AULA 14

Problema de 2 corpos

Consideremos o problema de 2 corpos onde $\hat{\vec{p}}_a$, $\hat{\vec{x}}_a$ e $\hat{\vec{p}}_b$, $\hat{\vec{x}}_b$ são, respectivamente, os operadores do momento e coordenada das partículas A e B que possuem massas m_a e m_b e que estão submetidas a uma interação descrita pelo potencial $V = V(|\hat{\vec{x}}_a - \hat{\vec{x}}_b|)$.

O Hamiltoniano do sistema é

$$H = \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2m_a} + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2m_b} + V(|\hat{\vec{x}}_a - \hat{\vec{x}}_b|) \quad (1)$$

Vamos introduzir os operadores das <u>coordenadas relativas</u> e <u>do centro de massa</u> (CM):

$$\hat{\vec{x}} = \hat{\vec{x}}_a - \hat{\vec{x}}_b \quad (2)$$

$$\hat{\vec{X}} = \frac{m_a \hat{\vec{x}}_a + m_b \hat{\vec{x}}_b}{m_a + m_b} \quad (3) \quad \Longrightarrow \quad \hat{\vec{x}}_a = \hat{\vec{X}} + \frac{m_b}{M}\hat{\vec{x}}, \quad \hat{\vec{x}}_b = \hat{\vec{X}} - \frac{m_a}{M}\hat{\vec{x}}$$

e os operadores do <u>momento relativo</u> e <u>total</u>

$$\hat{\vec{p}} \equiv \frac{m_b \hat{\vec{p}}_a - m_a \hat{\vec{p}}_b}{m_a + m_b} \equiv \mu \left(\frac{\hat{\vec{p}}_a}{m_a} - \frac{\hat{\vec{p}}_b}{m_b} \right) \quad (4)$$

onde $\mu \equiv \dfrac{m_a m_b}{m_a + m_b} = \dfrac{m_a m_b}{M}$ (massa reduzida do sistema)

$$\vec{P} = \hat{\vec{p}}_a + \hat{\vec{p}}_b \quad (5)$$

$$\vec{p}_a = \frac{m_a}{M}\vec{P} + \vec{p} \; ; \; \vec{p}_b = \frac{m_b}{M}\vec{P} - \vec{p}$$

Vemos que como $[\hat{\vec{p}}_a, \hat{\vec{p}}_b] = 0$

$$\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} = \frac{(\hat{\vec{p}}_a + \hat{\vec{p}}_b)^2}{2M} = \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}_a \cdot \hat{\vec{p}}_b}{M}$$

$$\frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2\mu} = \left(\frac{\hat{\vec{p}}_a}{m_a} - \frac{\hat{\vec{p}}_b}{m_b}\right)^2 \frac{\mu^2}{2\mu} = \frac{\mu}{2}\left(\frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{m_a^2} + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{m_b^2} - 2\frac{\hat{\vec{p}}_a \cdot \hat{\vec{p}}_b}{m_a m_b}\right)$$

$$= \frac{m_b}{M}\left(\frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2m_a}\right) + \frac{m_a}{M}\left(\frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2m_b}\right) - \frac{\hat{\vec{p}}_a \cdot \hat{\vec{p}}_b}{M}$$

$$\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2\mu} = \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2M}\left(1 + \frac{m_b}{m_a}\right) + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2M}\left(1 + \frac{m_a}{m_b}\right) = \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2m_a} + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2m_b}$$

logo (1) pode ser escrito como

livre central

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2\mu} + V(|\hat{\vec{x}}|)}_{\hat{H}_{rel.}} \quad (6)$$

além disso

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = [\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\,\delta_{ij} \quad (7a)$$

$$[\hat{x}_{ai} - \hat{x}_{bi}, \frac{\mu}{m_a}\hat{p}_{aj} - \frac{\mu}{m_b}\hat{p}_{bj}] = \frac{\mu}{m_a}[\hat{x}_{ai}, \hat{p}_{aj}] + \frac{\mu}{m_b}[\hat{x}_{bi}, \hat{p}_{bj}]$$

$$= \left(\frac{\mu}{m_a} + \frac{\mu}{m_b}\right) i\hbar\,\delta_{ij} = i\hbar\,\delta_{ij}$$

$$[\hat{x}_i, \hat{P}_j] = [\hat{X}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (7b) \qquad \text{(Mostre!)}$$

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{P}_j] = 0 \ , \ [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \ , \ [\hat{p}_i, \hat{P}_j] = 0$$

o momento total do sistema é uma constante de movimento

O momento angular total do sistema também se divide em um operador do centro de massa e um operador para o movimento relativo:

$$\hbar \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{x}}_a \times \hat{\vec{p}}_a + \hat{\vec{x}}_b \times \hat{\vec{p}}_b = \left(\hat{\vec{X}} + \frac{m_b}{M}\hat{\vec{x}}\right) \times \left(\frac{m_a}{M}\hat{\vec{P}} + \hat{\vec{p}}\right)$$

$$+ \left(\hat{\vec{X}} - \frac{m_a}{M}\hat{\vec{x}}\right) \times \left(\frac{m_b}{M}\hat{\vec{P}} - \hat{\vec{p}}\right) = \hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}} \frac{m_a}{M} + \cancel{\hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{p}}} + \cancel{\frac{m_a m_b}{M^2} \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{P}}} + \frac{m_b}{M}\hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$$

$$+ \left(\hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}}\right)\left(\frac{m_b}{M}\right) - \cancel{\hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{p}}} - \cancel{\frac{m_a m_b}{M^2} \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{P}}} + \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} \left(\frac{m_a}{M}\right) = \hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}} + \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$$

$$= \hbar \hat{\vec{L}}_{CM} + \hbar \hat{\vec{L}} \quad (8) \qquad [\vec{L}_{CM}, \vec{L}] = 0 \quad \text{(Verifique!)}$$

gera rotações no espaço do movimento do CM

$[\hat{p}_i, \hat{L}_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_k$ (9a) $\Rightarrow$ momento relativo é um operador vetorial com relação ao mom. angular relativo que gera rotações no espaço de movimento relativo

(Mostre!)

$[\hat{x}_i, \hat{L}_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{x}_k$ (9b) $\Rightarrow$ coord. relativa é um operador vetorial com relação ao mom. angular relativo

(Mostre!)

mas $[\hat{X}_i, \hat{L}_j] = [\hat{P}_i, \hat{L}_j] = 0 \quad$ (9c)

Assim as constantes de movimento são:

$$\hat{H}_{rel}, \hat{P}^2, \hat{\vec{P}}, \hat{\vec{L}}, \hat{\vec{L}}_{CM}$$

mas esses operadores não são todos compatíveis uns com os outros.

Movimento do CM: escolhe-se os observáveis compatíveis com o movimento de uma partícula livre $(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$ ou $(\hat{H}_{CM}, \hat{L}^2_{CM}, \hat{L}_{CMz})$

$\hat{H}_{CM} \to \hat{P}^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) \qquad \vec{P} \to \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad E_{CM} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} = \frac{\vec{P}^2}{2M} \text{ é solução}$$

$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} | k_1 k_2 k_3 \rangle$

autofunções simultâneas de P_1, P_2, P_3

mas

$$\nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2_{CM}}{r^2} \qquad E_{CM} = \frac{\vec{P}^2}{2M}$$

$\langle \vec{r} | E l m \rangle = R_{El}(\vec{r})\, Y_{lm}(\theta\phi)$ autofunções simultâneas de E, L^2 e L_z

Movimento Relativo: H_{rel}, L^2, L_z são observáveis compatíveis

Se uma ou ambas as partículas possuírem spin, haverá operadores de spin $\vec{S}^{(a)}$ e/ou $\vec{S}^{(b)}$ também como observáveis que devem ser acrescentados à lista de constantes de movimento. Quando a interação é central como em (6) ambos os spins são constantes de movimento. Se a força depender do spin, os ~~spins~~ spins individuais não serão mais constantes de movimento.

Digressão sobre Partícula Livre

As funções de onda de partícula livre são necessárias em vários contextos em M.Q.

— para descrever partículas livres
— como base completa do espaço $\mathcal{H}$ útil em várias situações de interesse físico
— em problemas de espalhamento, para representar os estados iniciais e finais assintóticos (in/out) das colisões

Considere uma partícula de massa m e spin 0 descrita pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}$$

Os estados estacionários desse sistema, como já vimos, satisfazem

autovalor

$$\frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \qquad \text{com } E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$$

uma base de autoestados para $|\psi\rangle$ é $\{|\vec{p}\rangle = |p_x\, p_y\, p_z\rangle\}$ autoestados simultâneos das três componentes do operador $\hat{\vec{p}}$, $[p_i, p_j] = 0$

$$\frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}|\vec{p}\rangle = E\,|\vec{p}\rangle$$

que na base das coordenadas tem autofunções

$$\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \text{ondas planas}$$

ortogonais

$$\int d^3r\, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{r})\, \varphi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

e formam um conjunto completo

$$\int d^3k\, \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})\, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

mas $\hat{p}^2$ não só é invariante por translação como também é invariante por rotação $\Rightarrow$ $\hat{p}^2, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ são também um conj. completo de operadores compatíveis : $|E\,l\,m\rangle$ é também uma base possível

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} |Elm\rangle = E\,|Elm\rangle \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\langle\vec{r}\,|Elm\rangle \equiv \psi^{\circ}_{Elm}(\vec{r}) = R_{El}(r)\, Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) - E\right] R_{El}(r) = 0$$

definindo $\rho = kr$

$$\left[\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\rho^2\frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1\right] R_l(\rho) = 0$$

essa equação tem 2 soluções L.I funções de Bessel esféricas

$$j_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}\; J_{l+1/2}(\rho)$$ que é regular em $\rho=0$ (analítica)

$$\eta_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}\; N_{l+1/2}(\rho)$$ que não é regular em $\rho = 0$

de fato

$$j_\ell(\rho) \longrightarrow \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!}, \quad \rho \to 0$$

$$(2\ell+1)!! = (2\ell+1)(2\ell-1)\cdots 1$$

$$\eta_\ell(\rho) \longrightarrow -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^{\ell+1}}, \quad \rho \to 0$$

$$\int_0^\infty r^2 dr\, j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r) = \frac{\pi}{2k^2}\,\delta(k-k')$$

além disso a forma assintótica

$$j_\ell(\rho) \longrightarrow \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{1}{2}\ell\pi\right) \quad \rho \to \infty$$

$$\eta_\ell(\rho) \longrightarrow \frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{1}{2}\ell\pi\right) \quad \rho \to \infty$$

As funções de onda de partícula livre nesse caso são

$$\psi^0_{E\ell m}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}\,\frac{k^2 dk}{dE}}\; j_\ell(kr)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

de forma que

$$\int d^3r \left[\psi^0_{E\ell m}(\vec{r})\right]^* \psi^0_{E'\ell' m'}(\vec{r}) = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}\,\delta(E-E')$$

A função de onda que corresponde ao problema poderá ser escrita como

sistema relativo

$$\psi(\vec{x}, \vec{X}) = e^{i\vec{P}\cdot\vec{X}/\hbar}\, \psi(\vec{x})$$

autovalores   auto-valores.

energia interna do sistema

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_x^2 \psi(\vec{x}) + V(|\vec{x}|)\,\psi(\vec{x}) = \mathcal{E}\,\psi(\vec{x}) \qquad (10)$$

a energia total.

$$E = \mathcal{E} + \frac{\vec{P}^2}{2M} \qquad (11)$$

Note: a energia interna $\mathcal{E}$ depende ligeiramente na massa do núcleo em. 2 isótopos estáveis do núcleo de hidrogênio

$m_p = 1836\ m_e$ $\qquad m_{\text{deuteron}} = 3670\ m_e$
deutério

$\mu_{pe} = 0.99945 m_e$ $\qquad$ enquanto $\mu_{de} = 0.99973\ m_e$

essa diferença ínfima é suficiente para produzir deslocamentos de freqüência da luz emitida de uma mistura de hidrogênio e deutério. A intensidade relativa das linhas espectrais observadas do hidrogênio e deutério é usada pelos astrônomos para medir a abundância relativa do hidrogênio e deutério no meio interestelar.

Vamos agora estudar o movimento relativo, ou seja

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \hat{V}(\hat{x})\right] |E\ell m\rangle = E_\ell\, |\ell m\rangle \qquad (12)$$

$$|\hat{\vec{x}}| \equiv \hat{x}$$

$$\langle \vec{r} | Elm \rangle = \psi_{Elm}(\vec{r}) = R_{El}(r)\, Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (13)$$

onde

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right) + V(r) - E_l\right] R_{El}(r) = 0 \quad (14)$$

definindo:

$$U(r) \equiv \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \quad (15a)$$

$$E_l = \frac{-\hbar^2 \beta^2}{2\mu} \quad (15b)$$

pode re-escrever (14) como

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) - \beta^2\right) R_l(\beta; r) = 0 \quad (16)$$

essa é a equação radial, apropriado para encontrar

$\to$ estados ligados. i.e. $\beta^2 > 0$

Note que $[H, L_\pm] = 0$, $E = E_l$, não depende do valor m

$\Rightarrow$ cada valor de energia tem ao menos uma degenerescência

$2l+1$

Vamos introduzir a função

$$u_l(\beta; r) = r\, R_l(\beta; r) \quad (17)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR}{dr} = R'' + \frac{2}{r}R' = \frac{1}{r}u''$$

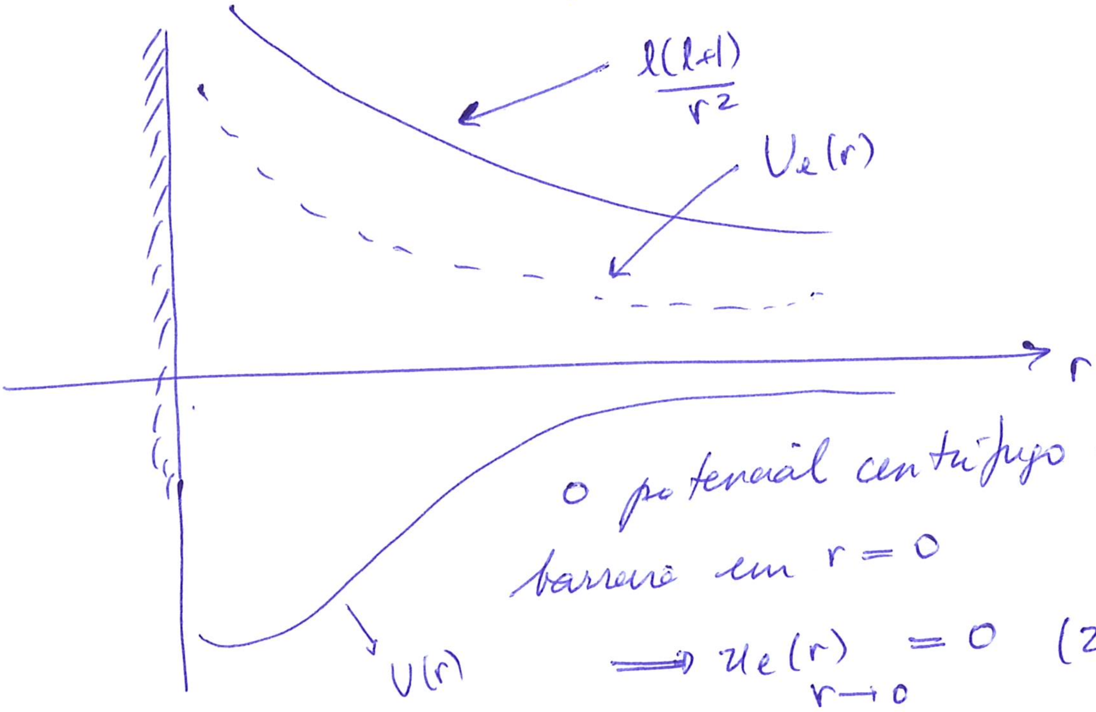
assim (16) pode ser escrita como

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - U_\ell(r) - \beta^2\right] u_\ell(\beta; r) = 0 \quad (18)$$

∴ se reduz a equação de Schrödinger 1D com potencial $U_\ell(r)$, mas $r > 0$!

potencial centrífugo

onde $U_\ell(r) = U(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ (19)



o potencial centrífugo produz uma barreira em $r = 0$

$$\Longrightarrow u_\ell(r) \underset{r\to 0}{=} 0 \quad (20)$$

Quando (20) é válida?

Considerem um potencial que satisfaça

$$\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$$

potenciais menos singulares que $\frac{1}{r^2}$ na origem

$$r^2 u_\ell'' - \ell(\ell+1) u_\ell = 0 \qquad r \simeq 0$$

$$u_\ell \sim j_\ell(r) r \sim \frac{r^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!}, \; r \to 0$$

$$\Longrightarrow u_\ell(r) \sim r^{\ell+1} \qquad r \to 0$$

que é o mesmo comportamento de uma partícula

A equação radial pode ser escrita como

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - U_\ell(r) - \beta^2\right] u_\ell(\beta;r) = 0 \qquad r>0$$

com $E_\ell \equiv -\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu}$; $u_\ell(\beta,r) = \frac{R_\ell(\beta,r)}{r}$

$$U_\ell(r) = U(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$$

• partícula livre $U(r) \equiv 0 \Rightarrow u_\ell(\beta;0) = 0$ $R_\ell(\beta,r) \sim j_\ell(\beta$

• p/ potenciais tais que $\lim_{r\to\infty} U(r) = 0 \Rightarrow \exists$ soluções livres para o contínuo $E \geq 0$; $\beta \to \mp ik \binom{\text{out}}{\text{in}}$, $k>0$

i.e. $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$. com $R_\ell(k,r) = \frac{u_\ell(k,r)}{r}$, $u_\ell(k,0) = 0$

que são as funções de onda do contínuo

Poderíamos pensar que qualquer potencial $\lim_{r\to\infty} U(r) = 0$ tenha soluções que se aproximam assintoticamente das soluções de Eq. de Schrödinger livre. Isso não é verdade. O critério é

$$\lim_{r\to\infty} r\, U(r) = 0$$

ou seja, o potencial tem que cair mais rápido que o potencial de Coulomb.

A análise que faremos aqui diz respeito apenas à forma assintótica das funções de onda ligadas válida p/ todos os potenciais que

$$\lim_{r\to\infty} U(r) \sim \frac{\lambda}{r^s}$$

(1) se $l \neq 0$ e $s > 0$ $\Rightarrow$ o termo centrífugo domina em $r \to \infty$ $\Rightarrow$ a função de onda deve tender a uma combinação linear das auto-funções de partícula livre

$$a\, h_l(i\beta r) + b\, h_l^*(i\beta r)$$

onde $h_l(\rho) = j_l(\rho) + i\, n_l(\rho)$

mas $\lim_{\rho\to\infty} h_l(\rho) \longrightarrow \frac{1}{i^{l+1}\rho} e^{i\rho}$ $\Rightarrow$ $h_l^*(i\beta r)$ diverge em $r \to \infty$

$\Rightarrow b = 0$

$$\Rightarrow R_l(\beta, r) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{e^{-\beta r}}{r}$$

a forma assintótica é ditada pela energia de ligação.

(2) $l = 0$ e $\forall s$ ou $l \neq 0$ e $s < 2$

procuramos então a forma assintótica da solução de

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\lambda}{r^s} - \beta^2\right) u(\beta; r) = 0$$

vamos considerar estados do contínuo uma desvio lento de fase da função de onda de partícula livre i.e

$$\underset{\text{ligado}}{u_l \sim e^{-\beta r}\, e^{\chi(r)}} \qquad \Big(\underset{\text{contínuo}}{u \sim e^{ikr}\, e^{i\chi(r)}}\Big)$$

$$\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left(-\beta u_\ell + \chi_\ell'(r)\, u_\ell\right) = -\beta\left(-\beta u_\ell + \chi_\ell'(r)\, u_\ell\right)$$

$$+ \overset{\nearrow 0}{\chi_\ell''}\, u_\ell + \chi_\ell' \left(-\beta u_\ell + \overset{\nearrow 0}{\chi_\ell'}(r)\, u_\ell\right) = \left(\frac{\lambda}{r^s} + \beta^2\right) u_\ell$$

$$-2\beta\, \chi_\ell'\, u_\ell = \frac{\lambda}{r^s}\, u_\ell \quad \Longrightarrow \quad \frac{d\chi_\ell}{dr} = -\frac{\lambda}{2\beta r^s}$$

que é consistente com o fato que $\chi_\ell(r)$ varia lentamente com r!

$$\chi_\ell(r) = \frac{+\lambda}{2\beta}\,\frac{r^{-s+1}}{(s-1)}$$

$$u_\ell(r) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{-\beta r} \exp\left(\frac{\lambda}{2\beta}\,\frac{r^{-s+1}}{(s-1)}\right) \qquad s > 1$$

~~[illegible]~~ $\sim e^{-\beta r}$

$\Rightarrow$ para potenciais que caem mais rápido que o potencial de Coulomb estados ligados das funções de onda radiais $\forall \ell$ tem uma forma assintótica universal $R_\ell(r) \sim \frac{e^{-\beta r}}{r}$ que só depende da energia de ligação

(3) $\forall \ell$, $s = 1$ $\qquad \chi_\ell \sim \frac{-\lambda}{2\beta} \ln r$

$\Rightarrow$ a forma assintótica da função de onda radial é

$$R_\ell(r) \sim \frac{e^{-\beta r}}{r}\, r^{-\lambda/2\beta}$$

estados ligados caem mais lentamente que p/ potenciais mais atrativos em $r\to\infty$

$\lambda < 0$ se o potencial for atrativo $r \to \infty$