Jaime Santos
Universidade do Minho

Física Quântica II

Soluções

Exercício 29: *Potencial delta de Dirac em 3d - aproximação de Born*

Consideramos o potencial central $V(r) = \frac{\hbar^2}{2ma}\delta(r-a)$, ou seja a partícula quântica sente apenas o seu efeito quando se encontra à superfície de uma esfera de raio a em torno da origem, sendo a energia da partícula incidente dada por $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e em que k é o módulo do momento incidente, suposto alinhado com o eixo dos z.

a) A transformada de Fourier deste potencial é dada por

$$\begin{aligned} V(q) &= \frac{\hbar^2}{2ma}\int d^3r\, e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\,\delta(r-a) \\ &= \frac{\hbar^2}{2ma}\int_0^\infty dr\, r^2\,\delta(r-a)\int_0^\pi d\theta\,\sin\theta\int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{-iqr\cos\theta} \\ &= \frac{\hbar^2\pi a}{m}\int_{-1}^1 d\mu\, e^{-iqa\mu} \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{mq}\sin(qa), \end{aligned} \tag{143}$$

e em que $q = 2k\sin(\theta/2)$, sendo θ o ângulo de deflexão da partícula.

Assim, temos, substituindo na expressão (93)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{sin^2(qa)}{q^2}. \tag{144}$$

b) Integrando esta expressão sobre o ângulo sólido, obtemos para a seção eficaz total a expressão

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\Omega\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_0^\pi d\theta\,\sin\theta\int_0^{2\pi} d\varphi\,\frac{sin^2[2ka\sin(\theta/2)]}{4k^2\sin^2(\theta/2)} \\ &= 2\pi\int_0^\pi d\theta\,\sin\theta\,\frac{sin^2[2ka\sin(\theta/2)]}{4k^2\sin^2(\theta/2)} \\ &= \frac{\pi}{k^2}\int_0^{\pi/2} dy\, sin(2u)\,\frac{sin^2(2ka\sin y)}{\sin^2 y} \\ &= \frac{2\pi}{k^2}\int_0^{\pi/2} dy\,\cos y\frac{sin^2(2ka\sin y)}{\sin y} \\ &= \frac{2\pi}{k^2}\int_0^1 dv\frac{sin^2(2kav)}{v} \\ &= \frac{2\pi}{k^2}\int_0^{ka} du\frac{sin^2(2u)}{u}, \end{aligned} \tag{145}$$

logo $\sigma = \pi a^2 f(ka)$, em que $f(x) = \frac{2}{x^2}\int_0^x du\, \frac{\sin^2(2u)}{u}$. Note que fizemos a substituição de variável, $y = \theta/2$ ao passar da segunda para a terceira linha de (145), a substituição $v = \sin y$ ao passar da quarta para a quinta linha desta equação, e finalmente a substituição $u = kav$, ao passar da quinta para a sexta linha.

Consideramos agora esta expressão no limite de altas energias, $ka \gg 1$. Pela regra de l'Hopital

$$\lim_{x\to\infty} f(x) = \lim_{x\to\infty} \frac{\frac{2\sin^2(2x)}{x}}{2x} = \lim_{x\to\infty} \frac{\sin^2(2x)}{x^2} = 0, \tag{146}$$

logo $\sigma \to 0$ a altas energias, como seria de esperar.

Exercício 30: *Potencial delta de Dirac em 3d - tratamento por ondas parciais*

Consideramos de novo o potencial central $V(r) = \frac{\hbar^2}{2ma}\delta(r-a)$. Separando a equação de Schrödinger em termos de ondas parciais, obtemos para a função radial $R_l(r)$, com momento angular l, a equação

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_l}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l(r) - \frac{1}{a}\delta(r-a)R_l(r) + k^2R_l(r) = 0, \tag{147}$$

em que $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, onde $E > 0$ é a energia da partícula quântica.

a) Introduzindo a função $u_l(r) = rR_l(r)$, temos $\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d(u_l(r)/r)}{dr}\right) = \frac{1}{r}\frac{d^2u_l}{dr^2}$, pelo que substituindo estes resultados na equação (147), obtemos

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}u_l(r) - \frac{1}{a}\delta(r-a)u_l(r) + k^2u_l(r) = 0. \tag{148}$$

b) Consideramos agora a onda s, com $l = 0$. A equação (148) reduz-se a

$$\frac{d^2u_0}{dr^2} - \frac{1}{a}\delta(r-a)u_0(r) + k^2u_0(r) = 0. \tag{149}$$

Para $r \neq a$ as soluções desta equação podem escrever-se como uma combinação linear de senos e cossenos. Dado que a função $R_0(r)$ tem que ser finita em $r = 0$, e que $R_0(r) = u_0(r)/r$, $u_0(0) = 0$, necessariamente. A continuidade da função de onda obriga igualmente a que $u_0(a^-) = u_0(a^+)$. Integrando a equação (149) entre a^- e a^+ e utilizando a continuidade de $u_0(r)$ em $r = a$, obtemos

$$u_0'(a^+) - u_0'(a^-) = \frac{u_0(a)}{a}. \tag{150}$$

c) Escrevendo, à semelhança do poço de potencial considerado na aula teórica, a solução desta equação como $u_0(r) = Ce^{i\delta_0}\sin(kr)$ para $r < a$ (a exigência de que $u_0(0) = 0$, exclui a contribuição do cosseno na expressão de $u_0(r)$ para $r \leq a$), $u_0(r) = e^{i\delta_0}\sin(kr + \delta_0)$, para $r \geq a$, que tem o comportamento assintótico adequado para $r \to \infty$, temos, da condição de continuidade para $u_0(r)$ em $r = a$, a relação

$$C = \frac{\sin(ka + \delta_0)}{\sin(ka)}. \tag{151}$$

Substituindo as duas soluções acima na equação (150), obtemos a relação

$$\cos(ka+\delta_0) - \frac{\sin(ka+\delta_0)}{\sin(ka)}\cos(ka) = \frac{\sin(ka+\delta_0)}{ka}, \tag{152}$$

onde utilizamos a expressão para C dada na equação (151). A equação (152) pode ainda escrever-se como $\sin\delta_0 = -\frac{\sin(ka+\delta_0)\sin(ka)}{ka}$, o que, após a expansão de $\sin(ka+\delta_0)$, pode ser ainda escrito como $\tan\delta_0 = -\frac{2\sin^(\,ka)}{2ka+sin(2ka)}$.

d) Considerando apenas a contribuição da onda s para a seção eficaz total $\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0$, válida para baixas energias, e utilizando a identidade trignométrica $\sin^2\delta_0 = \frac{\tan^2\delta_0}{1+\tan^2\delta_0}$, obtemos $\sigma = \pi a^2 g(ka)$, em que

$$g(ka) = \frac{4\sin^4(ka)}{(ka)^2[(ka)^2 + ka\sin(2ka) + \sin^2(ka)]}.$$

No limite de baixas energias, $ka \ll 1$, $\sin^4(ka) \approx (ka)^4$, $\sin(2ka) \approx 2ka$, $\sin^2(ka) \approx (ka)^2$, pelo que obtemos $\lim_{ka\to 0} g(ka) = 1$, e $\sigma \to \pi a^2$ neste limite.

Exercício 31: *Função de onda de dois fermiões*

Consideramos o átomo ${}^4_2$He. Se ignorarmos a repulsão de Coulomb entre os dois eletrões (que pode ser tratada posteriormente como uma perturbação), pode-se construir a função de onda eletrónica como um produto de funções de onda de um único eletrão (incluindo o spin). No entanto, é preciso tomar em conta que tal função de onda deve mudar de sinal se permutarmos $(\boldsymbol{r}_1, \sigma^1)$ com $(\boldsymbol{r}_2, \sigma^2)$, onde $\boldsymbol{r}_{1,2}$ é a posição do primeiro (respectivamente, segundo) eletrão e $\sigma^{1,2}$ é a projeção do spin do primeiro (respectivamente, segundo) eletrão ao longo do eixo z.

a) Como os dois eletrões compartilham a mesma função de onda orbital $\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_{1,2})$, os seus spins são antiparalelos, de modo a obedecer ao princípio de exclusão de Pauli. Construímos a função de onda (não simétrica) como $\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\ |+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2$, onde os subscritos 1 e 2 se referem à primeira e segunda partícula, respectivamente. O operador que aplicado a este estado, produz o o estado normalizado e antissimétrico apropriado é $\sqrt{2}\,\mathcal{P}_F$, onde $\mathcal{P}_F = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - P_{12})$ com P_{12} sendo o operador que permuta as coordenadas e o spin dos dois eletrões

$$\begin{aligned}
|\,\Psi_A^1\,\rangle &= \sqrt{2}\,\mathcal{P}_F\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\ |+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2 \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\ |+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2 - \varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\ |+\rangle_2 \otimes |-\rangle_1\right) \\
&= \frac{\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right) \\
&= \varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\ |\,S=0\,M_S=0\,\rangle,
\end{aligned}$$

onde $|\,S=0\,M_S=0\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)$ é o estado singleto de dois spins $1/2$.

b) Neste caso, o estado que deve ser antisimetrizado é dado explicitamente, ou seja, é o estado em que o primeiro eletrão ocupa o orbital $1s$ e cujo a projeção do spin ao longo do eixo z é igual a $+1$ (em unidades de $\hbar/2$) e em que o segundo eletrão ocupa a orbital $2s$, a projeção de seu spin ao longo do eixo z sendo igual a -1. Este estado pode ser escrito como $\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_2)\ |\,+\,\rangle_1 \otimes\ |\,-\,\rangle_2$. Após a anti-simetrização, obtém-se o estado

$$\begin{aligned}
|\ \Psi_A^2\,\rangle &= \sqrt{2}\,\mathcal{P}_F\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_2)\ |\,+\,\rangle_1 \otimes\ |\,-\,\rangle_2 \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_2)\ |\,+\,\rangle_1 \otimes\ |\,-\,\rangle_2 - \varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_1)\ |\,+\,\rangle_2 \otimes\ |\,-\,\rangle_1\,\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_2)\ |\,+-\,\rangle - \varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_1)\ |\,-+\,\rangle\,\right).
\end{aligned}$$

Agora, pode-se expressar os estados $|\,+-\,\rangle$ e $|\,-+\,\rangle$ em termos do estado singleto e do estado tripleto com $M_S = 0$ da seguinte forma (ver exercício 7)

$$\begin{aligned}
|\,+-\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\,|\,S=1\,M_S=0\,\rangle + |\,S=0\,M_S=0\,\rangle\,\right), \\
|\,-+\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\,|\,S=1\,M_S=0\,\rangle - |\,S=0\,M_S=0\,\rangle\,\right).
\end{aligned}$$

Substituindo este resultado na equação anterior, obtém-se para $|\ \Psi_A^2\,\rangle$, o resultado

$$|\ \Psi_A^2\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\,\varphi_S(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\ |\,S=0\,M_S=0\,\rangle + \varphi_A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\ |\,S=1\,M_S=0\,\rangle\,\right),$$

onde as funções de onda orbital simétrica e anti-simétrica $\varphi_S(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$, $\varphi_A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ são dadas por

$$\begin{aligned}
\varphi_S(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_2) + \varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_1)\,\right) \\
\varphi_A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\,\varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_2) - \varphi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\,\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_1)\,\right).
\end{aligned}$$

Observe que uma função de onda orbital simétrica multiplica uma função de onda de spin antisimétrica e uma função de onda orbital anti-simétrica multiplica uma função de onda de spin simétrica na expressão para $|\ \Psi_A^2\,\rangle$, tal que a função de onda global é anti-simétrica no intercâmbio de ambas as coordenadas espaciais e de spin das duas partículas. Além disso, como as funções de onda $\varphi_{1s}(\boldsymbol{r})$ e $\varphi_{2s}(\boldsymbol{r})$ são normalizados e ortogonais entre si, as duas funções de onda $\varphi_S(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ e $\varphi_A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ também são normalizados e ortogonais entre si, como pode ser facilmente constatar calculando as integrais relevantes. Portanto, tem-se da expressão para $|\ \Psi_A^2\,\rangle$ que a densidade de probabilidade de encontrar os dois partículas nas posições $\boldsymbol{r}_1$ e $\boldsymbol{r}_2$ e com um spin total igual a 0 é dado por $|\varphi_S(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)|^2/2$. A probabilidade de encontrar as duas partículas no estado singleto, independentemente da sua posição é simplesmente a integral desta quantidade, que, dado que $\varphi_S(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ é normalizado, é igual a $1/2$.