Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 6, n. 2, 2018.

Trabalho apresentado no XXXVIII CNMAC, Campinas - SP, 2018.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Espalhamento Quântico em Superfícies Não Regulares

Felipe Felix Souto[1]
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, Campinas, SP

O objetivo deste trabalho é estudar o espalhamento quântico em superfícies não regulares, como o cone "colado no plano", através da suavização dos vincos e da aplicação do problema de Sturm-Liouville Multi-Intervalos. Buscamos, assim, comparar estas duas formas, isto é, determinar se a condição de contorno usada na suavização é auto-adjunta de acordo com a teoria de Sturm-Liouville e, caso seja, se é única.

A propagação de partículas livres em uma superfície regular S pode ser interpretada de duas maneiras distintas seguindo o formalismo da mecânica quântica. A primeira, obtida através de uma forte intuição física, consiste na resolução da equação de Schrödinger em $\mathbb{R}^3$ sujeita a um forte potencial atrativo muito próximo à superfície S em questão. Neste caso, segundo [4], surge um potencial geométrico que depende das curvaturas média e Gaussiana da superfície. Desta forma a equação de Schrödinger se torna:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB}\Psi + V_g\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \tag{1}$$

onde Δ_{LB} é o operador de Laplace-Beltrami definido na superfície e V_g representa o potencial geométrico. A segunda consiste na resolução da equação de Schrödinger adaptada à superfície:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \tag{2}$$

Neste caso, potenciais surgirão naturalmente devido à utilização de Δ_{LB}, mas não há a contribuição de nenhum potencial geométrico. É como se a onda não enxergasse uma terceira dimensão, como ocorre no primeiro caso. O formalismo correto ainda é motivo de discussão (o potencial geométrico é difícil de ser detectado, pois é da ordem de $\hbar^2$).

Quando introduzimos algum tipo de descontinuidade através de vincos que conectam duas superfícies, como o cone colado no plano, o primeiro formalismo perde o sentido. Neste caso, o potencial geométrico se torna intratável matematicamente. Surgem potenciais não distribucionais e, consequentemente, estados ligados de energia infinita. Entretanto, no segundo formalismo podemos regularizar as descontinuidades do vinco, encontrando assim potenciais distribucionais. Estes nos levam à introdução de condições de contorno nos vincos (condições de colagem da função de onda).

Motivados pela discussão acima, procuramos neste trabalho encontrar observáveis físicos, como por exemplo a seção de choque de espalhamento em superfícies não regulares seguindo o segundo formalismo [1, 5]. Notamos que podemos olhar os vincos não

[1]felipe_ felix_ souto@hotmail.com

apenas de uma maneira regularizada, como discutido acima, mas também como colagem descontínuas de superfícies. Neste último caso, condições de contorno arbitrárias nos vincos se tornam possíveis e, como queremos uma evolução unitária, devemos impor condições que tornam o problema auto-adjunto. Devido à simetria de rotação, devemos colar os intervalos radiais - no cone colado no plano devemos colar o intervalo radial $(0, r_0)$, onde r_0 representa o raio do cone (vinco), com o intervalo (r_0, ∞), representando o restante do plano. Desta forma nos utilizaremos da teoria de Sturm-Liouville Multi-Intervalos, desenvolvida em [3]. Esta teoria nos diz que existem condições de contorno adequadas em r_0, parametrizadas por uma matriz de posto 2 que tornam o problema auto-adjunto.

Ao analisarmos ambos os métodos, a ideia é compará-los e determinar se há alguma relação entre eles. Por exemplo, já observamos que a suavização determina uma condição auto-adjunta em Sturm-Liouville, o que nos leva a crer que existe uma condição de contorno mais física que todas as outras.

Por fim, determinada a solução, a intenção é estudar o espalhamento nessas superfícies. De certa forma, estamos interessados em "o quanto da superfícies a onda vai enxergar". De acordo com [1], o espalhamento em uma região assintoticamente plana (solução) respeita:

$$\Psi(r,\theta) \to e^{i\,k\,r\,\cos(\theta)} + \sqrt{\frac{i}{k}}\, f_k(\theta) \left(\frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}\right), \text{ quando } r \to \infty,$$

onde a primeira parcela do lado direito da equação representa uma onda plana.

Com esse comportamento assintótico e a solução dada pelos métodos anteriores, será possível determinar as constantes que determinam o espalhamento e que são necessários para o cálculo da seção de choque total. Com a seção de choque total em mãos, analisaremos se as análises feitas anteriormente fazem sentido fisicamente.

O espalhamento quântico no cone foi estudado em [2]. Entretanto, por se tratar de um espaço assintoticamente distinto do plano euclidiano, uma redefinição de ondas planas se torna necessária, algo de certa forma artificial. Neste trabalho, entretanto, estudamos ondas em um espaço assintoticamente Euclidiano, de forma que a influência do cone no espalhamento pode ser vista de maneira mais natural.

Referências

[1] S. K. Adhikari, Quantum Scattering in Two Dimensions, *Am. J. Phys.* ***54***, 362 (1986).

[2] V. S. Barroso e J. P. M. Pitelli, Quantum Scattering on a Cone Revisited, *Phys. Rev. D* ***96***, 025006 (2017).

[3] X. Cao, Z. Wang e H. Wu, On the Boundary Conditions in Self-Adjoint Multi-Interval Sturm-Liouville Problems, *Linear Algebra Appl.* ***430***, 2877 - 2889 (2009).

[4] R. C. T. da Costa, Quantum Mechanics of a Constrained Particle, *Phys. Rev. A* ***23***, 1982 - 1987 (1981).

[5] I. R. Lapidus, Quantum Mechanical Scattering in Two Dimensions, *Am. J. Phys.* ***50***, 45 (1982).