Gabarito: Lista 2

September 28, 2018

Problema 1

Considere a colisão de suas partículas de massas m_a e m_b. Dada a seção de choque diferencial no referencial do centro de massa, obtenha a seção de choque no referencial em que a partícula b está em repouso.

A figura abaixo mostra esquematicamente o processo de espalhamento tanto para o referencial do centro de massa quanto para o referencial do laboratório (partícula de massa m_2 está parada).[1]

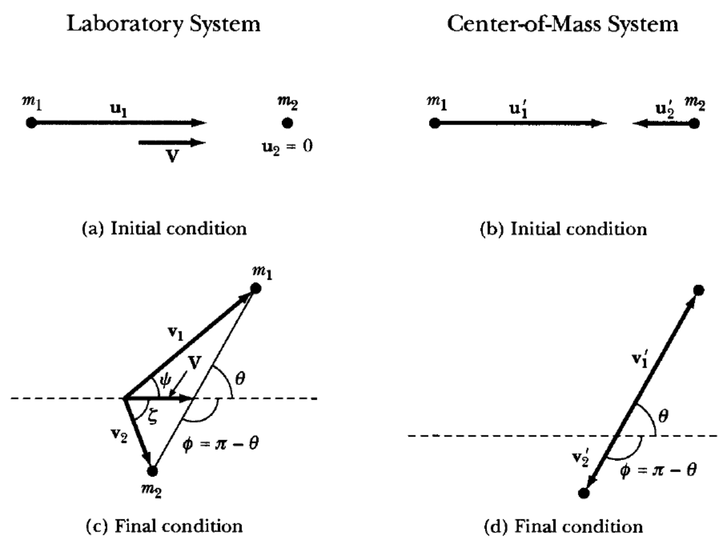

Figure 1: Retirada do livro Classical Dynamics of Particles and Systems - Marion & Thornton, 5ª ed.

Na figura acima, V é a velocidade do centro de massa no referencial do laboratório. É possível mostrar que os angulos de espalhamento θ, ϕ, ψ e ζ se relacionam por meio das expressões

$$\tan\psi = \frac{\sin\theta}{\cos\theta + (m_1/m_2)}, \qquad 2\zeta = \theta - \pi = \phi. \tag{1}$$

Uma vez que conhecemos a seção de choque deferencial $\sigma(\theta)$ no referencial do centro de massa, podemos relacionar $\sigma(\theta)$ com $\sigma(\psi)$ por meio de

$$\sigma(\theta)\, d\Omega_\theta = \sigma(\psi)\, d\Omega_\psi, \tag{2}$$

onde a relação acima surge do fato de que o número total de partículas espalhadas por unidade de ângulo sólido

[1] A fim de conciliar a notação com o que é mostrado na Figura 1, usaremos a numeração 1 e 2 para nos referir as partículas a e b, respectivamente.

deve ser o mesmo independende do referencial que estamos utilizando. Podemos então escrever (2) como

$$\sigma(\psi) = \sigma(\theta) \frac{\sin\theta}{\sin\psi} \frac{d\theta}{d\psi}.$$

Para determinarmos $d\theta/d\psi$, nós podemos reescrever (1) como

$$x = \frac{\sin\theta - \cos\theta \tan\psi}{\tan\psi} = \frac{\sin(\theta - \psi)}{\sin\psi}, \qquad x = \frac{m_1}{m_2}. \tag{3}$$

Lançando mão de que $dx = 0$ e de algumas identidades trigonométricas, temos que

$$\frac{d\theta}{d\psi} = \frac{\sin\theta}{\cos(\theta - \psi)\sin\psi},$$

de forma que

$$\sigma(\psi) = \sigma(\theta) \frac{\sin^2\theta}{\cos(\theta - \psi)\sin^2\psi}. \tag{4}$$

O próximo passo é eliminar a dependendia do ângulo θ na expressão para $\sigma(\psi)$. Multiplicando ambos os lados de (3) por $\cos\psi$ e então somando $\cos(\theta - \psi)$, nós temos que

$$\begin{aligned} x\cos\psi + \cos(\theta - \psi) &= \frac{\sin(\theta - \psi)}{\sin\psi}\cos\psi + \cos(\theta - \psi) \\ x\cos\psi + \cos(\theta - \psi) &= \frac{\sin(\theta - \psi)\cos\psi + \cos(\theta - \psi)\sin\psi}{\sin\psi} \\ x\cos\psi + \cos(\theta - \psi) &= \frac{\sin\theta}{\sin\psi}. \end{aligned} \tag{5}$$

Substituindo então (5) em (4), temos que

$$\sigma(\psi) = \sigma(\theta) \frac{[x\cos\psi + \cos(\theta - \psi)]^2}{\cos(\theta - \psi)}.$$

Por fim, utilizando novamente (3), podemos mostrar que

$$\cos(\theta - \psi) = \sqrt{1 - \sin^2(\theta - \psi)} = \sqrt{1 - x^2\sin^2\psi},$$

nos levando finalmente a expressão final para a seção de choque deferencial no referencial do laboratório

$$\sigma(\psi) = \sigma(\theta) \frac{\left[x\cos\psi + \sqrt{1 - x^2\sin^2\psi}\right]^2}{\sqrt{1 - x^2\sin^2\psi}}, \qquad x = \frac{m_1}{m_2}.$$

Alternativamente, utilizando a expressão (1) juntamente com

$$\sec^2\psi = 1 + \tan^2\psi,$$

nós podemos obter que

$$\cos\psi = \frac{\cos\theta + x}{\sqrt{(\cos\theta + x)^2 + \sin^2\theta}}, \qquad \sin\psi = \frac{\sin\theta}{\sqrt{(\cos\theta + x)^2 + \sin^2\theta}},$$

de forma que podemos eliminar a dependencia de ψ na expressão (4) para $\sigma(\psi)$. Sabendo que

$$\begin{aligned}
\frac{\sin^2\theta}{\cos(\theta-\psi)\sin^2\psi} &= \frac{\sin^2\theta}{[\cos\theta\cos\psi+\sin\theta\sin\psi]\sin^2\psi} \\
&= \frac{\left[(\cos\theta+x)^2+\sin^2\theta\right]^{3/2}}{\left[\cos\theta(\cos\theta+x)+\sin^2\theta\right]} \\
&= \frac{\left[\cos^2\theta+x^2+2x\cos\theta+\sin^2\theta\right]^{3/2}}{1+x\cos\theta} \\
\frac{\sin^2\theta}{\cos(\theta-\psi)\sin^2\psi} &= \frac{\left(1+2x\cos\theta+x^2\right)^{3/2}}{1+x\cos\theta},
\end{aligned}$$

temos que

$$\sigma(\psi)=\sigma(\theta)\frac{\left(1+2x\cos\theta+x^2\right)^{3/2}}{1+x\cos\theta}.$$

Problema 2

Demonstre que

$$R_l(r) = j_l(kr) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty dr' r'^2 G_k^{(l)}(r,r') V(r') R_l(r')$$

onde

$$G_k^{(l)}(r,r') = -ikj_l(kr_<) h_l^{(1)}(kr_>) .$$

Obtenha também uma expressão formal para o deslocamento de fase δ_l, bem como a primeira aproximação de Born para δ_l.

Vamos começar considerando a equação de Lippman-Schwinger para ondas parciais

$$|Elm(+)\rangle = |Elm\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V |Elm(+)\rangle ,$$

onde o sinal de + se refere a onda esférica emergente no processo de espalhamento. Projetando a solução acima na base de $|\vec{x}\rangle$, temos que

$$\langle \vec{x} | Elm(+)\rangle = \langle \vec{x} | Elm\rangle + \int d^3x' \int d^3x'' \langle \vec{x}| \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| V |\vec{x}''\rangle \langle \vec{x}'' | Elm(+)\rangle .$$

Em ordem de simplificar a expressão para $\langle \vec{x} | Elm(+)\rangle$, vamos relembrar que estamos considerando potenciais locais, ou seja,

$$\langle \vec{x}'| V |\vec{x}''\rangle = V(\vec{x}') \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}'') ,$$

implicando que

$$\langle \vec{x} | Elm(+)\rangle = \langle \vec{x} | Elm\rangle + \int d^3x' \langle \vec{x}| \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} |\vec{x}'\rangle V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | Elm(+)\rangle .$$

Nós também sabemos que

$$\langle \vec{x}| \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} |\vec{x}'\rangle = \frac{2\mu}{\hbar^2} G(\vec{x}, \vec{x}') ,$$

onde

$$\left(\nabla^2 + k^2\right) G(\vec{x}, \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') .$$

A fim de resolver a equação logo acima, vamos expandir $G(\vec{x}, \vec{x}')$ em harmônicos esféricos

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = -\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} g_l(r,r') Y_l^{m*}(\theta', \phi') Y_l^m(\theta, \phi) ,$$

bem como função delta

$$\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{r^2}\delta(r - r') \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\theta', \phi') Y_l^m(\theta, \phi) .$$

Como resultado, nós temos que

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] g_l(r,r') = -\frac{1}{r^2}\delta(r - r') \tag{6}$$

A equação diferencial para g_l é a equação radial para a partícula livre, exceto na quanto $r = r'$. Dessa forma, temos que

$$g_l(r,r') = \begin{cases} Aj_l(kr)\,h_l^{(1)}(kr') & r<r' \\ Aj_l(kr')\,h_l^{(1)}(kr) & r>r' \end{cases},$$

onde $h_l^{(1)}(kr) = j_l(kr) + in_l(kr)$ é uma das funções esféricas de Henkel.[2] Por último, falta verificar o comportamento da solução quando $r = r'$. Integrando (6) entre $r' - \varepsilon$ e $r' + \varepsilon$, nós temos que

$$\int_{r'-\varepsilon}^{r'+\varepsilon} \left[\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + r^2k^2 - l(l+1)\right] g_l(r,r')\,dr = -1,$$

de forma que

$$\rho^2 \frac{dg_l(\rho,\rho')}{d\rho}\bigg|_{\rho<\rho'}^{\rho>\rho'} = -k.$$

A condição de descontinuidade para a derivada de $g_l(\rho,\rho')$ é util para determinar o valor de A:

$$\begin{aligned} \rho'^2 A\left[j_l(\rho')\frac{dh_l^{(1)}(\rho')}{d\rho} - \frac{dj_l(\rho')}{d\rho}h_l^{(1)}(\rho')\right] &= -k \\ \rho'^2 Ai\left[j_l(\rho')\frac{dn_l(\rho')}{d\rho} - \frac{dj_l(\rho')}{d\rho}n_l(\rho')\right] &= -k \\ \rho'^2 Ai\left[j_l(\rho')\,n_{l+1}(\rho') - j_{l+1}(\rho')\,n_l(\rho')\right] &= k. \end{aligned}$$

Usando que

$$j_{l+1}(\rho')\,n_l(\rho') - j_l(\rho')\,n_{l+1}(\rho') = \frac{1}{\rho'},$$

temos que

$$A = ik,$$

implicando que

$$g_l = ikj_l(kr_<)\,h_l^{(1)}(kr_>),$$

onde $r_>$ significa o maior valor entre r e r', enquanto $r_<$ recebe o menor valor. Temos por fim que

$$G(\vec{x},\vec{x}') = -ik\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} j_l(kr_<)\,h_l^{(1)}(kr_>)\,Y_l^{m*}(\theta',\phi')\,Y_l^m(\theta,\phi).$$

Agora que conhecemos $G(\vec{x},\vec{x}')$, podemos substitui-la na expressão de $\langle\vec{x}\,|Elm(+)\rangle$, de forma que

$$\langle\vec{x}\,|Elm(+)\rangle = \langle\vec{x}\,|Elm\rangle + \frac{2\mu}{\hbar^2}\int d^3x'\,G(\vec{x},\vec{x}')\,V(\vec{x}')\,\langle\vec{x}'\,|Elm(+)\rangle\,. \tag{7}$$

Vamos recordar que

$$\langle\vec{x}\,|Elm(+)\rangle = R_l(r)\,Y_l^m(\theta,\phi)$$

e

$$\langle\vec{x}\,|Elm\rangle = j_l(kr)\,Y_l^m(\theta,\phi),$$

[2] A função de Henkel $h^{(2)}(kr)$ descreve uma onda imergente. Isso pode ser visto por conta de sua forma assintótica

$$h_l^{(2)}(kr) \approx e^{-i(kr-l\pi/2)}/ikr, \qquad kr \gg 1.$$

de forma que a integral em (7) pode ser escrita como

$$-ik\sum_{l'=0}^{\infty}\sum_{m'=-l'}^{l'}\int d^3x' j_{l'}\left(kr_<\right)h_{l'}^{(1)}\left(kr_>\right)Y_{l'}^{m'*}\left(\theta',\phi'\right)Y_{l'}^{m'}\left(\theta,\phi\right)V\left(\vec{x}'\right)R_l\left(r'\right)Y_l^m\left(\theta',\phi'\right).$$

Utilizando a ortogonalidade dos hamônicos esféricos e também considerando que $V\left(\vec{x}'\right)$ é esféricamente simétrico, é possível escreve a expressão loga acima como

$$-ik\int dr'r'^2 j_l\left(kr_<\right)h_l^{(1)}\left(kr_>\right)V\left(r'\right)R_l\left(r'\right)Y_l^m\left(\theta,\phi\right),$$

de forma que

$$R_l\left(r\right)Y_l^m\left(\theta,\phi\right)=j_l\left(kr\right)Y_l^m\left(\theta,\phi\right)-\frac{2\mu ik}{\hbar^2}\int_0^{\infty}dr'r'^2 j_l\left(kr_<\right)h_l^{(1)}\left(kr_>\right)V\left(r'\right)R_l\left(r'\right)Y_l^m\left(\theta,\phi\right).$$

Por fim, definindo

$$G_k^{(l)}\left(r,r'\right)=-ikj_l\left(kr_<\right)h_l^{(1)}\left(kr_>\right),$$

nós temos que

$$R_l\left(r\right)=j_l\left(kr\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^{\infty}dr'r'^2 G_k^{(l)}\left(r,r'\right)V\left(r'\right)R_l\left(r'\right). \tag{8}$$

Em ordem de determinar determinar uma expressão para o phase shift $\dot{\delta}_l$, vamos anlisar a expressão (8) no limite em que $r\to\infty$. Para esse limite, nós temos que

$$j_l\left(kr\right)\approx\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2ikr}, h_l^{(1)}\left(kr\right)\approx\frac{e^{i(kr-(l+1)\pi/2)}}{kr},$$

de forma que

$$\begin{aligned}
G_k^{(l)}\left(r,r'\right)&=-ikj_l\left(kr'\right)h_l^{(1)}\left(kr\right)\\
&=-ikj_l\left(kr'\right)\left(\frac{e^{i(kr-(l+1)\pi/2)}}{kr}\right)\\
G_k^{(l)}\left(r,r'\right)&=-ij_l\left(kr'\right)\left(\frac{e^{i(kr-(l+1)\pi/2)}}{r}\right).
\end{aligned}$$

Substituindo o resultado acima em (8), temos que

$$\begin{aligned}
R_l\left(r\right)&=j_l\left(kr\right)-\frac{2\mu i}{\hbar^2}\left(\frac{e^{i(kr-(l+1)\pi/2)}}{r}\right)\int_0^{\infty}dr'r'^2 j_l\left(kr'\right)V\left(r'\right)R_l\left(r'\right)\\
&=\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2ikr}-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{e^{ikr}i^{-l}}{r}\int_0^{\infty}dr'r'^2 j_l\left(kr'\right)V\left(r'\right)R_l\left(r'\right)\\
&=\frac{e^{ikr}i^{-l}}{2ikr}\left[1-\frac{4i\mu k}{\hbar^2}\int_0^{\infty}dr'r'^2 j_l\left(kr'\right)V\left(r'\right)R_l\left(r'\right)\right]-\frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2ikr}\\
R_l\left(r\right)&=\frac{i^{-l}}{2ik}\left[\left(1-\frac{4i\mu k}{\hbar^2}\int_0^{\infty}dr'r'^2 j_l\left(kr'\right)V\left(r'\right)R_l\left(r'\right)\right)\frac{e^{ikr}}{r}-\frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r}\right].
\end{aligned} \tag{9}$$

A expressão (9) pode ser comparada com a seguinte decomposição em ondas parciais para a onda espalhada

$$\langle\vec{x}\,|\psi\left(+\right)\rangle\underset{\longrightarrow}{\text{grande r}}\frac{1}{\left(2\pi\right)^{3/2}}\sum_l\left(2l+1\right)\frac{P_l}{2ik}\left[\left(1+2ikf_l\left(k\right)\right)\frac{e^{ikr}}{r}-\frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r}\right],$$

possibilitanto assim reconhecer a aimplitude de onda parcial $f_l\left(k\right)$ como

$$f_l\left(k\right) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr' r'^2 j_l\left(kr'\right) V\left(r'\right) R_l\left(r'\right).$$

Por fim, sabendo que $f_l\left(k\right)$ está relacionado com a fase δ_l por meio de

$$f_l\left(k\right) = \frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k},$$

temos finalmente que

$$\frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k} = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr r^2 j_l\left(kr\right) V\left(r\right) R_l\left(r\right), \tag{10}$$

que é uma expressão formal para δ_l.

Problema 3

Considere um sistema unidimensional cuja equação de Schrodinger é

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+V\left(x\right)\right)\Psi\left(x\right)=E\Psi\left(x\right)$$

onde $V\left(x\right)$ anula-se no limite $x\to\infty$ e $E>0$.

a) Obtenha a equação integral para as soluções do contínuo. Escreva $E=\hbar^2k^2/2\mu$.

b) Obtenha uma expressão para os coeficientes de reflexão e transmissão.

c) Obtenha os coeficientes de transmissão e reflexão na aproximação de Born.

a) Vamos rescrever a equação de Schrodinger como

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\Psi\left(x\right)=\mathcal{L}_k\Psi\left(x\right)=U\left(x\right)\Psi\left(x\right), \tag{11}$$

onde

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},\qquad U\left(x\right)=\frac{2mV\left(x\right)}{\hbar^2}.$$

Nós podemos transformar a equação (11) em uma equação integral. Para isso, vamos utilizar que a função de Green do operador $\mathcal{L}_k$ é dada por

$$G_k\left(x,x'\right)=\frac{1}{2ki}e^{ik\left|x-x'\right|},$$

onde

$$\mathcal{L}_kG_k\left(x,x'\right)=\delta\left(x-x'\right).$$

Dessa forma, nós podemos escrever $\Psi\left(x\right)$ como

$$\Psi_k\left(x\right)=\varphi_k\left(x\right)+\int_{-\infty}^{\infty}dx'G_k\left(x,x'\right)U\left(x'\right)\Psi_k\left(x'\right), \tag{12}$$

onde

$$\mathcal{L}_k\varphi_k\left(x\right)=0.$$

A função $\varphi_k\left(x\right)$ é a solução da equação de Schrodinger livre.

b) Vamos considerar o caso de energias positivas, onde o estado tem momento $\hbar k$. Isso significa que estamos estudando ondas que se propagam da esquerda para a direita. Feitas essas considerações, podemos escrever $\Psi_k\left(x\right)$ como

$$\Psi_k\left(x\right)=e^{ikx}+\int_{-\infty}^{\infty}dx'G_k\left(x,x'\right)U\left(x'\right)\Psi_k\left(x'\right).$$

A integral logo acima na variavel x' é diferente de zero somente em regiões onde o “potencial” $U\left(x\right)$ é diferente de zero. Suponha então que $U\left(x\right)$ desaparece para $|x|>a$. Tal suposição é útil para que possamos estudar o comportamento assintótico de $\Psi_k\left(x\right)$, onde é util escrever a função $G_k\left(x,x'\right)$ em termos da função degrau

$$\theta\left(x-x'\right)=\begin{cases}1 & x>x'\\ 0 & x<x'\end{cases},$$

de modo que

$$G_k(x,x') = \frac{1}{2ki}\left[\theta(x-x')\,e^{ik\left(x-x'\right)} + \theta(x'-x)\,e^{-ik\left(x-x'\right)}\right].$$

No limite onde $x \to \infty$, nós temos que

$$\begin{aligned}
\Psi_k(x) &= e^{ikx} + \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\theta(x-x')\,e^{ik\left(x-x'\right)}U(x')\,\Psi_k(x') \\
&= e^{ikx} + \frac{1}{2ki}\theta(x-a)\,e^{ikx}\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-ikx'}U(x')\,\Psi_k(x') \\
\Psi_k(x) &= \left[1 + \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-ikx'}U(x')\,\Psi_k(x')\right]e^{ikx},
\end{aligned}$$

de forma que podemos reconhecer a expressão para coeficiente de transmissão como

$$T(k) = 1 + \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-ikx'}U(x')\,\Psi_k(x'). \tag{13}$$

Por outro lado, considerando também o limite $x \to -\infty$, nós temos que

$$\begin{aligned}
\Psi_k(x) &= e^{ikx} + \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\theta(x'-x)\,e^{-ik\left(x-x'\right)}U(x')\,\Psi_k(x') \\
&= e^{ikx} + \frac{1}{2ki}\theta(-a-x)\,e^{-ikx}\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{ikx'}U(x')\,\Psi_k(x') \\
\Psi_k(x) &= e^{ikx} + \left[\frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{ikx'}U(x')\,\Psi_k(x')\right]e^{-ikx},
\end{aligned}$$

onde expressão logo acima nos fornece o coeficiente de reflexão

$$R(k) = \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{ikx'}U(x')\,\Psi_k(x'). \tag{14}$$

Vale a pena lembrar que por conta da conservação de probabilidade

$$|T(k)|^2 + |R(k)|^2 = 1.$$

c) Na aproximação de Born de primeira ordem, nós consideramos que $\Psi_k(x') = e^{ikx'}$, implicando que

$$\begin{aligned}
T(k) &= 1 + \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{\infty} dx' U(x'), \\
R(k) &= \frac{1}{2ki}\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{2ikx'}U(x').
\end{aligned}$$

Problema 4

Obtenha a seção de choque para o espalhamento coulombiano.

Solução utilizando coordenadas parabólicas

Para calcularmos a seção de choque para o potencial da forma

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r}, \qquad \alpha = ZZ'e^2,$$

nós podemos introduzir coordenadas parabólicas[3]

$$\begin{aligned} \xi &= r - z = r(1-\cos\theta), \\ \eta &= r + z = r(1+\cos\theta), \\ \phi &= \phi, \end{aligned}$$

de forma que a equação de Schrodinger adiquire a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{1}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\Psi}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial\Psi}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right\}+\frac{2\alpha}{\xi+\eta}\Psi = E\Psi, \Psi = \Psi(\xi,\eta,\phi). \tag{15}$$

Em ordem de determinar a seção de choque do processo de espalhamento, vamos utilizar uma solução para (15) da forma

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = e^{ikz}f(r-z) = e^{i\frac{k}{2}(\eta-\xi)}f(\xi).$$

Perceba que a solução logo acima não depende do ângulo azimutal ϕ devido a simetria esférica do potencial coulombiano. Inserindo $\Psi(\xi,\eta,\phi)$ em (15), nós temos que

$$\xi\frac{\partial^2 f(\xi)}{\partial\xi^2}+(1-ik\xi)\frac{\partial f(\xi)}{\partial\xi}+\frac{\alpha\mu}{\hbar^2}f(\xi) = 0.$$

Definindo que

$$\gamma = -\frac{\mu\alpha}{\hbar^2 k}, \tag{16}$$

nós obtemos a seguinte equação diferencial para $f(\xi)$:

$$\xi\frac{\partial^2 f(\xi)}{\partial\xi^2}+(1-ik\xi)\frac{\partial f(\xi)}{\partial\xi}-\gamma k f(\xi) = 0. \tag{17}$$

Introduzindo $x = ik\xi$, a equação (17) adquire a forma mesma forma da equação diferencial para a função hipergeométrica confluente

$$x\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}+(1-x)\frac{\partial f(x)}{\partial x}+i\gamma f(x) = 0, x = ik\xi,$$

que é a mesma forma da equação diferencial para a função hipergeométrica confluente

$$x\frac{d^2F}{dx^2}+(b-x)\frac{dF}{dx}-aF = 0, F = F(a,b,x),$$

de forma que

$$f(\xi) = CF(-i\gamma, 1, ik\xi). \tag{18}$$

[3] Para mais detalhes sobre esse procedimento, veja Cap. 16 do livro "Quantum mechanics, Leonard I. Schiff - 1949".

A função hipergeométrica confluente que é regular em $x = 0$ pode ser escrita como

$$F(a, b, x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+s)\Gamma(b)x^s}{\Gamma(b)\Gamma(b+s)\Gamma(1+s)}.$$

Contudo, nós estamos interessados no limite $r \to \infty$ ($x \to \infty$), de forma que

$$F(-i\gamma, 1, x) \to \frac{e^{\gamma\pi/2}}{\Gamma(1+i\gamma)}\left[e^{i\gamma\ln(-ix)}\left(1 - \frac{\gamma^2}{x} + \cdots\right) + \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)}\frac{e^x}{x}e^{-i\gamma\ln(-ix)}\right].$$

Agora nós estamos em posição de entender Ψ como

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_i(\vec{r}) + \Psi_{sc}(\vec{r}),$$

onde a onda espalhada tem a forma

$$\Psi_{sc}(\vec{r}) = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)}\frac{e^{-i\gamma\ln\sin^2\theta/2}}{2ik\sin^2\theta/2}\left[\frac{e^{i(kr-\gamma\ln 2kr)}}{r}\right],$$

provendo assim a amplitude de espalhamento

$$f(\theta) = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)}\frac{e^{-i\gamma\ln\sin^2\theta/2}}{2ik\sin^2\theta/2}. \tag{19}$$

Sabendo que

$$\begin{aligned}\Gamma(z+1) &= z\Gamma(z),\\ \Gamma(z^*) &= \Gamma(z)^*,\end{aligned}$$

temos que

$$\begin{aligned}|f(\theta)|^2 &= \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)}\frac{\Gamma(1-i\gamma)}{\Gamma(i\gamma)}\frac{1}{4k^2\sin^4\theta/2}\\ &= \frac{i\gamma\Gamma(i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)}\frac{(-i\gamma)\Gamma(-i\gamma)}{\Gamma(i\gamma)}\frac{1}{4k^2\sin^4\theta/2}\\ &= \frac{\gamma^2}{4k^2\sin^4\theta/2}\\ |f(\theta)|^2 &= \frac{\mu^2\left(ZZ'e^2\right)^2}{4\hbar^4k^4\sin^4\theta/2},\end{aligned}$$

onde utilizamos que a expressão para γ definida em (16). Por fim

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{\mu^2\left(ZZ'e^2\right)^2}{4\hbar^4k^4\sin^4\theta/2}. \tag{20}$$

Solução utilizando aproximação de Born em primeira ordem

Considerando a aproximação de Born em primeira ordem, a amplitude de espalhamento é dada por

$$f\left(\vec{k}, \vec{k}'\right) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' e^{i\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\cdot\vec{x}}V(\vec{x}). \tag{21}$$

No caso de potenciais esféricamente simétricos, nós temos que

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^{\pi} d\theta' \sin\theta' \int_0^{\infty} dr' r'^2 e^{iqr'\cos\theta'} V(r') \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} 2\pi \int_0^{\infty} dr' r'^2 V(r') \int_{-1}^{1} e^{iqr'\mu} d\mu \\
&= -\frac{m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr' r'^2 V(r') \frac{e^{iqr'} - e^{-iqr'}}{iqr'} \\
f(\theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} dr' r' V(r') \sin(qr'), \qquad (22)
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
q &= \left|\vec{k} - \vec{k}'\right| = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\theta} = k\sqrt{2(1-\cos\theta)} \\
&= k\sqrt{2\left(1 - \cos^2\theta/2 + \sin^2\theta/2\right)} \\
q &= 2k\sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \qquad (23)
\end{aligned}$$

de forma que θ é o angulo de espalhamento.[4]

Para tratarmos o potencial coulombiano, é conviniente escrever o potencial como

$$V(r) = -\frac{V_0 e^{-\mu r}}{r}, V_0 = ZZ'e^2,$$

onde no limite $\mu \to 0$ nós recuperamos o potencial coulombiano convencional. Feito isso, temos que

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= \frac{2m}{\hbar^2 q} V_0 \int_0^{\infty} dr' e^{-\mu r'} \sin(qr') \\
&= \frac{2m}{\hbar^2 q} V_0 \int_0^{\infty} dr' \frac{e^{iqr' - \mu r'} - e^{-iqr' - \mu r'}}{2i} \\
&= -i\frac{m}{\hbar^2 q} V_0 \left[\frac{e^{iqr' - \mu r'}}{iq - \mu} - \frac{e^{-iqr' - \mu r'}}{-iq - \mu}\right]\Bigg|_0^{\infty} \\
f(\theta) &= i\frac{m}{\hbar^2 q} V_0 \left[\frac{1}{iq - \mu} + \frac{1}{iq + \mu}\right].
\end{aligned}$$

Tomando então o limite $\mu = 0$, a amplitude de espalhamento para o potencial coulombiano assume a forma

$$f(\theta) = \frac{2m}{\hbar^2 q^2} V_0.$$

Sabendo que a seção de choque diferencial é dada em fermos de $f(\theta)$ por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2,$$

temos por fim que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2m)^2 \left(ZZ'e^2\right)^2}{\hbar^4 16 k^4 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}. \qquad (24)$$

[4]Utilizamos o fato de que estamos tratando de espalhamentos elásticos, de forma que por conservação de energia $k' = k$.

Problema 5

Ainda para o problema de Coulomb obtenha:

a) O comportamento assintótico para $r \to \infty$ de u_l.

b) Obtenha f_l tal que a amplitude de espalhamento possa ser escrita como

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) f_l.$$

c) Relacione os polos de f_l com as energias dos estados ligados do problema de Coulomb.

a) Vamos começar rescrevendo a equação radial para o potencial coulombiano como

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_{nl}(r)}{dr}\right) + \left[k^2 r^2 + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2} r - l(l+1)\right] R_{nl}(r) = 0.$$

Para os casos onde $k > 0$, podemos testar uma solução da forma

$$R_{kl}(r) = r^{a-1} e^{br} = \frac{e^{a \ln r} e^{br}}{r},$$

nos levando a seguinte equação algébrica

$$[a(a-1) - l(l+1)] r^{-1} + \left[2ba + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\right] + \left(b^2 + k^2\right) r = 0.$$

Considerando o limite onde $r \to \infty$, temos que

$$b = \pm ik, a = \pm i\frac{\mu\alpha}{\hbar^2 k},$$

de forma que

$$R_{kl}(r) \approx \frac{e^{\pm i(kr - \gamma \ln r)}}{r}, \gamma = -\frac{\mu\alpha}{\hbar^2 k}.$$

O potencial coulombiano induz uma mudança de fase $-\gamma \ln r$ que cresce arbitrariamente conforme $r \to \infty$.

b) Sabendo que

$$f(\theta) = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)} \frac{e^{-i\gamma \ln \sin^2 \theta/2}}{2ik \sin^2 \theta/2}, \tag{25}$$

nos podemos escrever $f(\theta)$ em termos de polinômios de Legendre

$$f(\theta) = \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) f_l,$$

de forma que

$$f_l = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) P_l(\cos\theta) f(\theta). \tag{26}$$

Utilizando que

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \Gamma(z^*) = \Gamma(z)^*,$$

podemos rescrever (25) como

$$
\begin{aligned}
f(\theta) &= \frac{-i\gamma\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{e^{-i\gamma \ln \sin^2 \theta/2}}{2ik \sin^2 \theta/2} \\
&= -\frac{\gamma}{2k} e^{2i\delta_0} \frac{e^{-i\gamma \ln \sin^2 \theta/2}}{2 \sin^2 \theta/2} \\
&= -\frac{\gamma}{2k} e^{2i\delta_0} \frac{\left(\sin^2 \theta/2\right)^{-i\gamma}}{\sin^2 \theta/2} \\
f(\theta) &= -\frac{\gamma}{2k} e^{2i\delta_0} \left(\sin^2 \theta/2\right)^{-i\gamma-1}, \qquad (27)
\end{aligned}
$$

onde definimos que

$$e^{2i\delta_0} = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}.$$

Podemos então inserir (27) em (26), obtendo então

$$f_l = -\frac{\gamma}{4k} e^{2i\delta_0} \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, P_l(\cos\theta) \left(\sin^2 \theta/2\right)^{-i\gamma-1}.$$

Utilizando que

$$\sin^2 \theta/2 = \frac{1-\cos\theta}{2}$$

e

$$P_l(x) = \frac{1}{l!2^l} \frac{d^l}{dx^l} \left(x^2-1\right)^l,$$

a expressão para f_l assume a forma

$$f_l = -\frac{\gamma}{4k} e^{2i\delta_0} \int_{-1}^{1} dx \left[\frac{1}{l!2^l} \frac{d^l}{dx^l} \left(x^2-1\right)^l\right] \left(\frac{1-x}{2}\right)^{-i\gamma-1}. \qquad (28)$$

Nós podemos integrar a expressão logo acima por partes l vezes[5], de forma que

$$f_l = \frac{1}{2ik} \frac{(l+i\gamma)\cdots(1+i\gamma)}{(l-i\gamma)\cdots(1-i\gamma)} e^{2i\delta_0}.$$

Se nós também definirmos

$$
\begin{aligned}
e^{2i\delta_l} &= \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{\Gamma(l+1-i\gamma)} = \frac{(l+i\gamma)\Gamma(l+i\gamma)}{(l-i\gamma)\Gamma(l-i\gamma)} = \frac{(l+i\gamma)(l-1+i\gamma)\Gamma(l-1+i\gamma)}{(l-i\gamma)(l-1-i\gamma)\Gamma(l-1-i\gamma)} \\
&= \frac{(l+i\gamma)(l-1+i\gamma)(l-2+i\gamma)\Gamma(l-2+i\gamma)}{(l-i\gamma)(l-1-i\gamma)(l-2-i\gamma)\Gamma(l-2-i\gamma)} \\
&= \frac{(l+i\gamma)(l-1+i\gamma)(l-2+i\gamma)\cdots(1+i\gamma)\Gamma(1+i\gamma)}{(l-i\gamma)(l-1-i\gamma)(l-2-i\gamma)\cdots(1-i\gamma)\Gamma(1-i\gamma)} \\
e^{2i\delta_l} &= \frac{(l+i\gamma)(l-1+i\gamma)(l-2+i\gamma)\cdots(1+i\gamma)}{(l-i\gamma)(l-1-i\gamma)(l-2-i\gamma)\cdots(1-i\gamma)} e^{2i\delta_0}, \qquad (29)
\end{aligned}
$$

a expressão para f_l assume a forma

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l}}{2ik},$$

[5]Veja Capítulo 10 de "Lectures on quantum mechanics, Gordon Baym (1974)" para mais informações sobre a convergência da integral mostrada em (28), bem como mais detalhes sobre "Coulomb Scattering".

de forma que por fim temos

$$f(\theta) = \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \frac{e^{2i\delta_l}}{2ik}, \qquad e^{2i\delta_l} = \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{\Gamma(l+1-i\gamma)}. \tag{30}$$

c) Os polos de f_l são dados por

$$l+1+i\gamma = 0, -1, -2, \ldots,$$

de forma que

$$-i\frac{\mu\alpha}{\hbar^2 k} = -(l+1), -(l+2), -(l+3), \ldots.$$

Temos então que então que

$$k = i\frac{\mu\alpha}{\hbar^2 n}, \qquad n = l+1, l+2, \ldots.$$

Por fim, sabendo que $E = \hbar^2 k^2/2\mu$, podemos associar os valores de k mostrados logo acima com as energias dos estados ligados com momento angular l para o potencial coulombiano atrativo, mais precisamente

$$E_n = -\frac{\mu\left(ZZ'e^2\right)^2}{2\hbar^2 n^2}, \qquad n = l+1, l+2, \ldots. \tag{31}$$