i\delta_0} + e^{-i\delta_0}} = \frac{-\frac{\lambda}{k} i \sin^2 k a_0}{1 + \frac{\lambda}{k} \sin k a_0 \cos k a_0}$$

$$\frac{e^{2i\delta_0} - 1}{e^{2i\delta_0} + 1} = \frac{-\frac{\lambda i}{k} \sin^2 k a_0}{1 + \frac{\lambda}{k} \sin k a_0 \cos k a_0}$$

$$e^{2i\delta_0} = \frac{1 + \frac{\lambda}{k} \sin k a_0 \cos k a_0 - i \frac{\lambda}{k} \sin^2 k a_0}{1 + \frac{\lambda}{k} \sin k a_0 \cos k a_0 + i \frac{\lambda}{k} \sin^2 k a_0}$$

$$= \frac{1 + \frac{\lambda}{k} \sin k a_0 (\cos k a_0 - i \sin k a_0)}{1 + \frac{\lambda}{k} \sin k a_0 (\cos k a_0 + i \sin k a_0)} = \frac{1 + \frac{\lambda}{k} \sin k a_0 e^{-i k a_0}}{1 + \frac{\lambda}{k} \sin k a_0 e^{i k a_0}}$$

$$= e^{-2i k a_0} \frac{\sin k a_0 + \frac{\lambda}{k} e^{i k a_0}}{\sin k a_0 + \frac{\lambda}{k} e^{-i k a_0}} = S_0(k)$$

Buscamos os polos do denominador

$$\frac{\lambda}{k} \sin k a_0 e^{i k a_0} + 1 = 0 \quad \frac{\lambda}{2ki} (e^{2i k a_0} - 1) + 1 = 0$$

$$e^{2i k a_0} = 1 - \frac{2ik}{\lambda} = 1 - \frac{2ik}{2m\gamma} h^2$$

quando γ é grande, o segundo termo é pequeno

$$\Rightarrow 2i k a_0 = 2i n \pi \quad k a_0 = n \pi \quad n \text{ inteiro} \quad (72)$$

podemos calcular a conexão

$$2i k r_0 = \ln \left(1 - \frac{2i \hbar^2 k}{2m r} \right) + 2i n \pi$$

expandindo o ln até $\mathcal{O}(k^2)$ e resolvendo a equação quadrática obtemos

$$k \approx \frac{n\pi}{r_0 + \frac{\hbar^2}{2m r}} - i \left(\frac{\hbar^2}{2m r} \right)^2 \frac{(n\pi)^2}{k_0^3} + \mathcal{O}(r^{-2})$$

Vemos que os polos estão no semiplano (não físico) onde $\text{Im } k < 0$. Mas quando r é grande, os polos estão muito próximos do eixo real e a amplitude de espalhamento recebe um aumento devido a esses polos.

Que são esses polos? Diferentemente dos polos ao longo do eixo $\text{Im } k > 0$, que representam estados ligados reais, esses polos não são físicos. No entanto no limite $r \rightarrow 0$, ou seja, no limite de acoplamento fraco entre a região $r_0 > r_0$ e $r < r_0$, esses polos são polos ao longo do eixo real. Fazendo r finito, introduzimos acoplamentos entre estados discretos de $r < r_0$ e do contínuo em $r > r_0$. Assim é útil encontrar uma interpretação física para esses polos não-físicos.

Para isso vamos resolver a Equação radial p/ os valores de k que correspondem aos polos não físicos.

Como a onda saindo e^{ikr} está sendo aumentada relativamente a onda entrando e^{-ikr} de uma quantidade infinita devido ao polo, a condição de contorno é que a onda será puramente e^{ikr} (saindo). Nesse caso

$$r R_0(r) = \begin{cases} \sin kr & r < r_0 \\ \sin kr_0 e^{ik(r-r_0)} & r > r_0 \end{cases}$$

$$\text{Re}(k) > 0$$

Como o fator $e^{ik(r-r_0)}$ cresce exponencialmente p/ $r \rightarrow \infty$ devido a parte imaginária negativa de k a solução não é normalizável. Mas vamos continuar assim mesmo! Para $\gamma \rightarrow \infty$, $\sin kr_0 \sim \mathcal{O}(r^{-1}) \Rightarrow$ a função de onda em $r=r_0$ é quase nula, fora de $r=r_0$ a função de onda oscila com $\sin kr_0$ mas começa a crescer devido ao fator $e^{ik(r-r_0)}$. Como o auto-valor de energia é

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{e} \quad k = k_0 - i\kappa, \quad k \text{ está no polo}$$

$$E = E_0 - i \frac{\Gamma}{2} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - i \frac{\hbar^2 k_0 \kappa}{m} + \mathcal{O}(\kappa^2)$$

No lim $\gamma \rightarrow \infty$ os polos, como já vimos das contabuições

$$E = E_0 - i \frac{\Gamma}{2} \sim \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{r_0 + \frac{\hbar^2}{2m\gamma}} \right)^2 - i \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{n\pi\hbar^2}{2m r_0} \right)^3 \frac{2}{\gamma^2 r_0} + \mathcal{O}(\gamma^{-3})$$

(74)

A evolução temporal

$$r R_0(r, t) = r R_0(r) e^{-iEt/\hbar} = r R_0(r) e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\Gamma t/2\hbar}$$

$$r R_0(r, t) = \begin{cases} \text{sen} kr e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\Gamma t/2\hbar} & r < r_0 \\ \text{sen} k r_0 e^{ik(r-r_0)} e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\Gamma t/2\hbar} & r > r_0 \end{cases}$$

P/ $r < r_0$: densidade de probabilidade

$|r R_0(r, t)|^2 \propto e^{-\Gamma t/\hbar}$: decai uniformemente dentro de $r < r_0$.

P/ $r > r_0$: densidade de probabilidade

$|r R_0(r, t)|^2 \propto e^{2kr} e^{-\Gamma t/\hbar}$: a probabilidade cresce q/ $r \rightarrow \infty$.

A função de onda ~~decrece~~ em "estados ligados" decaindo p/ o contínuo. Assim as ressonâncias podem ser entendidas como "estados quasi-ligados" que decaem p/ estados do contínuo!