

Física Atômica e Molecular (2009-2010)

dúvidas	qualquer dia	9h00-18h00 (gab D43)
entregar	quarta feira 9/12	(gab D43)
discussão	quarta feira 9/12	(sala D6)

22. A partícula livre:

- a** Para uma partícula livre, mostre que substituindo $z = kr$ na equação radial de Schrödinger, se obtém a equação diferencial seguinte

$$\left\{ -\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} - 1 \right\} u_\ell(z) = 0 \quad , \quad (1)$$

e comente os casos (i) $\ell = 0$, (ii) $z \gg 1$ e (iii) $z \ll 1$.

- b** A seguir, mostre que se $u_\ell(z)$ representa uma solução da equação (1) para o número quântico rotacional igual a ℓ , então

$$u_{\ell+1}(z) = \left\{ \frac{\ell+1}{z} - \frac{d}{dz} \right\} u_\ell(z)$$

representa uma solução para o número quântico rotacional igual a $\ell + 1$.

- c** Deduza a relação

$$u_{\ell+1}(z) = z^{\ell+2} \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right) \frac{u_\ell(z)}{z^{\ell+1}}$$

- d** A função esférica de Bessel é dada por

$$j_\ell(z) = z^\ell \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^\ell \frac{\sin(z)}{z}$$

Mostre que $u_\ell(z) = z j_\ell(z)$ representa uma solução da equação (1) para o número quântico rotacional igual a ℓ e comente os casos $z \gg 1$ e $z \ll 1$.

- e** A função esférica de Neumann é dada por

$$n_\ell(z) = -z^\ell \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^\ell \frac{\cos(z)}{z}$$

Mostre que $u_\ell(z) = z n_\ell(z)$ representa uma solução da equação (1) para o número quântico rotacional igual a ℓ e comente os casos $z \gg 1$ e $z \ll 1$.

- 23.** Considere o potencial seguinte (λ e b constantes)

$$V(r) = \lambda \delta(r - b) \quad (2)$$

e uma solução da equação de Schrödinger da forma $\frac{u(r)}{r} Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$

- a** Mostre que em $r = b$ para a função de onda se tem condições

$$u(r \uparrow b) = u(r \downarrow b)$$

e

$$\hbar^2 \left(\frac{du(r \downarrow b)}{dr} - \frac{d(r \uparrow b)}{dr} \right) = 2m\lambda u(b) \quad .$$

- b** Determine a função de onda, utilizando a seguinte definição da diferença de fase $\delta_\ell(E)$.

$$u(r > b) \propto j_\ell(kr) - i n_\ell(kr) + e^{2i\delta_\ell(E)} (j_\ell(kr) + i n_\ell(kr)) \quad .$$

- c** Determine a diferença de fase, $\delta_\ell(E)$, entre a função de onda ao infinito para $\lambda = 0$ e a função de onda ao infinito para $\lambda > 0$.
d Determine ainda $S = \exp(2i\delta_\ell(E))$ e $|S - 1|^2$.

- 24.** Considere o propagador $\mathcal{G}(r_2, r_1)$ que relaciona a função de onda $u(r_1)$ e a sua derivada $u'(r_1)$ na posição $r = r_1$ com a função de onda $u(r_2)$ e a sua derivada $u'(r_2)$ na posição $r = r_2 > r_1$ e que é dado por

$$\begin{pmatrix} u(r_2) \\ u'(r_2) \end{pmatrix} = \mathcal{G}(r_2, r_1) \begin{pmatrix} u(r_1) \\ u'(r_1) \end{pmatrix} \quad .$$

- a** Mostre as seguintes relações:

$$\mathcal{G}(r_1, r_1) = \mathbf{1} \quad , \quad \mathcal{G}(r_3, r_1) = \mathcal{G}(r_3, r_2) \mathcal{G}(r_2, r_1) \quad \text{e} \quad \mathcal{G}^{-1}(r_2, r_1) = \mathcal{G}(r_1, r_2) \quad .$$

- b** No caso em que o potencial é nulo e para $\ell = 0$ mostre que

$$\mathcal{G}(r_2, r_1) = \begin{pmatrix} \sin(kr_2) & -\frac{\cos(kr_2)}{k} \\ k \cos(kr_2) & \sin(kr_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin(kr_1) & \frac{\cos(kr_1)}{k} \\ -k \cos(kr_1) & \sin(kr_1) \end{pmatrix} \quad .$$

- c** No caso em que o potencial é dado por $V(r) = \lambda \delta(r - b)$ (problema 23), mostre que

$$\begin{pmatrix} u(r \downarrow b) \\ u'(r \downarrow b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \lambda & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(r \uparrow b) \\ u'(r \uparrow b) \end{pmatrix} \quad .$$

25. Considere a expressão seguinte

$$\psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{m}{2\pi} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r}') \quad ,$$

em que $V(\vec{r}) = 0$ para $r > a$.

a No caso em que $r \gg a$ mostre que $\psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r})$ toma a forma

$$\psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}, \hat{r}) \right) \quad (r \text{ grande})$$

com

$$f(\vec{k}, \hat{r}) = -\sqrt{2\pi} m \int d^3r' e^{-ik\hat{r} \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r}') \quad \text{e} \quad k = |\vec{k}| \quad .$$

b Para uma distribuição $\varphi(\vec{k})$ que apenas não é nula para $\vec{k} \approx k_0 \hat{z}$ e um pacote de ondas $\psi(\vec{r}, t)$ que no instante $t = 0$ apenas não é nula para $\vec{r} \approx -r_0 \hat{z}$, mostre que (repare que $\hat{k}_0$ é igual a $\hat{z}$)

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \varphi(\vec{k}) \exp \left\{ i\vec{k} \cdot (\hat{k}_0 |\vec{r}-\vec{r}'| - \vec{r}_0) \right\} = \psi(\hat{k}_0 |\vec{r}-\vec{r}'|, 0) = 0 \quad .$$

c Mostre ainda que a função de onda dada por

$$\psi(\vec{r}, 0) = \int d^3k \varphi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r}) \quad ,$$

é aproximadamente igual a

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \varphi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad .$$