Considere-se agora o caso de um poço de potencial

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

em que V_0 pode ser positivo ou negativo.

Escreve-se de novo

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos\theta)$$

em que $R_l(r)$ obedece a

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_l}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_l + \frac{2m}{\hbar^2} E R_l(r) = 0$$

para $r>a$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_l}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0) R_l(r) = 0$$

para $r<a$

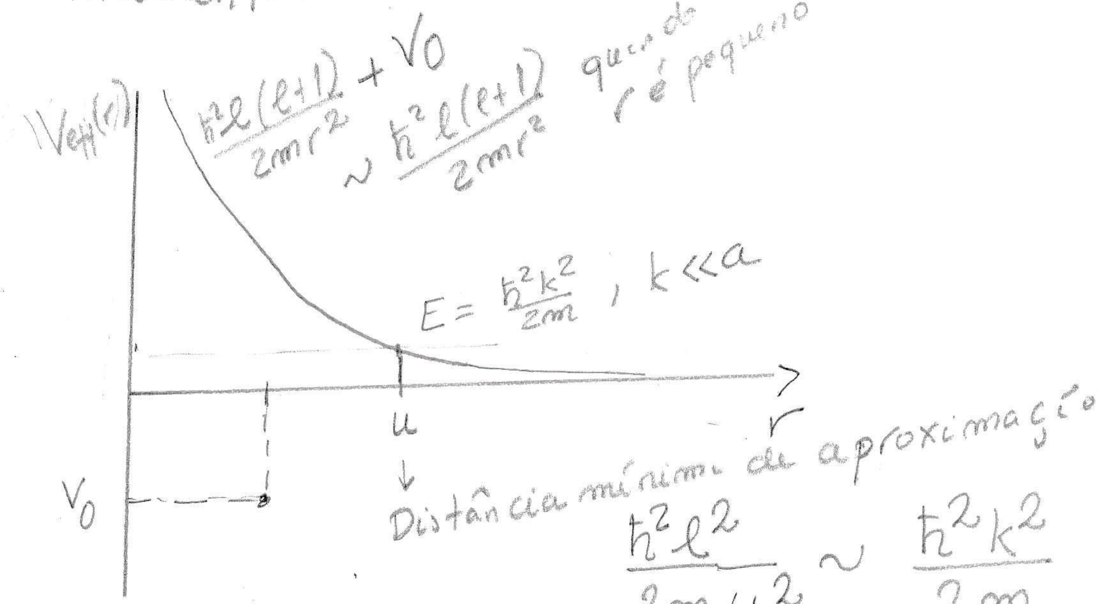
Definindo $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e $k_0 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$, verificamos que $R_l(r) = A_l j_l(kr) + B_l \eta_l(kr)$ $r>a$

e $R_l(r) = A_l' j_l(k_0 r) + B_l' \eta_l(k_0 r)$ $r<a$

Sendo que a função e a sua derivada devem ser contínuas em $r=a$ e $R_l(r)$ deve ser regular em $r=0$.

No entanto, aqui vamos limitar a discussão a baixas energias, tais que $ka \ll 1$.

Nesse caso, o potencial centrífugo impede a onda parcial com momento angular $l \neq 0$ de percecionar o poço de potencial, pelo que apenas a onda s sofrerá espalhamento.



$$\frac{\hbar^2 l^2}{2mu^2} \sim \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$u \sim \frac{l}{k}$$

Para $l=1$, $u \sim \frac{1}{k} \gg a$

A equação para $R_0(r)$ é

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_0}{dr}\right) + \frac{2mE}{\hbar^2} R_0(r) = 0 \quad r>a$$

e $\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_0}{dr}\right) + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}R_0(r) = 0 \quad r<a$

Escrevendo $R_0(r) = \frac{u_0(r)}{r}$,

vem: $$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_0}{dr}\right)$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(\frac{r^2}{r}\frac{du_0}{dr} - u_0\right)$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r\frac{du_0}{dr} - u_0\right)$$

$$= \frac{1}{r}\frac{d^2u_0}{dr^2}\text{, fica}$$

$$\frac{d^2u_0}{dr^2} + k^2u_0(r) = 0 \qquad r>a$$

$$\frac{d^2u_0}{dr^2} + k_0^2u_0(r) = 0 \qquad r<a$$

com $u_0(a^-) = u_0(a^+)$

e $u_0(0) = 0$, já que $R_0(0)$ deve estar definida.

Como $R_0'(r) = \frac{u_0'(r)}{r} - \frac{u_0(r)}{r^2}$

De $R_0'(a^-) = R_0'(a^+)$, obtemos

$$\frac{u_0'(a^-)}{a} - \cancel{\frac{u_0(a^-)}{a^2}} = \frac{u_0'(a^+)}{a} - \cancel{\frac{u_0(a^+)}{a^2}}$$

$$\Longleftrightarrow \quad u_0'(a^-) = u_0'(a^+)$$

Escrevemos então $u_0(r) = C e^{i\delta_0} \sin(k_0 r)$
em que C é real, para $r<a$
e

$u_0(r) = e^{i\delta_0} \sin(kr + \delta_0)$, já

que $u_0(r) = \frac{1}{2i}\left(e^{2i\delta_0} e^{ikr} - e^{-ikr}\right)$

e este termo
cancela a
cont. de $e^{ikr\cos\theta}$
quando $r \to \infty$

Assim, temos que ter

$$\begin{cases} C e^{i\delta_0} \sin(k_0 a) = e^{i\delta_0} \sin(ka + \delta_0) \\ k_0 C e^{i\delta_0} \cos(k_0 a) = k e^{i\delta_0} \cos(ka + \delta_0) \end{cases}$$

ou $C^2\left[\sin^2(k_0 a) + \frac{k_0^2}{k^2}\cos^2(k_0 a)\right] = 1$

$$C = \frac{k}{\left(k^2 \sin^2(k_0 a) + k_0^2 \cos^2(k_0 a)\right)^{1/2}}$$

e obtemos

$$\delta_0(k) = \underbrace{\arcsin\left(\frac{k \sin(k_0 a)}{\sqrt{k^2 \sin^2(k_0 a) + k_0^2 \cos^2(k_0 a)}}\right)}_{\alpha} - ka$$

$$\sin \delta_0(k) = \sin(\alpha - ka)$$

$$= \sin\alpha \cos(ka) - \cos\alpha \sin(ka)$$

$$= \sin\alpha \cos(ka) - \sqrt{1 - \sin^2\alpha}\, \sin(ka)$$

$$= \frac{\cos(ka) \sin(k_0 a)\, k}{\left(k^2 \sin^2(k_0 a) + k_0^2 \cos^2(k_0 a)\right)^{1/2}}$$

$$- \frac{\sin(ka) \cos(k_0 a)\, k_0}{\left(k^2 \sin^2(k_0 a) + k_0^2 \cos^2(k_0 a)\right)^{1/2}}$$

$$= \frac{k \cos(ka) \sin(k_0 a) - k_0 \sin(ka) \cos(k_0 a)}{\left(k^2 \sin^2(k_0 a) + k_0^2 \cos^2(k_0 a)\right)^{1/2}}$$

Assim:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k)$$

$$= 4\pi \cdot \frac{\left(\cos(ka)\sin(k_0 a) - \frac{k_0}{k}\sin(ka)\cos(k_0 a)\right)^2}{k^2\left(\sin^2(k_0 a) + \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 \cos^2(k_0 a)\right)}$$

Aqui assumimos que $k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$

é real, ou seja $E > V_0$,

Caso contrário $k_0 = i\kappa_0$, $\kappa_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$

$$\sin(k_0 a) = \frac{1}{2i}\left(e^{-\kappa_0 a} - e^{\kappa_0 a}\right)$$

$$= i \sinh(\kappa_0 a)$$

$\cos(k_0 a) = \cosh(\kappa_0 a)$ e obtemos:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \cdot \frac{i^2\left(\cos(ka)\sinh(\kappa_0 a) - \frac{\kappa_0}{k}\sin(ka)\cosh(\kappa_0 a)\right)^2}{\left[-\sinh^2(\kappa_0 a) - \left(\frac{\kappa_0}{k}\right)^2 \cosh^2(\kappa_0 a)\right]}$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \cdot \frac{\left(\cos(ka)\sinh(\kappa_0 a) - \frac{\kappa_0}{k}\sin(ka)\cosh(\kappa_0 a)\right)^2}{\sinh^2(\kappa_0 a) + \frac{\kappa_0^2}{k^2}\cosh^2(\kappa_0 a)}$$

Na verdade, esta aproximação funciona se $ka \ll 1$, como notamos acima. Assim:

$E > V_0$

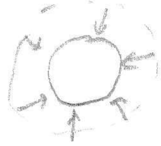
$$\sigma = 4\pi a^2 \left(\frac{\tan(k_0 a)}{k_0 a} - 1 \right)^2 ,$$

se $E < V_0$

$$\sigma = 4\pi a^2 \left(\frac{\tanh(k_0 a)}{k_0 a} - 1 \right)^2$$

Para $V_0 \to \infty$, parede impenetrável, $k_0 \to \infty$

$$\sigma = 4\pi a^2 = 4 \cdot \underbrace{(\pi a^2)}_{\text{resultado clássico}}$$



a onda s vê toda a superfície da esfera...

Se $V_0 < 0$, potencial atrativo, então $\tan(k_0 a) \to \infty$ quando $k_0 a = \frac{(2n+1)\pi}{2}$ $n = 0, 1, \ldots$

ou seja $E - V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{(2n+1)\pi}{2a} \right]^2$

$$E = -|V_0| + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{(2n+1)\pi}{2a} \right]^2 \gtrsim 0$$

O processo de espalhamento encontra ressonâncias quando

$$|V_0| \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left\{\left(\frac{\pi}{2}\right)^2, \left(\frac{3\pi}{2}\right)^2, \left(\frac{5\pi}{2}\right)^2, \dots\right\}$$

Sem estado ligado $\quad |V_0| < \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^2$

1 " " $\quad \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 < |V_0| < \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{3\pi}{2}\right)^2$

2 " " $\quad \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{3\pi}{2}\right)^2 < |V_0| < \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{5\pi}{2}\right)^2$

Ou seja, o estudo das ressonâncias permite identificar os estados ligados de sistemas atómicos ou nucleares...