

VI.2) Ondas parciais e “phase shifts”

Vamos agora estudar o problema do contínuo em potenciais esfericamente simétricos. Em particular, estaremos interessados em potenciais do tipo

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

Neste caso, a equação de Schrödinger radial escreve-se como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR_l(r)) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} R_l(r) + V(r) R_l(r) = ER_l(r),$$

cuja solução geral é

$$R_l(r) = \tilde{A}_l j_l(kr) + \tilde{B}_l n_l(kr), \quad (\text{VI.2.1})$$

onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $j_l(kr)$ e $n_l(kr)$ são, respectivamente, as funções de Bessel e Neumann esféricas. Uma outra alternativa é escrever (VI.2.1) como

$$R_l(r) = A_l h_l(kr) + B_l h_l^*(kr), \quad (\text{VI.2.2})$$

onde $h_l(kr) = j_l(kr) + in_l(kr)$.

No caso da partícula livre, $V = 0$, $A_l = B_l = C_l/2$ e $R_l(r) = C_l j_l(kr) \Rightarrow \tilde{A}_l = C_l$ e $\tilde{B}_l = 0$, mas, no caso geral, devemos ter

$$R_l(r) \propto h_l^*(kr) + S_l(k) h_l(kr),$$

onde $S_l(k) \equiv A_l/B_l$.

Por outro lado, devido ao fato do potencial não criar nem absorver partículas, $J_r = 0$, ou seja,

$$J_r = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ R^* \frac{dR_l}{dr} - R \frac{dR_l^*}{dr} \right\} = 0,$$

de onde, usando a (VI.2.2) e a definição de S_l acima, temos

$$J_r \propto \left(h_l \frac{dh_l^*}{dr} - h_l^* \frac{dh_l}{dr} \right) (1 - S_l^* S_l) = 0$$

$$\Rightarrow S_l^* S_l = 1 \text{ ou } |S_l|^2 = 1$$

$$\Rightarrow S_l(k) = e^{i\theta_l(k)}. \quad (\text{VI.2.3})$$

Desta forma,

$$R_l(r) \propto h_l^*(kr) + S_l(k) h_l(kr) = j_l(kr) \left[1 + e^{i\theta_l(k)} \right] - in_l(kr) \left[1 - e^{i\theta_l(k)} \right],$$

ou seja,

$$R_l(r) \propto j_l(kr) - i \frac{[1 - e^{i\theta_l(k)}]}{[1 + e^{i\theta_l(k)}]} n_l(kr) = j_l(kr) - \tan \frac{\theta_l(k)}{2} n_l(kr) \propto \cos \delta_l(k) j_l(kr) - \sin \delta_l(k) n_l(kr), \quad (\text{VI.2.4})$$

onde $\delta_l(k) \equiv \theta_l(k)/2$. Assintoticamente temos

$$R_l(r) \sim \cos \delta_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} + \sin \delta_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} = \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \quad (\text{VI.2.5})$$

e, portanto, a função radial fica apenas defasada do comportamento assintótico da função livre, $j_l(kr)$, por um fator $\delta_l(k)$ que é o chamado *deslocamento de fase* ou *phase shift*.

A solução geral da equação de Schrödinger, $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$, pode ser expandida como

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l(k) P_l(\cos\theta) R_l(r) \quad (\text{VI.2.6})$$

que assintoticamente comporta-se como

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) &\sim \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} a_l(k) P_l(\cos\theta) [h_l^*(kr) + e^{2i\delta_l} h_l(kr)] \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} a_l(k) P_l(\cos\theta) j_l(kr) + \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} a_l(k) P_l(\cos\theta) [e^{2i\delta_l} - 1] h_l(kr), \end{aligned}$$

que, por sua vez, deve ser igual a

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (\text{VI.2.7})$$

Daqui, podemos indentificar $a_l(k) = i^l (2l+1)$ pois $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) j_l(kr)$. Então,

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) e^{i\delta_l} \sin\delta_l \frac{e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})}}{ikr}, \quad (\text{V.2.8})$$

onde usamos que $h_l(kr) \sim e^{i(kr - (l+1)\pi/2)}/kr = (-i)^l e^{ikr}/ikr$. Portanto,

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \right\} \frac{e^{ikr}}{r},$$

de onde finalmente identificamos

$$f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{k} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta). \quad (\text{VI.2.9})$$

Concluimos, então, que a amplitude de espalhamento fica determinada se conhecermos os phase shifts das ondas parciais de todos os l 's.

Consequentemente,

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f_k(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta), \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \sigma &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1} \\ \Rightarrow \sigma &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l \equiv \sum_l \sigma_l, \end{aligned}$$

onde

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2\delta_l \quad (\text{VI.2.10})$$

é a seção de choque total da onda parcial de momento angular l .

Esta expressão de $f_k(\theta)$ ainda nos permite demonstrar o chamado *teorema ótico* que nos diz que

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f_k(0). \quad (\text{VI.2.11})$$

Usando a (VI.2.9) para $\theta = 0$ temos

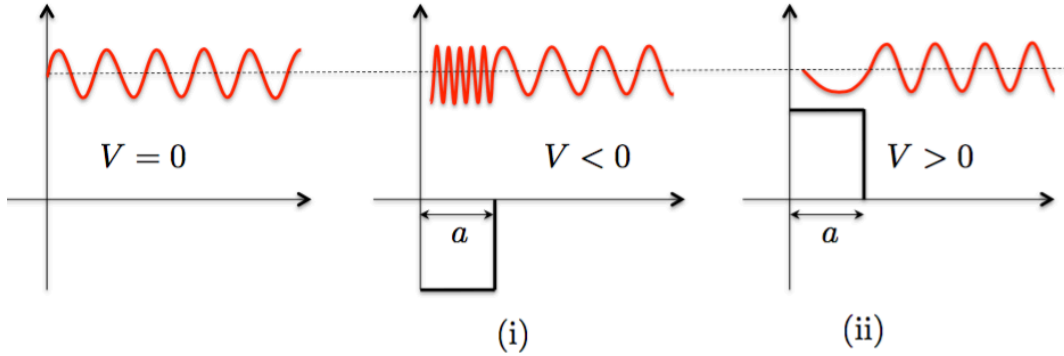
$$f_k(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l,$$

pois $P_l(1) = 1$. Então,

$$\begin{aligned} \text{Im} f_k(0) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \\ &= \frac{k}{4\pi} \sigma \\ \Rightarrow \sigma &= \frac{4\pi}{k} \text{Im} f_k(0). \end{aligned}$$

A interpretação deste resultado é que a corrente total espalhada deve ser igual à que foi retirada do feixe inicial devido à presença do centro espalhador. Esta redução resulta da interferência do feixe inicial com a onda espalhada que é, então, proporcional à amplitude de espalhamento na direção frontal.

Interpretação dos phase shifts.



- (i) V “puxa” a função para dentro do poço $\Rightarrow \delta_l > 0$.
- (ii) V “empurra” a função para fora do poço $\Rightarrow \delta_l < 0$.

Determinação dos phase shifts

Os phase shifts podem ser determinados pelas condições de contorno na descontinuidade do potencial $V(r)$ em $r = a$. Então, ao encontrarmos as soluções internas e externas a $r = a$ devemos exigir a continuidade de $R_l(a)$ e $dR_l/dr|_{r=a}$, ou seja, a continuidade da derivada logarítmica

$$\beta_l = \frac{a}{R_l(a)} \left. \frac{dR_l}{dr} \right|_{r=a}. \quad (\text{VI.2.12})$$

Como sabemos

$$\begin{aligned} R_l(r) &= \frac{1}{2} [h_l^*(kr) + e^{2i\delta_l} h_l(kr)] \\ \Rightarrow \beta_l &= ka \left\{ \frac{h_l'^* + e^{2i\delta_l} h_l'}{h_l^* + e^{2i\delta_l} h_l} \right\}, \quad (\text{VI.2.13}) \end{aligned}$$

onde $h_l' \equiv dh_l(kr)/d(kr)|_{r=a}$ e $h_l \equiv h_l(ka)$.

Então, desta expressão para β_l , podemos escrever

$$\begin{aligned} e^{2i\delta_l} &= \frac{\beta_l h_l^* - ka h_l'^*}{ka h_l' - \beta_l h_l} \\ &= -\frac{h_l^*}{h_l} \left\{ \frac{\beta_l - ka (h_l'^*/h_l^*)}{\beta_l - ka (h_l'/h_l)} \right\}, \end{aligned}$$

ou ainda, definindo

$$-\frac{h_l^*}{h_l} = \frac{j_l - in_l}{j_l + in_l} \equiv e^{2i\xi_l} \quad (\text{VI.2.14})$$

e

$$ka \frac{h_l'}{h_l} = ka \frac{j_l' + in_l'}{j_l + in_l} \equiv \Delta_l + is_l, \quad (\text{VI.2.15})$$

temos, finalmente,

$$e^{2i\delta_l} = e^{2i\xi_l} \left[\frac{\beta_l - \Delta_l + is_l}{\beta_l - \Delta_l - is_l} \right], \quad (\text{VI.2.16})$$

que é equivalente a

$$e^{i\delta_l} \sin \delta_l = e^{i\xi_l} \sin \xi_l + e^{2i\xi_l} \frac{s_l}{\beta_l - \Delta_l - is_l}. \quad (\text{VI.2.17})$$

Os parâmetros Δ_l e s_l podem ser facilmente determinados

$$\begin{aligned} \Delta_l + is_l &= ka \frac{j_l' + in_l'}{j_l + in_l} \\ &= ka \frac{(j_l' + in_l')(j_l - in_l)}{j_l^2 + n_l^2} \\ &= ka \left[\frac{j_l j_l' + n_l n_l'}{j_l^2 + n_l^2} \right] + ika \left[\frac{j_l n_l' - j_l' n_l}{j_l^2 + n_l^2} \right]. \end{aligned}$$

Mas, devido a j_l e n_l serem soluções degeneradas da equação de Schrödinger, podemos mostrar que obedecem a

$$\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot [\psi_1^* \nabla \psi_2 - \psi_2 \nabla \psi_1^*] = 0$$

e, conseqüentemente, usando o teorema de Gauss, temos

$$j_l n_l' - j_l' n_l = \text{const.} \frac{1}{(ka)^2}.$$

Usando as formas assintóticas de j_l e n_l pode-se mostrar que a constante acima é igual a 1 e, então,

$$\Delta_l = ka \left[\frac{j_l j_l' + n_l n_l'}{j_l^2 + n_l^2} \right] \quad (\text{VI.2.18})$$

e

$$s_l = \frac{1}{ka} \left[\frac{1}{j_l^2 + n_l^2} \right]. \quad (\text{VI.2.19})$$

Assim, todos os parâmetros ξ_l , Δ_l e s_l são conhecidos porque são definidos em função de j_l , n_l e suas derivadas em $r = a$.

No caso $\beta_l \rightarrow \infty$ devemos ter $R_l(ka) = 0$ que significa termos uma esfera dura. Neste caso os phase shifts se reduzem a

$$e^{2i\delta_l} = e^{2i\xi_l} \Rightarrow \delta_l = \xi_l.$$

Como

$$e^{2i\xi_l} = -\frac{(j_l - in_l)}{j_l + in_l}$$

temos

$$\begin{aligned} \cos 2\delta_l + i \sin 2\delta_l &= \frac{(n_l^2 - j_l^2) + 2ij_l n_l}{j_l^2 + n_l^2} \\ &= \cos^2 \delta_l - \sin^2 \delta_l + 2i \sin \delta_l \cos \delta_l. \end{aligned}$$

Então,

$$\cos \delta_l = \frac{n_l}{\sqrt{j_l^2 + n_l^2}}$$

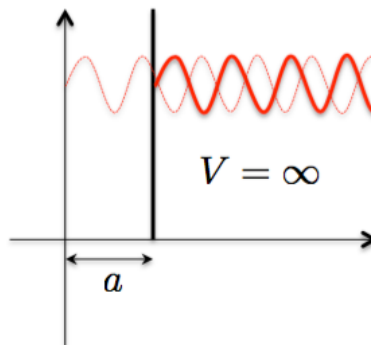
e

$$\sin \delta_l = \frac{j_l}{\sqrt{j_l^2 + n_l^2}}$$

$$\Rightarrow \cot \delta_l = \frac{n_l}{j_l}. \quad (\text{VI.2.20})$$

Quando $l = 0$ temos

$$\begin{aligned} \cot \delta_0 &= \frac{n_0}{j_0} \\ &= -\frac{\cos ka}{\sin ka} \\ &= -\cot ka \\ \Rightarrow \delta_0 &= -ka. \end{aligned}$$



Podemos ainda investigar o comportamento dos phase shifts para baixas energias no caso da esfera dura. Quando

$E \rightarrow 0$, $k \rightarrow 0$ e $ka \ll 1$, temos

$$\begin{aligned}
 n_l(ka) &\approx \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \\
 j_l(ka) &\approx \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} \\
 \Rightarrow \cot \delta_l &= \frac{n_l(ka)}{j_l(ka)} \\
 &\approx \frac{(2l-1)!! (2l+1)!!}{(ka)^{2l+1}} \\
 \Rightarrow \tan \delta_l &\approx \sin \delta_l \propto (ka)^{2l+1}.
 \end{aligned}$$

Como $\sigma = (4\pi/k^2) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$ vemos que a componente dominante para σ será $l=0$ (para baixas energias)

$$\Rightarrow \sigma = \frac{4\pi}{k^2} (ka)^2 = 4\pi a^2,$$

que é 4 vezes maior que a seção de choque clássica. Isto se deve ao fato do espalhamento ser em onda s para $E \rightarrow 0$.

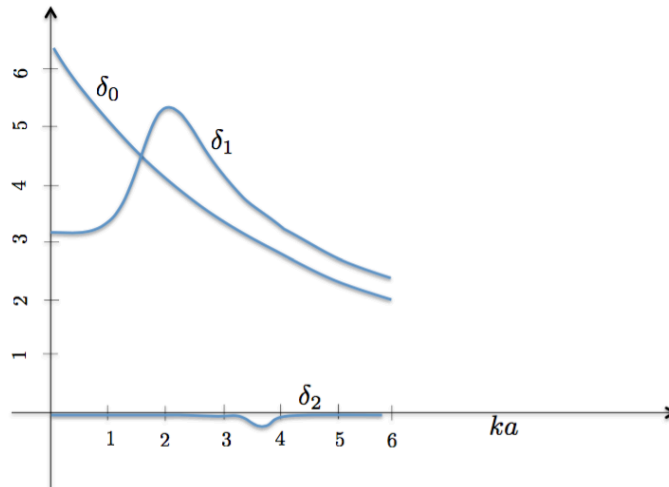
Vamos agora considerar o caso $V(r) = -V_0$. Então, $\hbar k' = \sqrt{2m(E+V_0)}$ e $\beta_l = (k'a)j'_l(k'a)/j_l(k'a)$. Quando $l=0$ podemos calcular ξ_0 , Δ_0 , s_0 e β_0 , que valem, respectivamente, $-ka$, -1 , ka , e $k'a \cot k'a - 1$. Então a amplitude de espalhamento em onda s é

$$\begin{aligned}
 f_0 &= \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \\
 &= \frac{e^{-2ika}}{k} \left(\frac{k}{k' \cot k'a - ik} - e^{ika} \sin ka \right).
 \end{aligned}$$

Quando $E \rightarrow 0$ temos $\sigma_0 \rightarrow 4\pi a^2 \left(\frac{\tan k'_0 a}{k'_0 a} - 1 \right)^2$ onde $k'_0 \equiv \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$.

Os phase shifts são determinados a menos de múltiplos de π . Podemos escolhê-los univocamente exigindo que $\delta_l(E) \rightarrow 0$ se $E \rightarrow \infty$.

Abaixo esboçamos o comportamento de δ_0 , δ_1 e δ_2 para uma cavidade da raio a e $ka' = 6.2$.



Como os parâmetros ξ_l , Δ_l e s_l referem-se à função de onda externa ao poço são certamente funções suaves da energia. Então, o comportamento de $\delta_1(E)$ acima deve-se ao fato de $\beta(E)$ variar bruscamente com a energia para

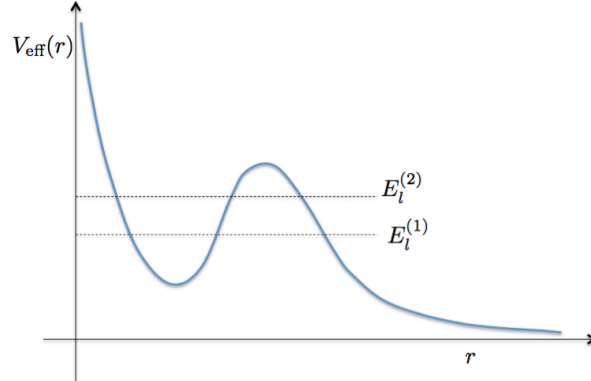
determinados valores de E . Como $\beta_l(E)$ é uma função monotonicamente decrescente da energia (consequência imediata da equação de Schrödinger) podemos aproximá-la por $\beta_l(E) = c_l^{(n)} + b_l^{(n)}E$ onde $b_l^{(n)} < 0$ nas regiões de variação rápida de β . Então,

$$\begin{aligned} e^{2i(\delta_l - \xi_l)} &= \frac{c_l^{(n)} + b_l^{(n)}E - \Delta_l + is_l}{c_l^{(n)} + b_l^{(n)}E - \Delta_l - is_l} \\ &= \frac{E - E_l^{(n)} - i(\Gamma_l^{(n)}/2)}{E - E_l^{(n)} + i(\Gamma_l^{(n)}/2)} \quad (\text{VI.2.21}) \end{aligned}$$

onde $E_l^{(n)} = (\Delta_l - c_l^{(n)})/b_l^{(n)}$ e $\Gamma_l^{(n)} \equiv -2s_l/b_l^{(n)}$

$$\Rightarrow \tan(\delta_l^{(n)} - \xi_l) = \frac{\Gamma_l^{(n)}}{2(E_l^{(n)} - E)} \quad (\text{VI.2.22})$$

As energias $E_l^{(n)}$ são as ressonâncias do problema e o índice n refere-se à possível existência de mais de uma ressonância para um dado l .

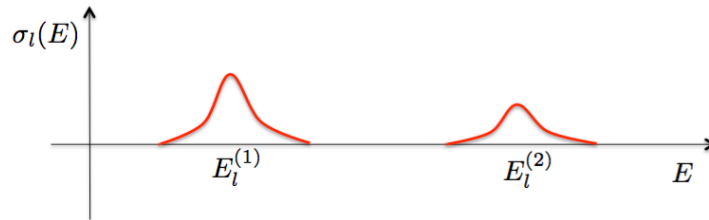


Então $\delta_l^{(n)}$ varia abruptamente em torno da n -ésima ressonância e a amplitude de espalhamento nesta vizinhança é dada, de acordo com (VI.2.9), (VI.2.17) e (VI.2.21), por

$$f_l^{(n)}(\theta) = \frac{2l+1}{k} e^{2i\xi_l} \left[\frac{\Gamma_l^{(n)}/2}{E_l^{(n)} - E - i(\Gamma_l^{(n)}/2)} + e^{-\xi_l} \sin \xi_l \right] P_l(\cos \theta). \quad (\text{VI.2.23})$$

Quando os ξ_l 's são desprezíveis (baixas energias ou $l \gg 1$) a (VI.2.23) juntamente com o teorema ótico (VI.2.11) nos fornecem a seção de choque total no canal l como

$$\begin{aligned} \sigma_l^{(n)} &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l^{(n)} \\ &= \frac{4\pi (2l+1)}{k^2} \frac{(\Gamma_l^{(n)})^2}{4(E - E_l^{(n)})^2 + (\Gamma_l^{(n)})^2}. \quad (\text{VI.2.24}) \end{aligned}$$



Este problema é análogo ao caso unidimensional. Se construirmos pacotes com $\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$ que levem em conta o comportamento ressonante em $f_k^{(n)}(\theta)$ teremos os mesmos casos que anteriormente:

- i) Atraso da função espalhada quando a ressonância é larga;
- ii) Decaimento exponencial da função espalhada quando a ressonância é estreita, com o tempo de vida $\hbar/\Gamma_l^{(n)} = \tau_l^{(n)}$, que é o caso aqui tratado.

Finalmente podemos ainda estudar as ressonâncias e estados ligados do nosso problema a partir do conhecimento da estrutura analítica da função $S(E) = e^{2i\delta_l(E)}$ (matriz de espalhamento). Os estados ligados são, como em 1-D, os polos de $S(E)$ ao longo do eixo real negativo (1ª superfície de Riemann) enquanto que as ressonâncias estão situadas na 2ª superfície de Riemann logo abaixo do eixo real.