Análise do espalhamento em termos de ondas parciais

Consideramos na nossa análise potenciais $V(\hat{r})$ com simetria esférica. Neste caso, podemos escrever as soluções como

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \sum_{lm} a_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Como a onda incidente tem um momento k ao longo do eixo dos z, também fizemos notar que na verdade

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_{l0} R_l(r) Y_{l0}(\theta).$$

As funções radiais $R_l(r)$ obedecem à equação diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_l}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l(r)\right] + V(r)R_l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}R_l$$

em que $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ é a energia da partícula incidente.

As funções $R_l(r)$ não são normalmente conhecidas, exceto para alguns casos particulares.

No caso de uma partícula livre, $V(r)=0$ e temos

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

Introduzindo agora a variável $x=kr$,

$\frac{d}{dr}=k\frac{d}{dx}$, fica

$$\frac{1}{x^2}\frac{d}{dx}\left(x^2\frac{dR_\ell^0}{dx}\right)-\frac{\ell(\ell+1)}{x^2}R_\ell^0+R_\ell^0(x)=0,$$

$$\frac{d}{dx}\left(x^2\frac{dR_\ell^0}{dx}\right)+\left[x^2-\ell(\ell+1)\right]R_\ell^0(x)=0,$$

que é a eq. diferencial para as funções de Bessel esféricas, $R_\ell^0(r)=j_\ell(kr),\ \eta_\ell(kr)$

Como $\psi_{inc}(r,\theta)=e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}$ é uma sol. da Eq. de Schr. na ausência de um potencial, deve poder escrever-se à custa de $j_\ell(kr)$ e $\eta_\ell(kr)$. Mas como $\eta_\ell(kr)$ ñ está definida na origem $\forall \ell$, temos que ter

$$e^{ikr\cos\theta}=\sum_{\ell=0}^{\infty}a_{\ell 0}^0\, j_\ell(kr)\,Y_{\ell 0}(\theta)$$

Introduzindo as funções de Legendre

$Y_{\ell 0}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\, P_\ell(\cos\theta)$, podemos escrever esta equação como:

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell 0}^{0} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\, j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta)$$

Para uma escolha particular da normalização de $j_\ell(kr)$, temos $a_{\ell 0}^{0} = i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}$, pelo que:

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1)\, j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta)$$

Mas agora note-se que a eq. na presença do potencial pode ser escrita como

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_\ell}{dr}\right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_\ell + k^2 R_\ell - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) R_\ell = 0$$

Quando $r \to \infty$, $V(r) \to 0$, e logo a eq. comporta-se exatamente como a eq. acima para $R_\ell^0(r)$. Ou seja, assimptoticamente:

$$\psi(r,\theta) \sim \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1)\,[\underbrace{A_\ell\, j_\ell(kr) + B_\ell\, \eta_\ell(kr)}_{R_\ell(r)\sim}]\, P_\ell(\cos\theta)$$

Mas o comportamento assimptótico de $j_\ell(kr)$ e $\eta_\ell(kr)$ é conhecido. Para as normalizações escolhidas, tem-se

$$j_\ell(kr) \sim \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{kr}$$

$$\eta_\ell(kr) \sim -\frac{\cos(kr - \ell\pi/2)}{kr}$$

Ora, $\psi(r,\theta) \sim e^{ikr\cos\theta} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$,

pelo que

$$\psi(r,\theta) - e^{ikr\cos\theta} \sim$$

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\{(A_\ell - 1)\,j_\ell(kr) + B_\ell\,\eta_\ell(kr)]$$

$$\sim \frac{f(\theta)}{r}\, e^{ikr}$$

Mas

$$(A_\ell - 1) j_\ell(kr) + B_\ell \eta_\ell(kr)$$

$$\sim \frac{(A_\ell - 1)}{2ikr}\left[e^{i(kr - \ell\pi/2)} - e^{-i(kr - \ell\pi/2)}\right]$$

$$- \frac{B_\ell}{2kr}\left[e^{i(kr - \ell\pi/2)} + e^{-i(kr - \ell\pi/2)}\right]$$

Mas os termos $\propto e^{-ikr}$ ñ podem estar presentes na expansão, pelo que

$$i(A_\ell - 1) - B_\ell = 0 \iff$$

$$B_\ell = i(A_\ell - 1)$$

escolhendo $A_\ell = e^{i\delta_\ell} \cos\delta_\ell(k)$
$= \frac{1}{2}\left(e^{2i\delta_\ell} + 1\right)$

$$B_\ell = -e^{i\delta_\ell(k)} \sin\delta_\ell(k)$$

Pelo que temos:

$$\frac{f(\theta)e^{ikr}}{r} \sim \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta)$$

$$\times \frac{1}{2kr}\Big\{-i(A_l - 1)\underbrace{e^{-il\pi/2}}_{= i^{-l}} - B_l \underbrace{e^{-il\pi/2}}_{= i^{-l}}\Big\} e^{ikr},$$

pelo que $f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta)\cdot$

$$\frac{1}{2k}\Big\{-i\left(e^{i\delta_l}\cos\delta_l(k) - 1\right) + e^{i\delta_l}\sin\delta_l(k)\Big\}$$

Mas $-i\left(e^{i\delta_l}\cos\delta_l - 1\right) + e^{i\delta_l}\sin\delta_l(k) =$

$$-\frac{i}{2}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) - \frac{i}{2}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)$$

$= -i\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)$, ou seja

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

Decomposição em ondas parciais

$$= \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\, e^{i\delta_\ell} \sin\delta_\ell(k)\; P_\ell(\cos\theta)$$

Note-se que

$$\sigma = \int d\Omega\, |f(\theta)|^2$$

$$= \frac{2\pi}{k^2}\sum_{\ell,\ell'} (2\ell+1)(2\ell'+1)\, e^{i(\delta_\ell-\delta_{\ell'})} \sin\delta_\ell \sin\delta_{\ell'} \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin\theta\, P_\ell(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta)}_{= \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell,\ell'}}$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\sin^2\delta_\ell$$

Mas $\operatorname{Im} f(0)$

$$= \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\, \underbrace{\operatorname{Im}\left[e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell(k)\right]}_{= \sin^2\delta_\ell(k)}\, \underbrace{P_\ell(0)}_{= 1}$$

$$= \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\sin^2\delta_\ell(k)$$, pelo que

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0),$$ o teorema ótico,

que, se se quiser, representa uma derivação alternativa do mesmo.

Nota: $$P_\ell(\cos\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\, Y_{\ell 0}(\theta)$$

Pelo que $$\int d\Omega\, P_\ell(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta)$$

$$= \frac{4\pi}{2\ell+1} \underbrace{\int d\Omega\, Y_{\ell 0}(\theta) Y_{\ell' 0}(\theta)}_{=\delta_{\ell,\ell'}}$$

$$= \frac{4\pi}{2\ell+1} \delta_{\ell,\ell'}$$

Mas $$\int d\Omega\, P_\ell(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta) =$$

$$2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta\, P_\ell(\cos\theta) P_{\ell'}(\cos\theta)$$

$$= \frac{4\pi}{2\ell+1} \delta_{\ell,\ell'} \Leftrightarrow$$

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \, P_\ell(\cos\theta)\, P_{\ell'}(\cos\theta) = \frac{2}{2\ell+1}\,\delta_{\ell,\ell'},$$

Como afirmado acima.