

MATRIZ S DE UM ESPALHAMENTO POR POTENCIAL COMPLEXO

TESE DE MESTRADO

defendida por:

SERGIO JOFFILY

no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Orientador: José Leite Lopes

em 5 de Junho de 1970

perante a banca integrada pelos senhores professores:

Francisco Mendes de Oliveira Castro

Leopoldo Nachbin

Colber Gonçalves de Oliveira

Prem Prakash Srivastava

Luiz Carlos Gomes

ERRATA

<u>Página</u>	<u>Linha</u>	<u>Ondê se lê</u>	<u>Leia-se</u>
		Z	Z^ℓ
8	3 ^a de cima p/baixo	$(2\ell+1)!!$	$(2\ell+1)!!$
16	5 ^a de baixo p/cima	de 0 a r	de 0 a r ₀
16	fórmula (3.7)	$ u(k, r_0) ^2$	$ u(k, r) ^2$
22	fórmula (4.7a)	$\varphi_{in}(r_0, t)$	$\varphi_{in}(r_0, t')$
22	6 ^a de cima p/baixo	anteriores	posteriores
26	8 ^a de baixo p/cima	$[V(r)-V^*(r)]$	$[V^*(r)-V(r)]$
35	fórmula (6.16)	$S_\ell^*(k, V) = \frac{1}{S_\ell(k^*, V^*)}$	$S_\ell^*(k^*, V^*) = \frac{1}{S_\ell(k, V)}$
35	8 ^a de cima p/baixo	k em -k* e V em V*	k em -k
39	3 ^a de baixo p/cima	$V_1(r) - iV_2(r)$	$V_1(r) + iV_2(r)$
50	3 ^a de baixo p/cima	$k_2 > 0$	$k_2 < 0$
51	4 ^a de cima p/baixo	$k_1 < 0$	$k_1 > 0$
72	5 ^a de baixo p/cima	$u_\ell^2(k, \zeta)$	$u_\ell^0(k, \zeta)$
72	4 ^a de baixo p/cima	$u_\ell^2(k, \zeta)$	$u_\ell^0(k, \zeta)$

AGRADECIMENTOS

Esta tese foi realizada sob a orientação do Professor J. LEITE , LOPES. Agradeço a êle a sugestão do trabalho, bem como os ensinamentos que me transmitiu durante os dois anos de convívio neste Centro.

À CAPES/FORD e ao C.B.P.F., que financeiramente permitiram a realização deste trabalho, os meus agradecimentos.

* * *

ÍNDICE

	<u>Página</u>
<u>INTRODUÇÃO</u>	3
 <u>CAPÍTULO I</u>	
1. Espalhamento por potencial central	5
2. Potenciais Complexos. Deslocamento de Fase complexos e Energias Complexas	10
3. Propriedades de $S_l(k)$	14
4. Analiticidade e Causalidade	19
 <u>CAPÍTULO II</u>	
5. Definição e Analiticidade da Matriz S de um espalhamento por potenciais complexos	24
6. Relações de simetria para a Matriz S de um espalhamento por potenciais complexos	31
7. Unitariedade e Causalidade	36
 <u>CAPÍTULO III</u>	
8. Cálculo dos polos de S(k) de um espalhamento por um poço de potencial complexo	39
9. Polologia	48
 <u>CAPÍTULO IV</u>	
10. Conclusões	52
 <u>APÊNDICE A</u>	
Determinação das raízes da equação (8.10)	55
 <u>APÊNDICE B</u>	
Programa Fortran	57
 <u>APÊNDICE C</u>	
Derivação das equações assintóticas (8.20) e (8.21)	64
 <u>APÊNDICE D</u>	
Analiticidade das funções $u_l(k,r)$ e $u_l(k,r)$	70
 <u>REFERÊNCIAS</u>	 84

INTRODUÇÃO:

A matriz S (matriz de espalhamento) pode em geral ser conceituada como um operador que transforma as ondas vindas do in finito em ondas que se propagam para o infinito. Nos últimos trinta anos a teoria da matriz S tem sido muito aplicada no tratamento de processos de colisão tanto em física nuclear como na teoria dos campos.

Originalmente foi introduzida no estudo de reações nucleares por J. A. Wheeler ¹. Com a idéia de Heisenberg ² de formular a teoria quântica sem a hamiltoniana, a teoria da matriz S passou a ser assunto de grande interesse nas investigações de física teórica. A importância do uso da matriz S, segundo a idéia de Heisenberg, é descrever todos os resultados experimentais de um problema de colisão, sem fazer uso da função de onda da mecânica quântica usual. As suas propriedades seriam derivadas a partir dos princípios gerais que devem satisfazer a interação, como causalidade, unitariedade e Lorentz invariante.

O estudo das propriedades analíticas da matriz de espalhamento, tem como principal objetivo determinar e interpretar suas singularidades no plano complexo das energias ou no plano complexo dos momenta.

O problema mais simples com generalidade suficiente para ilustrar várias das propriedades da matriz S, é o espalhamento de duas partículas não relativísticas se interagindo através de um potencial fixo V. Baseando-se num problema deste tipo, surgiram vários trabalhos ³ com o objetivo de testar a validade das idéias sobre os polos da matriz S. Surgiu também a preocupação de se determinar todos os polos da matriz de espalhamento para problemas específicos, potencial do tipo poço e barreira ⁴, potencial de longo alcance ⁵, potencial dependente de velocidade ⁶.

Neste trabalho temos como principal objetivo determinar os polos da matriz S para um poço de potencial complexo. Fazendo em seguida uma comparação com os resultados obtidos por Nussenzveig⁴ para um poço real, que obtemos como o caso limite quando a parte imaginária do potencial tende a zero.

No primeiro capítulo, que é dividido em quatro seções simplesmente para facilitar a exposição, fez-se uma rápida e simples apresentação da teoria da matriz de espalhamento não relativístico, com o objetivo de situar o nosso problema e definir as grandezas que serão usadas no decorrer deste trabalho. No capítulo II, obteve-se uma expressão algébrica para a matriz de espalhamento por um potencial complexo e de alcance finito. Seria ela uma função meromórfica? A sua analiticidade ainda satisfaz o requerimento de Kronig? Seriam válidas ainda as relações de simetria usuais para o caso de potenciais reais? Como poderíamos generalizar estas relações? São estas, as questões que regredemos nas seções 5, 6 e 7 deste capítulo. No capítulo III calculamos os polos da matriz S de um espalhamento por um poço de potencial complexo, para o caso da onda $s(\ell=0)$, e discutimos o seu deslocamento no plano complexo dos momenta, que são mostrados nas figuras 2, 3 e 4.

Com isto, estamos então, verificando as propriedades da matriz S para mais um modelo simples, que se distingue dos anteriores pela possibilidade de incluir processos de aniquilação.

* * *

CAPÍTULO I

1. ESPALHAMENTO POR UM POTENCIAL

Inicialmente faremos uma rápida revisão da teoria elementar do espalhamento por um potencial esféricamente simétrico, ⁷ visando definir e conceituar algumas grandezas que serão tratadas no decorrer deste trabalho.

O espalhamento não relativístico de duas partículas de massa m_1 e m_2 pode ser descrito pela equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{x}, t) + V(r) \Psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{x}, t) \quad (1.1)$$

onde, $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ e $r = |\vec{x}|$, $V(r)$ é o potencial que representa a interação entre as duas partículas, que admitimos ser esféricamente simétrico.

^{soluções}
A equação (1.1), uma vez que o potencial não depende do tempo, pode ser escrita como:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (1.2)$$

onde $\psi(\vec{x})$ satisfaz a equação de Schrödinger para estados estacionários:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}) + V(r) \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}) \quad (1.3)$$

No problema do espalhamento impõe-se, unicamente pela física do problema, que as soluções da equação (1.3), para distância r muito grande, seja uma superposição de ondas incidentes e on-

das emergentes. As ondas incidentes (que por simplicidade consideramos como ondas planas propagando-se na direção de \underline{z}) correspondem às partículas incidentes sobre o potencial. As ondas emergentes (ondas esféricas) correspondem às partículas espalhadas pelo potencial. Com esta formulação se impõe à solução da equação (1.3) a seguinte condição:

$$\Psi(\vec{x}) = \psi(r, \theta, \varphi) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.4)$$

A função $f(\theta)$ (a simetria esférica impõe $f(\theta, \varphi) = f(\theta)$) é usualmente chamada de amplitude de espalhamento, e está relacionada com a seção de choque diferencial por:

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

que representa o número de partículas espalhadas na direção $\underline{\theta}$ por elemento de ângulo sólido $d\Omega$, sendo $\underline{\theta}$ o ângulo entre a direção de observação e a direção incidente. O problema de espalhamento se resume, então, em determinar a amplitude de espalhamento, $f(\theta)$.

Separando a parte angular e radial da equação (1.3):

$$\Psi(\vec{x}) = \psi(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell} \frac{1}{kr} u_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta) \quad (1.5)$$

onde $P_{\ell}(\cos \theta)$ são os polinômios de Legendre, o fator $(kr)^{-1}$ é introduzido por conveniência, as funções $u_{\ell}(k, r)$ obedecem a equação de Schrödinger radial:

$$u_{\ell}''(k, r) + \left[k^2 - U(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u_{\ell}(k, r) = 0 \quad (1.6)$$

onde, $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e $U(r) = 2mV(r)/\hbar^2$.

Como $\psi(\vec{x})$ deve ser finita (1.5) requer a condição de contorno, $u_l(k,0) = 0$, para as soluções de (1.6). Admitindo que a interação seja de alcance finito, i.é, $V(r) = 0$ para $r \geq r_0$, a função radial, $\tilde{u}_l^0(k,r)$, fora do alcance do potencial satisfaz a equação:

$$u_l^0(k,r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l^0(k,r) = 0 \quad (1.7)$$

que admite como solução as funções $krj_l(kr)$, $kr\eta_l(kr)$ e $krh_l(kr)$. onde $j_l(kr)$ é a função de Bessel esférica $\eta_l(kr)$ a função de Neuman esférica e $h_l(kr)$ a função de Hankel esférica, que são definidas ⁸, respectivamente como:

$$j_l(Z) = \left(\frac{\pi}{2Z} \right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(Z)$$

$$\eta_l(Z) = (-1)^{l+1} \left(\frac{\pi}{2Z} \right)^{\frac{1}{2}} J_{-\ell - \frac{1}{2}}(Z)$$

e

$$h_l^{(1,2)}(Z) = j_l(Z) \pm i\eta_l(Z)$$

sendo $h_l^{(1)}(Z)$ a função de Hankel esférica de 1^a espécie e $h_l^{(2)}(Z)$ a função de Hankel esférica de 2^a espécie.

Estas funções apresentam os seguintes comportamentos assintóticos:

$$j_l(Z) \xrightarrow{Z \rightarrow \infty} \frac{1}{Z} \sin \left(Z - \frac{l\pi}{2} \right)$$

$$\eta_l(Z) \xrightarrow{Z \rightarrow \infty} -\frac{1}{Z} \cos \left(Z - \frac{l\pi}{2} \right)$$

e

$$h_{\ell}^{(1,2)}(Z) \xrightarrow{Z \rightarrow \infty} \frac{1}{Z} \exp \left[\pm i \left(Z - \frac{\ell\pi}{2} \right) \right].$$

O comportamento na origem é:

$$j_{\ell}(Z) \xrightarrow{Z \rightarrow 0} \frac{Z}{(2\ell+1)!}.$$

e

$$y_{\ell}(Z) \xrightarrow{Z \rightarrow 0} - (2\ell+1)! \left(\frac{1}{Z} \right)^{\ell+1}$$

A solução assintótica de (1.6), considerando o comportamento das possíveis soluções (funções esféricas de Bessel à menos do fator kr) no infinito e na origem é dado por:

$$u_{\ell}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin \left[kr - \frac{1}{2} \ell\pi + \delta_{\ell}(k) \right] \quad (1.8)$$

onde, $\delta_{\ell}(k)$ (deslocamento de fase) representa um deslocamento da fase da solução assintótica de (1.6), contendo um potencial, em relação à fase da solução assintótica de (1.6) para uma partícula livre. O único efeito do espalhador, $V(r)$, é deslocar a fase da função de onda assintótica relativa à sua fase na ausência da interação.

De (1.8) e (1.5), tem-se

$$\psi(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell} \frac{1}{kr} \sin \left[kr - \frac{1}{2} \ell\pi + \delta_{\ell}(k) \right] P_{\ell}(\cos \theta) \quad (1.9)$$

considerando (1.9), (1.4) e a equação assintótica para a onda plana escrita em termo de componente de ondas esféricas:

$$e^{ikZ} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right)$$

obtem-se, para $f(\theta)$:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) P_{\ell}(\cos \theta) \quad (1.10)$$

e para os coeficientes C_{ℓ} :

$$C_{\ell} = (2\ell+1) i^{\ell} e^{i\delta_{\ell}} \quad (1.11)$$

A equação (1.10) é a expressão usual da amplitude de espalhamento, que depende apenas do deslocamento de fase $\delta_{\ell}(k)$. Todo efeito do espalhamento é descrito em termos de um conjunto infinito de deslocamento de fase.

Usualmente, define-se a matriz S do espalhamento por:

$$S_{\ell}(k) = e^{2i\delta_{\ell}(k)} \quad (1.12)$$

De (1.11), (1.12) e (1.9), podemos escrever a função de onda assintótica, como:

$$\psi(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} P_{\ell}(\cos \theta) (2\ell+1) \left\{ S_{\ell}(k) e^{ikr} - (-1)^{\ell} e^{-ikr} \right\} \quad (1.13)$$

logo, para cada componente de onda, a matriz S é dada pela razão entre a amplitude da onda emergente e a amplitude da onda incidente.

A seção de choque total, para o espalhamento é:

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (1.14)$$

substituindo (1.10) em (1.14), os termos cruzados do quadrado de $|f(\theta)|$ se anulam devido à ortogonalidade dos polinômios de Legendre, obtém-se:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}(k) \quad (1.15)$$

ou

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) |S_{\ell}(k) - 1|^2 \quad (1.16)$$

2. POTENCIAIS, ENERGIAS E DESLOCAMENTOS DE FASE COMPLEXOS

Nesta secção veremos como a análise do espalhamento pelo estudo das ondas parciais (secção 1) poderá ser extendido para incluir a possibilidade de absorção das partículas incidentes pelo centro espalhador.

De (1.13), vimos que a onda parcial esférica emergente tem a fase deslocada em relação à fase da onda incidente. No espalhamento elástico os deslocamentos de fase $\delta_{\ell}(k)$ são quantidades reais, conseqüentemente o fator $e^{2i\delta_{\ell}}$, i.é, a função $S_{\ell}(k)$ (eq. 1.12) tem módulo unitário; o que acarreta que a intensidade da onda emergente é igual à intensidade da onda incidente. Não existindo então nenhuma absorção. Para descrever um processo de absorção assumimos que o fator complexo, $e^{2i\delta_{\ell}}$, (a matriz S) que multiplica a onda emergente (eq. 1.13) tenha módulo inferior à unidade. O que se obtém considerando o deslocamento de fase $\delta_{\ell}(k)$ como uma quantidade complexa,

$$\delta_{\ell}(k) = \eta_{\ell}(k) + i\gamma_{\ell}(k) \quad (2.1)$$

onde, $\eta_{\ell}(k)$ e $\gamma_{\ell}(k)$ são funções reais de k . $\gamma_{\ell}(k)$ descreve a absorção de partículas pelo centro espalhador.

A secção de choque para o espalhamento elástico ainda se escreve como em (1.16), que coincide com (1.15) para $\gamma_{\ell}(k) = 0$.

A seção de choque σ_a , para processos não elásticos, será determinada como segue: O número de partículas absorvidas pelo centro espalhador é igual, por unidade de tempo, ao fluxo total recebido pelo centro espalhador, que é dado por:

$$\Phi_a = \frac{i\hbar}{2m} \int_s \left(\psi_l \frac{\partial \psi_l^*}{\partial r} - \frac{\partial \psi_l}{\partial r} \psi_l^* \right) ds \quad (2.2)$$

onde s é uma superfície que envolve o centro espalhador e ψ_l é dado por (1.13). Integrando (2.2), obtém-se:

$$\Phi_a = \frac{\pi\hbar}{mk} (2l+1)(1-|S_l|^2) \quad (2.3)$$

A seção de choque parcial (para cada componente l) de absorção $\sigma_{a,l}$ é igual à Φ_a/Φ_0 , onde Φ_0 é o fluxo da onda plana incidente,

$$\Phi_0 = \frac{\hbar k}{m} \quad (2.4)$$

logo, de (2.3) e (2.4), obtém-se a seção de choque de absorção:

$$\sigma_a = \sum_l \sigma_{a,l} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1)(1-|S_l|^2) \quad (2.5)$$

A seção de choque total, para todos os processos será igual à:

$$\sigma_T = \sigma_a + \sigma_{sc} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - \text{Re } S_l) \quad (2.6)$$

usando-se (2.1) em (1.16), (2.5) e (2.6), obtém-se respectivamente:

$$\sigma_{sc} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) e^{-2\eta_l} \{ \cosh 2\eta_l - \cos 2\gamma_l \} \quad (2.8)$$

$$\sigma_a = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) e^{-2\eta_l} \sinh 2\gamma_l \quad (2.9)$$

$$\sigma_{\text{T}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_L (2l+1) (1 - e^{-2\gamma_l} \cos 2\eta_l) \quad (2.10)$$

de (2.9), vemos que $\sigma_{a,l}$ é máxima quando $\gamma_l = \infty$. Como a seção de choque, é sempre positiva; temos de (2.9) que $\gamma_l > 0$.

Isto justifica a introdução de deslocamentos de fase complexos para descrever um espalhamento não elástico. Fenomenologicamente um deslocamento de fase complexo é equivalente à introdução de um potencial complexo, $V(r) = V_1(r) + iV_2(r)$, para descrever as interações inelásticas. Quando usamos esta representação para um modelo nuclear teremos o chamado modelo ótico^{9,10}.

Seja o espalhamento de uma partícula por um potencial complexo de forma:

$$V(\vec{r}) = V_1(\vec{r}) + i V_2(\vec{r}) \quad (2.11)$$

onde $V_1(\vec{r})$ e $V_2(\vec{r})$ são funções reais de \vec{r} .

A equação de Schrödinger para este potencial se escreve:

$$H\psi(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r},t) \quad (2.12)$$

onde,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

Como $V(\vec{r})$ independe do tempo, tem-se: $\frac{iE}{\hbar} t$

$$\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r}) e^{-\frac{iE}{\hbar} t} \quad (2.13)$$

da equação (2.12), obtém-se:

$$H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \quad (2.12a)$$

Como H não é hermitiano os auto-valores correspondentes, E , não serão mais necessariamente números reais. Considerando E como

uma quantidade complexa,

$$E = E_1 - i E_2 \quad (2.14)$$

onde E_1 e E_2 são reais positivos, então de (2.14) e (2.13), obtem-se:

$$\int \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d\tau = \exp(-2E_2 t/\hbar) \int \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\tau \quad (2.15)$$

Logo, a probabilidade de se encontrar a partícula no interior de um volume Ω decresce exponencialmente no tempo, exatamente como ocorre num decaimento radioativo - a introdução de energias complexas na mecânica quântica, foi feita pela primeira vez por G. Gamow ¹¹ para descrever o decaimento α -. Para representar um decaimento, toma-se em (2.14) $E_2 > 0$.

Chamando λ à constante de decaimento de um processo definida como sendo a probabilidade por unidade de tempo de um núcleo desintegrar, teremos de (2.15):

$$\lambda = \frac{2E_2}{\hbar} \quad (2.16)$$

Equação de continuidade

Da equação (2.12) e sua complexa conjugada:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, t) + V^*(\vec{r}) \psi^*(\vec{r}, t) \quad (2.17)$$

multiplicando-se (2.12) por ψ^* e (2.17) por ψ e subtraindo uma da outra obtem-se:

$$\frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] = \frac{2}{\hbar} V_2(\vec{r}) \psi \psi^* \quad (2.18)$$

Chamando, como usualmente, $\rho(\vec{r}, t) = \psi \psi^*$, a densidade de probabilidade e $\vec{j}(\vec{r}, t)$ o vetor corrente de probabilidade, sendo:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar i}{2m} [\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi] \quad (2.19)$$

podemos escrever:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \text{div } \vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{2}{\hbar} V_2(\vec{r}) \rho(\vec{r}, t) \quad (2.20)$$

O potencial complexo na equação de Schrödinger acarreta a não conservação da densidade de probabilidade. O lado direito da (eq. 2.20) determina a razão da variação de partículas por unidade de volume e por unidade de tempo, do feixe incidente. Logo o termo diferente de zero do segundo membro de (2.20) descreve uma absorção ($V_2(\vec{r}) < 0$) ou emissão ($V_2(\vec{r}) > 0$) de partículas.

3. PROPRIEDADES DE $S_{\ell}(k)$ 15

Nesta seção discutiremos apenas o caso da onda s ($\ell = 0$), uma vez que o método é facilmente generalizado para outros valores de momento angular. Na seção 5 ao tratarmos o problema com potenciais complexos faremos a generalização para qualquer l.

Para uma partícula sujeita a um espalhamento por um potencial central $V(r)$, sendo $V(r)$ real, poderemos obter a matriz S para onda s , $S(k)$, a partir da equação de Schrödinger independente do tempo:

$$u''(k,r) + [k^2 - V(r)] u(k,r) = 0 \quad (3.1)$$

onde k é o momentum do centro de massa e $V(r)$ é o potencial reduzido. Consideraremos apenas, bem como em todo o desenvolvimento dêsse trabalho, potenciais de alcance finito:

$$V(r) = V(r) \theta(r-r_0) \quad (3.2)$$

onde

$$\theta(r-r_0) = \begin{cases} 1 & \text{para } r < r_0 \\ 0 & \text{para } r \geq r_0 \end{cases}$$

Logo a função de onda externa ($r > r_0$), solução da equação (3.1), a menos de um fator de normalização será:

$$e^{-ikr} - S(k) e^{ikr}, \quad (3.3)$$

a função $S(k)$ está relacionada com o deslocamento de fase pela equação (1.12). Para se obter a expressão de $S(k)$, solda-se a derivada logarítma da função de onda interna ($r < r_0$) com a derivada logarítma da função de onda externa ($r > r_0$) no ponto $r = r_0$ (descontinuidade do potencial). Então, obtem-se ¹² (cf. eq. 8.3):

$$S(k) = \frac{u'(k,r_0) + ik u(k,r_0)}{u'(k,r_0) - ik u(k,r_0)} \cdot e^{-2ikr_0} \quad (3.4)$$

onde $u(k,r)$ é a solução regular da equação de Schrödinger (3.1). Como a dependência em k de (3.1) é da forma k^2 e o potencial é real, se pode derivar ¹² as seguintes propriedades de simetria para a Matriz S :

$$S(k) S(-k) = 1 \quad (3.5)$$

$$S(k) = S^*(-k^*) \quad (3.6)$$

Estas duas relações de simetria asseguram que para k real, $S(k)$ é de módulo unitário, i. é., $|S(k)|^2 = 1$, consequentemente

por (1.12) o deslocamento de fase, $\delta_\rho(k)$, é real.

As propriedades analíticas de $S(k)$, advêm do fato que k funciona como um parâmetro na equação (3.1) e de acôrdo com um teorema de H. Poincaré^{13, 14}, que diz: " $u(k, r_0)$ e $u'(k, r_0)$, para r_0 fixo serão funções inteiras de k , desde que as condições de contôrno na origem possam ser mantidas fixas independentemente de k ". Impõe-se as condições de contôrno, $u(k, 0) = 0$ e $u'(k, 0) = 1$, para as soluções da equação (3.1). Então pelo teorema acima $u(k, r_0)$ e $u'(k, r_0)$ são funções analíticas em todo o plano complexo k . Consequentemente a função $S(k)$, eq. (3.4) é uma razão entre duas funções inteiras, ou seja, uma função meromórfica de k em todo o plano complexo k .

Então a função $S(k)$ possui polos correspondentes aos zeros do denominador da equação (3.4), que são polos simples no plano complexo dos momenta¹².

Combinando a equação (3.1) com sua complexa conjugada e manipulando com ambas a fim de eliminar o térmo do potencial (cf. seção 5) e integrando de 0 a r , levando em conta $u(k, 0) = 0$, encontra-se:

$$u^*u' - u' * u \Big|_{r=r_0} + (k^2 - k^{*2}) \int_0^{r_0} |u(k, r_0)|^2 dr = 0 \quad (3.7)$$

equação que ainda pode ser escrita na forma¹²:

$$|u' - ik u|_{r_0}^2 = |u' + i m k u|_{r_0}^2 + (\text{Re } k)^2 |u|_{r_0}^2 + (\text{Re } k)^2 \text{Im } k \int_0^{r_0} |u(k, r)|^2 dr \quad (3.8)$$

Pela análise de (3.8), temos que, para $\text{Im}k \gg 0$ o denominador de (3.4) não pode ser nulo a menos que $\text{Re}k = 0$. Consequentemente só poderão existir polos de $S(k)$, no semi plano superior, sôbre o eixo imaginário. Das propriedades (3.5) e (3.6) conclui-se que os polos de $S(k)$ são simétricos em relação ao eixo imaginário, e que zeros no 1º ou 2º quadrante corresponde a polos no 3º ou 4º quadrante. respectivamente, e reciprocamente. Como não existem polos no semi plano superior então pelas propriedades de simetria não devem existir zeros para $S(k)$ no semi plano inferior, exceto sôbre o eixo imaginário.

Os polos situados no eixo imaginário positivo, $k = iK_n$ ($K_n > 0$) correspondem a estados ligados com energia $E_n = -\frac{\hbar^2 K_n^2}{2m}$, m sendo a massa reduzida da partícula, uma vez que função de onda externa possui um comportamento assintótico predominante pelo fator $\exp(-Kr)$, característica da função de onda de um estado ligado.

Polos situados no eixo imaginário negativo, apesar de determinarem energias negativas, não correspondem a estados ligados uma vez que a função de onda correspondente terá um comportamento assintótico predominante pelo fator $\exp(kr)$, que diverge no infinito. Devido a êste comportamento puramente crescente da exponencial Nussenzveig⁴ chamou estes níveis de anti-níveis e aos polos associados de anti-polos. Estes polos são também chamados na literatura de polos virtuais¹⁵ e são interpretados como correspondendo a níveis virtuais^{4, 16}.

Os polos localizados no semi-plano inferior do plano comple

xo dos momenta, (fora do eixo imaginário) não têm uma interpretação simples ⁴. Apenas na situação particular onde o polo está muito próximo do eixo real, ou mais precisamente, quando $\text{Im } k \ll \frac{1}{r_0}$, obtém-se ¹⁵, levando em conta (3.8), a seguinte desigualdade para a função de onda:

$$|u|_{r_0}^2 \ll \frac{1}{r_0} \int_0^{r_0} |u(k,r)|^2 dr \quad (3.9)$$

Apesar da função de onda externa divergir exponencialmente no infinito, ela é muito menor do que a função de onda interna nas vizinhanças do raio de interação ($r \approx r_0$), que é uma característica de um estado de decaimento ou ressonância. Se o polo é muito afastado do eixo real este argumento deixa de ser válido. ²⁷

Para finalizar, ressaltamos que, a matriz S tem uma singularidade essencial no semi-plano superior para $\text{Im } k' \rightarrow \infty$, devido ao fator e^{-2ikr_0} em (3,4), e tem infinitos polos no semiplano inferior ⁴, ¹². O deslocamento destes polos no plano complexo dos momenta $\beta = kr_0$ em função do potencial está mostrado na fig. 1. Nussenzveig ⁴ introduziu a seguinte abreviação (que usaremos aqui) para descrever os polos:

- a - polos (a = anti), para polos com $\text{Re}(\beta) = 0$ e $\text{Im}(\beta) < 0$
- b - polos (b = bound), para polos com $\text{Re}(\beta) = 0$ e $\text{Im}(\beta) > 0$
- c - polos (c = complex), para polos com $\text{Re}(\beta) \neq 0$ e $\text{Im}(\beta) \neq 0$.

4. ANALITICIDADE E CAUSALIDADE

Fazendo uma analogia do espalhamento de ondas eletromagnéticas monocromáticas por átomos, onde existe uma relação, entre a parte real e a parte imaginária da amplitude de espalhamento, Kronig ¹⁷ sugeriu postular para o espalhamento de partículas uma conexão entre a parte real e a parte imaginária da amplitude de espalhamento do mesmo tipo como na ótica. São as chamadas relações de Dispersão, que pelo teorema de Titchmarsh ^{18, 19} é uma condição necessária e suficiente para a validade da condição de causalidade. Kronig (op. cit.) propôs então a condição de causalidade como uma restrição suplementar para a teoria das partículas elementares de Heisenberg, além da condição de unitariedade.

Uma relação entre a analiticidade da matriz S e o requerimento de causalidade foi obtida ^{20, 21, 22}, concluindo-se que a condição de causalidade implica que a função $S_{\rho}(k)$ seja analítica em todo o primeiro quadrante do plano k complexo.

Nêste trabalho iremos derivar uma expressão analítica da matriz S , não necessariamente unitária, a partir da equação de Schrödinger com potencial complexo (cf. seção 5). Verificaremos, então, até que ponto as propriedades analíticas da matriz S , assim definida, satisfazem o requerimento de Kronig, o que justifica nesta seção a apresentação da relação de causalidade e analiticidade segundo Schützer e Tiomno ^{20, 21}.

Analizaremos apenas o caso de onda $\underline{g}(\ell=0)$, o mesmo resulta

do pode ser obtido para $l \neq 0$ ^{21, 23}.

Seja o espalhamento não relativístico de partículas de massa m por um potencial esfêricamente simétrico de alcance r_0 . A solução da equação de Schrödinger para onda s ($l=0$) (usaremos nesta seção a unidade natural $\hbar = 1$ conservando a mesma notação da ref. 20):

$$-\frac{1}{2m} \nabla^2 \psi(r,t) + V(r) \psi(r,t) = i \frac{\partial}{\partial t} \psi(r,t) \quad (4.1)$$

pode ser escrita, fora do alcance do potencial, como:

$$\psi(r,t) = \left[g(E) \frac{e^{-ikr}}{r} + f(E) \frac{e^{ikr}}{r} \right] e^{-iEt} ; \quad r \gg r_0 \quad (4.2)$$

onde $E = \frac{k^2}{2m}$.

A função S , segundo eq. (1.13) é

$$S(E) = - \frac{f(E)}{g(E)} .$$

Escrevendo o pacote de onda incidente na forma

$$\psi_{in}(r,t) = \frac{\varphi_{in}(r,t)}{r} \quad (4.3)$$

onde

$$\varphi_{in}(r,t) = \int_0^{\infty} g(E) e^{-i(Et+kr)} dE ; \quad r \gg r_0$$

o pacote de onda emergente correspondente, segundo o princípio de superposição, é dado por:

$$\psi_{out}(r,t) = \frac{\varphi_{out}(r,t)}{r} \quad (4.4)$$

onde

$$\varphi_{out}(r,t) = - \int_0^{\infty} g(E) S(E) e^{-i(Et-kr)} dE ; \quad r \gg r_0$$

como $S(E) = 1$ na ausência do espalhador (cf. seção 1), o pacote de onda espalhada será dado por:

$$\psi_{sc}(r,t) = \frac{\varphi_{sc}(r,t)}{r} \quad (4.5)$$

onde

$$\varphi_{sc}(r,t) = \int_0^{\infty} [S(E) - 1] g(E) e^{-i(Et - kr)} dE; \quad r \gg r_0$$

Como em geral $S(k) \neq S(-k)$, a continuação analítica de $S(E)$ é uma função "two-valued" o que acarreta para o plano complexo das energias duas folhas de Riemann. Faz-se então o corte ao longo do eixo real positivo da energia e corresponde-se o plano superior de k com a fôlha física da energia, isto é, com a primeira fôlha de Riemann.

Definindo-se a quantidade,

$$\sigma(\rho, \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} [S(E') - 1] e^{-i(E'\tau - k'\rho)} dE'. \quad (4.6)$$

Sendo $\rho \gg 2r_0$, pode-se escrever a função de onda espalhada, eq. (4.5), na forma

$$\varphi_{sc}(r,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(r+r', t-t') \varphi_{in}(r', t') dt' \quad (4.7)$$

para $r, r' \gg r_0$. Pois se substituímos (4.3) e (4.6) em (4.7) e considerando

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(E-E')t'} dt' = \delta(E-E')$$

elimina-se a integral sobre E' , e obtém-se a equação (4.5).

A eq. (4.7) no caso em que $r' = r_0$, fica:

$$\varphi_{sc}(r, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(r+r_0, t-t') \varphi_{in}(r_0, t) dt' \quad (4.7a)$$

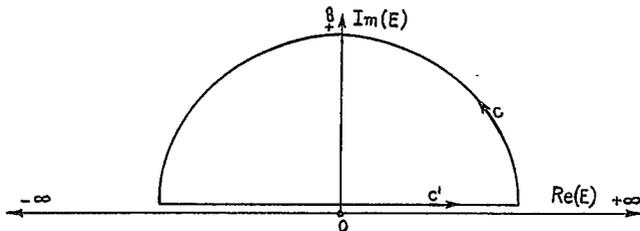
Impondo-se a condição de causalidade: "Não existe contribuição para a onda espalhada num tempo t da onda incidente sobre a superfície do espalhador em tempos anteriores à t ". Então a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$\sigma(r+r_0, \zeta) = 0 \quad \text{para} \quad \zeta < 0 \quad \text{e} \quad r \geq r_0 \quad (4.8)$$

Usando a definição de $\sigma(r+r_0, \zeta)$, eq. (4.6), tem-se:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [S(E) - 1] e^{-i[E\zeta - k(r_0+r)]} dE = 0; \quad \zeta < 0 \quad \text{e} \quad r \geq r_0 \quad (4.9)$$

Se $S(E)e^{ik(r+r_0)}$ é regular no infinito no semiplano superior da primeira folha de Riemann, escolhe-se o caminho de integração de (4.9), como mostra a figura abaixo.



uma vez que ambos $e^{-iE\mathcal{U}}$ ($\mathcal{U} > 0$) e $e^{ik(r+r_0)}$ ($r, r_0 > 0$) são regulares no semi-círculo c da figura. Como (4.9) deve ser satisfeita para qualquer valor negativo de \mathcal{U} e para $r \gg r_0$, então a função $S(E)$ não deve ter polos na primeira fôlha de Riemann (exceto possivelmente sobre o eixo real, então entende-se que o caminho de integração de (4.9) seja o limite de c' tendendo para o eixo real, como mostra a figura acima).

Em geral, a função $S(E)$ tem uma singularidade do tipo $\frac{-2ikr_0}{E}$ no ponto $-\infty$ do eixo real, que tornaria a integral divergente. Entretanto, a presença do fator $e^{ik\rho}$ com $\rho > 2r_0$ remove tal singularidade.

Traduzindo este resultado em termos do plano k complexo, a relação $k^2 = 2mE$ faz corresponder o semi-plano superior de E , da primeira fôlha de Riemann, ao primeiro quadrante do plano k complexo, logo, $S(k)$ não terá polos no primeiro quadrante ($0 < \arg k < \pi/2$).

Conclui-se então que a condição necessária e suficiente para a matriz S ser causal e que $S(k)$ $e^{ik\rho}$ ($\rho \gg 2r_0$) seja regular no primeiro quadrante do plano complexo dos momenta k .

CAPÍTULO II

5. DEFINIÇÃO E ANALITICIDADE DA MATRIZ S PARA POTENCIAIS COMPLEXOS

Seja a equação radial de Schrödinger para um potencial complexo de alcance finito:

$$u_{\ell}''(k,r) + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u_{\ell}(k,r) = V(r) u_{\ell}(k,r) \quad (5.1)$$

onde,

$$\frac{\hbar^2}{2m} = 1$$

e

$$V(r) = \left[V_1(r) + i V_2(r) \right] \theta(r-r_0) . \quad (5.2)$$

Sendo $\theta(r)$ definido como em (3.2). Como $V(r)$ é complexo a equação (5.1) admite soluções para valores complexos de k^2 , isto é, valores complexos da energia. Então ao invés de fazer a continuação analítica de $S_{\ell}(k)$ para k complexos, como em (3.4), determinaremos a matriz S , a partir da equação de Schrödinger (5.1) considerando a energia como uma quantidade complexa, desde o início. Então, em (5.1) tem-se:

$$k = k_1 + i k_2 \quad (5.3)$$

A equação (5.1) fora do alcance do potencial admite soluções de ondas livres. Chamandô:

$$\begin{aligned} O_{\ell}(k,r) &= kr h_{\ell}^{(1)}(kr) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} \exp \left[i \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) \right] \\ I_{\ell}(k,r) &= kr h_{\ell}^{(2)}(kr) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} \exp \left[-i \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde, $h_{\ell}^{(1)}$ e $h_{\ell}^{(2)}$ são as funções esféricas de Hankel do primeiro e segundo tipo respectivamente, definidas como na seção 1. $O_{\ell}(k,r)$ e $I_{\ell}(k,r)$ correspondem a ondas emergentes e incidentes respectivamente. A solução mais geral da equação (5.1) para $r \gg r_0$ será:

$$u_{\ell}(k,r) = A_{\ell}(k) O_{\ell}(k,r) + B_{\ell}(k) I_{\ell}(k,r); \quad r \gg r_0 \quad (5.5)$$

A razão entre a amplitude de onda emergente pela amplitude de onda incidente é, por definição, a matriz S (cf. eq. 1.13). Então:

$$S_{\ell}(k) = \frac{A_{\ell}(k)}{B_{\ell}(k)} \quad (5.6)$$

Mostraremos, mais adiante, que o numerador e o denominador do lado direito desta equação são quantidade bem definidas. Então os polos de $S_{\ell}(k)$ serão dados pelos zeros do denominador. Para mostrar isto, precisamos conhecer o comportamento analítico do plano complexo k de $u_{\ell}(k,r)$, para r fixo, que obviamente dependerá do tipo do potencial usado em (5.1) (cf. Apêndice C). No final desta seção mostraremos que no caso de potenciais definidos por (5.2), a matriz S , dada por (5.7) será uma função meromorfa em k e que apresenta singularidades essenciais no infinito.

De (5.5), tem-se

$$\frac{u_{\ell}(k,r)}{B_{\ell}(k)} = S_{\ell}(k) O_{\ell}(k,r) + I_{\ell}(k,r)$$

e

$$\frac{u'_{\ell}(k,r)}{B'_{\ell}(k)} = S_{\ell}(k) O'_{\ell}(k,r) + I'_{\ell}(k,r)$$

Dividindo uma pela outra:

$$\frac{u_{\ell}(k,r)}{u'_{\ell}(k,r)} = \frac{S_{\ell}(k) O_{\ell}(k,r) + I_{\ell}(k,r)}{S_{\ell}(k) O'_{\ell}(k,r) + I'_{\ell}(k,r)}$$

donde

$$S_{\ell}(k) = - \frac{I_{\ell}(k,r) u'_{\ell}(k,r) - I'_{\ell}(k,r) u_{\ell}(k,r)}{O_{\ell}(k,r) u'_{\ell}(k,r) - O'_{\ell}(k,r) u_{\ell}(k,r)}; \quad r \geq r_0 \quad (5.7)$$

Então as singularidades de $S_{\ell}(k)$, a distâncias finitas, serão da das por:

$$O_{\ell}(k,r) u'_{\ell}(k,r) - O'_{\ell}(k,r) u_{\ell}(k,r) = 0; \quad r \geq r_0 \quad (5.8)$$

Mostraremos agora, que em caso de potenciais absorptivos ($V_2 < 0$) a eq. (5.8) não poderá ser satisfeita no primeiro quadrante do plano complexo k . Ou seja, não existe polos para a matriz S aí, satisfazendo então o princípio de causalidade (cf. set. 4).

Multiplicando-se (5.1) por $u'_{\ell}(k,r)$ à direita e sua complexa conjugada por $u_{\ell}(k,r)$ à esquerda e subtraindo a primeira da segunda, obtem-se:

$$u''_{\ell}(k,r) u'_{\ell}(k,r) - u''_{\ell}{}^*(k,r) u_{\ell}(k,r) + (k^2 - k^{*2}) |u_{\ell}(k,r)|^2 + [V(r) - V^*(r)] |u_{\ell}(k,r)|^2 = 0$$

integrando esta equação de 0 a r_0 , e notando que:

$$k^2 - k^{*2} \equiv i 4 k_1 k_2$$

e

$$V^*(r) - V(r) \equiv -i 2 V_2(r)$$

e

$$u_{\ell}(k,0) = 0,$$

teremos:

$$u_{\ell}^*(k,r) u_{\ell}'(k,r) - u_{\ell}'^*(k,r) u_{\ell}(k,r) \Big|_{r_0}^{r_0} + 4ik_1 k_2 \int_0^{r_0} |u_{\ell}(k,r)|^2 dr - \\ - 2i \int_0^{r_0} V_2(r) |u_{\ell}(k,r)|^2 dr = 0$$

logo,

$$\left[\frac{u_{\ell}'(k,r)}{u_{\ell}(k,r)} - \left(\frac{u_{\ell}'(k,r)}{u_{\ell}(k,r)} \right)^* \right]_{r_0}^{r_0} + \frac{4i k_1 k_2}{|u_{\ell}(k,r)|^2} \int_0^{r_0} |u_{\ell}(k,r)|^2 dr - \\ - \frac{2i}{|u_{\ell}(k,r)|^2} \int_0^{r_0} V_2(r) |u_{\ell}(k,r)|^2 dr = 0 \quad (5.9)$$

A equação (5.8) nos dá uma condição necessária para existência de polos de $S_{\ell}(k)$, que pode ser escrita na forma:

$$\frac{O_{\ell}(k,r)}{O_{\ell}'(k,r)} = \frac{u_{\ell}(k,r)}{u_{\ell}'(k,r)} \quad (5.10)$$

que substituída em (5.9) nos dá

$$\left[\frac{O_{\ell}'(k,r)}{O_{\ell}(k,r)} - \left(\frac{O_{\ell}'(k,r)}{O_{\ell}(k,r)} \right)^* \right]_{r_0}^{r_0} + \frac{4i k_1 k_2}{|u_{\ell}(k,r)|^2} \int_0^{r_0} |u_{\ell}(k,r)|^2 dr - \\ - \frac{2i}{|u_{\ell}(k,r)|^2} \int_0^{r_0} V_2(r) |u_{\ell}(k,r)|^2 dr = 0. \quad (5.11)$$

Empregando o mesmo artifício, usado na obtenção da equação (5.9), para a equação de Schrödinger fora do alcance do potencial, teremos para $k_2 > 0$:

$$\left[\frac{O_{\ell}'(k,r)}{O_{\ell}(k,r)} - \left(\frac{O_{\ell}'(k,r)}{O_{\ell}(k,r)} \right)^* \right]_{r_0}^{\infty} = \frac{4i k_1 k_2}{|O_{\ell}(k,r)|^2} \int_{r_0}^{\infty} |O_{\ell}(k,r)|^2 dr \quad (5.12)$$

pois $O_\ell(\infty) = 0$. De (5.11) e (5.12), obtém-se

$$\frac{2 k_1 k_2}{|O_\ell(k,r)|^2} \int_{r_0}^{\infty} |O_\ell(k,r)|^2 dr + \frac{2 k_1 k_2}{|u_\ell(k,r)|^2} \int_0^{r_0} |u_\ell(k,r)|^2 dr -$$

$$- \frac{1}{|u_\ell(k,r)|^2} \int_0^{r_0} V_2(r) |u_\ell(k,r)|^2 dr = 0 \quad (5.13)$$

que é uma condição de existência de polos de $S_\ell(k)$ no semi-plano superior complexo dos momenta.

De (5.13) concluímos que para potenciais complexos absorptivos, i.e., $V_2(r) < 0$, não podem existir polos de $S_\ell(k)$ no primeiro quadrante do plano complexo dos momenta. Também não existe polo de $S_\ell(k)$ no eixo imaginário positivo para $V_2(r) \neq 0$.

Ao contrário do que ocorre para a matriz S de potenciais reais, para potenciais complexos existem polos de $S_\ell(k)$ no segundo quadrante quando a parte imaginária do potencial é negativa (potenciais absorptivos). Para potenciais emissivos ($V_2 > 0$), teremos a situação inversa, ou seja, $S_\ell(k)$ com possíveis polos no primeiro quadrante do plano complexo k e sem singularidades no segundo quadrante.

Concluímos então que a matriz S para potenciais complexos absorptivos de alcance finito, satisfaz a condição de causalidade (cf. sec. 4), já a matriz S para potenciais emissivos, em princípio, não satisfaz esta condição uma vez que poderão existir polos no primeiro quadrante do plano complexo dos momenta.

O fato de não existirem polos ligados (polos situados no eixo imaginário positivo), já era de se esperar pois sabemos que para potenciais complexos a equação de Schrödinger não admite estados ligados.

Para mostrar que $S_\ell(k)$ é uma função meromórfica no plano complexo dos momenta k , e apresenta singularidades essenciais no semi-plano superior para $\text{Im}(k) \rightarrow \infty$, escrevemos as funções de Hankel esféricas como sendo uma exponencial vezes um polinômio Z^ℓ . Então,

$$h_\ell^{(1,2)}(Z) = (\pm i)^{-\ell-1} Z^{-1} \exp(\pm iZ) \sum_{n=0}^{\ell} (\mp 2iZ)^{-n} \frac{(\ell+n)!}{n!(\ell-n)!}$$

ou seja:

$$h_\ell^{(1)}(Z) = Z^{-1} \exp[iZ] \sum_{n=0}^{\ell} i^{n-\ell-1} \frac{(\ell+n)!}{n!(\ell-n)!} (2Z)^{-n}$$

$$= Z^{-\ell-1} M_\ell(Z) \exp(iZ) \quad (5.14)$$

e

$$h_\ell^{(2)}(Z) = Z^{-1} \exp(-Z) \sum_{n=0}^{\ell} (-i)^{n-\ell-1} \frac{(\ell+n)!}{n!(\ell-n)!} (2Z)^{-n}$$

$$= Z^{-\ell-1} N_\ell(Z) \exp(-iZ) \quad (5.15)$$

onde $M_\ell(Z)$ e $N_\ell(Z)$ são polinômios do grau ℓ em Z .

Usando-se a relação de recorrência para a função de Hankel ²⁵

$$\frac{d}{dZ} [Z h_\ell^{(1,2)}(Z)] = (\ell+1) h_\ell^{(1,2)}(Z) - Z h_{\ell}^{(1,2)}(Z)$$

obtem-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dZ} \left[Z h_{\ell}^{(1)}(Z) \right] &= Z^{-\ell-1} \exp(iZ) \left[(\ell+1) Z M_{\ell}(Z) - M_{\ell+1}(Z) \right] = \\ &= Z^{-\ell-1} p_{\ell+1}(Z) \exp(iZ) \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dZ} \left[Z h_{\ell}^{(2)}(Z) \right] &= Z^{-\ell-1} \exp(-iZ) \left[(\ell+1) N_{\ell}(Z) - N_{\ell+1}(Z) \right] = \\ &= Z^{-\ell-1} q_{\ell+1}(Z) \exp(-iZ) \end{aligned} \quad (5.17)$$

onde $p_{\ell+1}(Z)$ e $q_{\ell+1}(Z)$ são polinômios do grau $\ell+1$ em Z .

Com auxílio de (5.14), (5.15), (5.16) e (5.17) podemos escrever, considerando (5.4):

$$O_{\ell}(k, r) = (kr)^{-\ell} M_{\ell}(kr) \exp(ikr) \quad (5.18)$$

$$I_{\ell}(k, r) = (kr)^{-\ell} N_{\ell}(kr) \exp(-ikr) \quad (5.19)$$

$$O'_{\ell}(k, r) = \frac{d}{dr} O_{\ell}(k, r) = k(kr)^{-\ell-1} p_{\ell+1}(kr) \exp(ikr) \quad (5.20)$$

$$I'_{\ell}(k, r) = \frac{d}{dr} I_{\ell}(k, r) = k(kr)^{-\ell-1} q_{\ell+1}(kr) \exp(-ikr) \quad (5.21)$$

substituindo (5.18), (5.19), (5.20) e (5.21) em (5.7), obtem-se:

$$S_{\ell}(k) = \frac{r N_{\ell}(kr) u'_{\ell}(k, r) - q_{\ell+1}(kr) u_{\ell}(k, r)}{r M_{\ell}(kr) u'_{\ell}(k, r) - p_{\ell+1}(kr) u_{\ell}(k, r)} \exp(-2ikr); \quad r \gg r_0$$

o que permite escrever a função $S_{\ell}(k)$, como,

$$S_{\ell}(k) = F_{\ell}(k) \exp(-2ikr); \quad r \gg r_0 \quad (5.22)$$

$$F_{\ell}(k) = \frac{r N_{\ell}(kr) u'_{\ell}(k, r) - q_{\ell+1}(kr) u_{\ell}(k, r)}{r M_{\ell}(kr) u'_{\ell}(k, r) - p_{\ell+1}(kr) u_{\ell}(k, r)}; \quad r \gg r_0 \quad (5.23)$$

As funções $u_{\ell}(k, r)$ e $u'_{\ell}(k, r)$ são funções inteiras no plano

complexo k . (cf. apêndice D).

Sabendo que soma, diferença e produto de funções inteiras são também funções inteiras ²⁶, concluímos que o numerador e o denominador de $F_l(k)$, eq. (5.23), são funções inteiras em k . Logo $F_l(k)$ é uma função meromórfica de k , com singularidades isoladas dadas pelos zeros do seu denominador. O fator $\exp(-2ikr)$ em $S_l(k)$ acarreta singularidades essenciais no semi-plano superior para $\text{Im}(k) \rightarrow \infty$.

6. RELAÇÕES DE SIMETRIA DA MATRIZ S PARA POTENCIAIS COMPLEXOS

Em princípio, as relações de simetria de $S_l(k)$ descritas na Seção 3 (cf. equações (3.5) e (3.6) não são válidas para potenciais complexos. Estudaremos então, neste capítulo, como seriam modificadas estas relações de simetria, para um potencial complexo definido como em (5.2).

A relação (3.5) é uma consequência apenas da simetria da solução da equação de Schrödinger para potenciais esféricamente simétricos (como será mostrado mais adiante), daí esperamos que seja igualmente válida para um potencial complexo com simetria esférica. Já a relação (3.6) além de ser uma consequência das propriedades de simetria das soluções da equação de Schrödinger, também depende da realidade do potencial ¹² ou da matriz S ser unitária ²⁰. Como usamos potenciais complexos de vemos esperar que a relação da simetria (3.6) não se verifique mais.

Da equação (5.1), trocando k em $-k$, teremos:

$$u_{\ell}^{\prime}(-k, r) + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u_{\ell}(-k, r) = V(r) u_{\ell}(-k, r)$$

Como $u_{\ell}(k, r)$ e $u_{\ell}(-k, r)$ são soluções da mesma equação diferencial, teremos:

$$u_{\ell}(k, r) = C_{\ell}(k) u_{\ell}(-k, r) \quad (6.1)$$

$$u_{\ell}^{\prime}(k, r) = C_{\ell}(k) u_{\ell}^{\prime}(-k, r)$$

Considerando a expressão da matriz S, (5.7):

$$S_{\ell}(k) = - \frac{I_{\ell}(k, r) u_{\ell}^{\prime}(k, r) - I_{\ell}^{\prime}(k, r) u_{\ell}(k, r)}{O_{\ell}(k, r) u_{\ell}^{\prime}(k, r) - O_{\ell}^{\prime}(k, r) u_{\ell}(k, r)} ; r \gg r_0 \quad (6.2)$$

que, trocando k em -k, obtém-se:

$$S_{\ell}(-k) = - \frac{I_{\ell}(-k, r) u_{\ell}^{\prime}(-k, r) - I_{\ell}^{\prime}(-k, r) u_{\ell}(-k, r)}{O_{\ell}(-k, r) u_{\ell}^{\prime}(-k, r) - O_{\ell}^{\prime}(-k, r) u_{\ell}(-k, r)} ; r \gg r_0 \quad (6.3)$$

usando (6.1), fica:

$$S_{\ell}(-k) = - \frac{I_{\ell}(-k, r) u_{\ell}^{\prime}(k, r) - I_{\ell}^{\prime}(-k, r) u_{\ell}(k, r)}{O_{\ell}(-k, r) u_{\ell}^{\prime}(k, r) - O_{\ell}^{\prime}(-k, r) u_{\ell}(k, r)} ; r \gg r_0$$

usando a propriedade das funções de Hankel esféricas, $h_{\ell}^{(1)}(-Z) = (-1)^{\ell} h_{\ell}^{(2)}(Z)$, obtém-se, de (5.4):

$$O_{\ell}(-k, r) = (-1)^{\ell+1} I_{\ell}(k, r); \quad O_{\ell}^{\prime}(-k, r) = (-1)^{\ell+1} I_{\ell}^{\prime}(k, r) \quad (6.4)$$

$$I_{\ell}(-k, r) = (-1)^{\ell+1} O_{\ell}(k, r); \quad I_{\ell}^{\prime}(-k, r) = (-1)^{\ell+1} O_{\ell}^{\prime}(k, r)$$

Então:

$$[S_{\ell}(-k)] = - \frac{I_{\ell}(k, r) u_{\ell}^{\prime}(k, r) - I_{\ell}^{\prime}(k, r) u_{\ell}(k, r)}{O_{\ell}(k, r) u_{\ell}^{\prime}(k, r) - O_{\ell}^{\prime}(k, r) u_{\ell}(k, r)} ; r \gg r_0 \quad (6.5)$$

que comparada com (6.2), vem:

$$S_l(k) = \frac{1}{S_l(-k)} \quad (6.6)$$

Mostramos então que a relação de simetria (3.5) também é válida para a matriz S , de potenciais complexos de alcance finito e com simetria esférica. Esta relação de simetria (6.6), nos diz que se k é um polo de $S_l(k)$ então $-k$ será um zero da mesma função. Consequentemente por (6.6) e (5.13), para potenciais complexos, $S_l(k)$ não tem zeros no eixo imaginário inferior do plano complexo dos k . Para potenciais absorptivos (emissivos) não existem zeros no 3º quadrante (4º quadrante) para $S_l(k)$ no plano complexo dos momenta.

Considerando a equação de Schrödinger radial, para o potencial $V^*(r)$:

$$v''(k,r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] v_l(k,r) = V^*(r) v_l(k,r) \quad (6.7)$$

podemos escrever como em (5.7), a matriz S para o potencial $V^*(r)$:

$$S_l(k, V^*) = - \frac{I_l(kr) v_l^*(k,r) - I_l^*(kr) v_l(k,r)}{O_l(kr) v_l^*(k,r) - I_l^*(kr) v_l(k,r)} ; \quad r \geq r_0 \quad (6.8)$$

em (6.7) substituindo k por k^* , obtém-se:

$$v_l''(k^*, r) + \left[k^{*2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] v_l(k^*, r) = V^*(r) v_l(k^*, r) \quad (6.9)$$

tomando a complexa conjugada de (5.1)

$$u_{\ell}^{**}(k,r) + \left[k^{2*} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u_{\ell}^{*}(k,r) = V^{*}(r) u_{\ell}^{*}(k,r) \quad (6.10)$$

comparando (6.9) e (6.10) podemos escrever:

$$v_{\ell}^{*}(k^{*},r) = D_{\ell}(k) u_{\ell}^{*}(k,r) \quad (6.11)$$

Da expressão da matriz S, para o potencial $V(r)$, (5.7), teremos:

$$S_{\ell}^{*}(k,V) = - \frac{I_{\ell}^{*}(kr) u_{\ell}^{*}(k,r) - I_{\ell}^{\prime *}(kr) u_{\ell}^{\prime *}(k,r)}{O_{\ell}^{*}(kr) u_{\ell}^{*}(k,r) - O_{\ell}^{\prime *}(kr) u_{\ell}^{\prime *}(k,r)}, \quad r \gg r_0 \quad (6.12)$$

substituindo (6.11) em (6.12), obtem-se:

$$S_{\ell}^{*}(k,V) = - \frac{I_{\ell}^{*}(kr) v_{\ell}^{*}(k^{*},r) - I_{\ell}^{\prime *}(kr) v_{\ell}^{\prime *}(k^{*},r)}{O_{\ell}^{*}(kr) v_{\ell}^{*}(k^{*},r) - O_{\ell}^{\prime *}(kr) v_{\ell}^{\prime *}(k^{*},r)}, \quad r \gg r_0 \quad (6.13)$$

Por outro lado, (6.8) pode ser escrito como:

$$S_{\ell}(k^{*}, V^{*}) = - \frac{I_{\ell}(k^{*}r) v_{\ell}^{*}(k^{*},r) - I_{\ell}^{\prime}(k^{*}r) v_{\ell}^{\prime *}(k^{*},r)}{O_{\ell}(k^{*}r) v_{\ell}^{*}(k^{*},r) - O_{\ell}^{\prime}(k^{*}r) v_{\ell}^{\prime *}(k^{*},r)}, \quad r \gg r_0 \quad (6.14)$$

usando as seguintes propriedades para as funções esféricas de Hankel ²⁸,

$$h_{\nu}^{(1)}(z^{*}) = \left[h_{\nu}^{(2)}(z) \right]^{*}$$

$$h_{\nu}^{(2)}(z^{*}) = \left[h_{\nu}^{(1)}(z) \right]^{*}$$

e pela definição de $I_{\ell}(kr)$ e $O_{\ell}(kr)$, equação (5.4), têm-se:

$$I_{\ell}^{*}(kr) = k^{*}r \left[h_{\ell}^{(2)}(kr) \right]^{*} = k^{*}r h_{\ell}^{(1)}(k^{*}r) = O_{\ell}(k^{*}r)$$

e

$$O_{\ell}^{*}(kr) = k^{*}r \left[h_{\ell}^{(1)}(kr) \right]^{*} = k^{*}r h_{\ell}^{(2)}(k^{*}r) = I_{\ell}(k^{*}r)$$

Analogamente

$$I_{\ell}^{\prime *}(kr) = O_{\ell}^{\prime}(k^{*}r)$$

e

$$O_{\ell}^*(kr) = I_{\ell}^*(kr)$$

que substituído em (6.13) e comparando com a equação (6.14), encontra-se

$$S_{\ell}(k^*, V^*) = \frac{1}{S_{\ell}^*(k, V)}, \quad (6.15)$$

tomando a complexa conjugada desta equação, vem

$$S_{\ell}^*(kV) = \frac{1}{S_{\ell}(k^*, V^*)} \quad (6.16)$$

trocando k em $-k^*$ e V em V^* , obtem-se:

$$S_{\ell}^*(-k^*, V^*) = \frac{1}{S_{\ell}(-k, V)} \quad (6.17)$$

A relação de simetria (6.6) se escreve:

$$\frac{1}{S_{\ell}(-k, V)} = S_{\ell}(k, V) \quad (6.18)$$

logo, de (6.17) e (6.18), obtem-se:

$$S_{\ell}^*(-k^*, V^*) = S_{\ell}(k, V) \quad (6.19)$$

que é uma generalização da propriedade (3.6) para potenciais complexos. No caso real, $V = V^*$, (6.19) simplifica-se em (3.6).

A equação (6.19) nos diz que um polo de $S_{\ell}(k, V)$ no plano complexo k é simétrico em relação ao eixo imaginário de um polo de $S_{\ell}(k, V^*)$. Com esta propriedade, conhecidos os polos de $S_{\ell}(k, V)$ para o potencial absorvivo se conhecerá também os polos da mesma função para o potencial emissivo.

7. UNITARIEDADE E CAUSALIDADE

A unitariedade da matriz S,

$$S_{\ell}(k) S_{\ell}^{*}(k) = 1 \quad (k \text{ real}), \quad (7.1)$$

impõe que a amplitude de probabilidade das partículas emergentes é igual à amplitude de probabilidade das partículas incidentes, pois de (5.6) e (7.1) tem-se: $|A_{\ell}(k)|^2 = |B_{\ell}(k)|^2$.

A continuação analítica da relação (7.1) para k complexo, escreve-se como:

$$S_{\ell}(k) S_{\ell}^{*}(k^{*}) = 1, \quad (7.2)$$

que é válida em todo o plano complexo k ²⁹.

Da equação (6.15), obtém-se

$$S_{\ell}(k, V) S_{\ell}^{*}(k^{*}, V^{*}) = 1, \quad (7.3)$$

que comparada com a equação (7.2) nos permite escrever uma condição necessária e suficiente sobre o potencial para que a matriz S seja unitária. Esta condição escreve-se como:

$$[V(r)]^{*} = V(r),$$

isto é, o potencial deverá ser uma função real para que a matriz S seja unitária.

Vimos, seção 4, que a matriz S para satisfazer a condição de causalidade de Schutzler e Tiomno deverá ser analítica em todo o primeiro quadrante do plano complexo k. Por outro lado, seção 5, vimos que para potenciais complexos de alcance finito absorptivos ($\text{Im}(V) < 0$) a matriz S é analítica no primeiro quadrante do plano complexo k, conseqüentemente $S_{\ell}(k)$ satisfaz esta condição de causalidade. Para potenciais emissivos ($\text{Im}(V) > 0$) a condição de e-

xistência de polos (5.13) pode ser satisfeita para valores de k tais que $0 < \arg k < \pi/2$, i.e., no primeiro quadrante do plano complexo k , conseqüentemente nada se pode dizer sobre a causalidade da matriz de espalhamento neste caso. Se o potencial for do tipo poço emissivo, nós verificaremos, seção 8, que a matriz S possui polos no primeiro quadrante do plano complexo k , não satisfazendo, então, a condição de causalidade.

Podemos entender este resultado, da seguinte maneira. Se o potencial é emissivo, o alvo, além de espalhar as partículas que chegam, funciona como fonte de partículas que são emitidas independentemente do feixe de partículas incidentes. Não existe, em princípio, nenhuma dependência das partículas emitidas (que se sobrepoem às espalhadas) com o feixe incidente, que é considerado, num problema de espalhamento, como a causa. Quando o potencial é absorvivo, não existe emissão de partículas independente das que incidem sobre o alvo. Podendo então existir uma relação de causa e efeito entre as partículas incidentes e as partículas espalhadas.

Com os resultados obtidos até agora, podemos mostrar, para potenciais de alcance finito, que se a matriz S definida como em (5.6) for unitária ela será também causal, no sentido em que satisfaz uma condição de causalidade, seção 4.

Da relação (7.3) e da condição de unitariedade (7.2), pode-se concluir que a matriz S para um potencial esféricamente simétrico de alcance finito, será unitária se e somente se $[\tilde{V}(r)]^* =$

= $V(r)$. Por outro lado, se o potencial é uma função real, a condição de existência de polos (5.13), para $k_2 > 0$, se simplifica em:

$$\frac{2 k_1 k_2}{|O_\ell(kr)|^2} \int_0^\infty |O_\ell(kr)|^2 dr + \frac{2 k_1 k_2}{|u_\ell(k,r)|^2} \int_0^{r_0} |u(k,r)|^2 dr = 0, \quad (k_2 > 0) \quad (7.4)$$

pois, na derivação de (5.13) onde se tinha

$$V^*(r) - V(r) = -2i \operatorname{Im} V(r) = -2iV_2,$$

tem-se agora

$$V^*(r) - V(r) = 0.$$

A equação (7.4) não admite solução para $k_1 \neq 0$. Consequentemente $S_\ell(k)$ não tem polos no primeiro quadrante do plano complexo k (exceto possivelmente no eixo imaginário). Como $S_\ell(k)$ é uma função meromórfica em todo o plano complexo, k , seção 5, então será analítica no primeiro quadrante do plano complexo k . Satisfazendo assim a condição de causalidade de Schutzer e Tiomno (cf. seção 4).

Inversamente, conhecida uma matriz S que seja analítica no primeiro quadrante do plano complexo k , satisfazendo então o requerimento de causalidade, nada podemos afirmar sobre a sua unitariedade. Como um exemplo, seção 5, verificamos que, para um potencial complexo do tipo poço absorvivo a matriz S satisfaz a condição de causalidade de Schützer e Tiomno, mas não é unitária.

CAPÍTULO III

8. CÁLCULO DOS POLOS DE $S(k)$ DE UM ESPALHAMENTO POR UM POÇO DE POTENCIAL COMPLEXO

Nesta secção determinamos diretamente a distribuição dos polos da função $S(k)$ ($l=0$) no plano complexo dos momenta, para um poço de potencial complexo. E verificamos como a parte imaginária do potencial contribui para o deslocamento dos polos da função $S(k)$ sobre o plano complexo dos momenta e fazemos uma comparação com o resultado obtido para um poço de potencial real ⁴.

Estamos representando por $S(k)$ o elemento da matriz S para a onda \underline{s} ($l=0$), suprimindo o índice \underline{q} em $S_{\underline{q}}(k)$, para simplificação da notação.

Faremos o cálculo dos polos apenas para o caso de absorção (cf. secção 2), i.e., $\text{Im}(V) < 0$. Se pode facilmente determinar os polos de $S(k)$ para potenciais emissivos, $\text{Im}(V) > 0$, conhecido os polos de $S(k)$ para o potencial absorpsivo por meio da propriedade de simetria (6.19).

Formulação do Problema

Para um poço de potencial complexo absorpsivo, de alcance r_0 , escrevemos:

$$V(r) = V_1(r) - i V_2(r)$$

onde:

$$V(r) = V_1(r) = V_2(r) = 0; \quad \text{para } r \geq r_0$$

e

$$V_1(r) = -V_1 = \text{Cte.}$$

$$V_2(r) = -V_2 = \text{Cte.}; \quad \text{para } r \ll r_0$$

com V_1 e V_2 positivos.

A equação radial de Schrödinger para onda \underline{s} ($l=0$), se escreve:

$$u''(k,r) + k^2 u(k,r) = -V' u(k,r) \quad (8.1)$$

onde

$$V' = \frac{2m}{\hbar^2} (V_1 + i V_2)$$

e

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

ou então:

$$u''(k,r) + k'^2 u(k,r) = 0; \quad r \leq r_0$$

com

$$k'^2 = k^2 + V' \quad (8.2)$$

Chamando $u_{<}(k,r)$, a solução na região $r < r_0$, teremos:

$$u_{<}(k,r) = C \sin k'r$$

com a condição de contorno $u(k,0) = 0$, onde C é constante em relação a r . Chamando $u_{>}(k,r)$ a solução na região $r > r_0$, então

$$u''(k,r) + k^2 u(k,r) = 0; \quad r > r_0$$

nos dá

$$u_{>}(k,r) = g(k) e^{-ikr} + f(k) e^{ikr}.$$

Da definição da matriz S , eq. (5.6), escrevemos:

$$u_{>}(k, r) = -g(k) \left[-e^{-ikr} + S(k) e^{ikr} \right]$$

Como a descontinuidade do potencial em $r = r_0$ é finita, a função de onda e sua derivada primeira são contínuas neste ponto, podemos escrever:

$$u_{<}(k, r_0) = u_{>}(k, r_0)$$

$$u'_{<}(k, r_0) = u'_{>}(k, r_0)$$

ou seja:

$$C \sin(k'r_0) = -g(k) \left[-e^{-ikr_0} + S(k) e^{ikr_0} \right]$$

$$k' C \sin(k'r_0) = -g(k) ik \left[e^{-ikr_0} + S(k) e^{ikr_0} \right]$$

resolvendo este sistema encontramos para C e S(k):

$$S(k) = -\frac{C}{2ik g(k)} \left[ik \sin(k'r_0) + k' \cos(k'r_0) \right] e^{-ikr_0}$$

$$C = \frac{2 g(k) e^{-ikr_0}}{\sin(k'r_0) - (k'/ik) \cos(k'r_0)}$$

logo

$$S(k) = \frac{k' \cos(k'r_0) + ik \sin(k'r_0)}{k' \cos(k'r_0) - ik \sin(k'r_0)} e^{-2ikr_0} \quad (8.3)$$

Os polos de S(k) serão determinados pelos zeros de denominador de (8.3), ou seja, pelas raízes da equação:

$$k' \cos(k'r_0) = -ik \sin(k'r_0) \quad (8.4)$$

Definindo os parâmetros:

$$\alpha = k'r_0 \quad (8.5)$$

$$\beta = kr_0 \quad (8.6)$$

$$A^2 = V' r_0 \quad (8.7)$$

que satisfazem a relação,

$$\alpha^2 = \beta^2 + A^2 \quad (8.8)$$

onde α e β representam respectivamente o número de onda complexo dentro e fora do alcance, r_0 , do potencial. O parâmetro A contém as características de atração ou repulsão (dado pelo sinal da parte real do potencial) e de absorção ou emissão (dado pelo sinal da parte imaginária do potencial).

Com (8.5) e (8.6) escrevemos (8.3) na forma

$$S(\beta) = \frac{\alpha \cos \alpha + i \beta \sin \alpha}{\alpha \cos \alpha - i \beta \sin \alpha} e^{-2i\beta},$$

e (8.4) na forma

$$\alpha \cot \alpha = i \beta \quad (8.9)$$

Então os polos da função $S(\beta)$, $\beta = kr_0$, para um poço de potencial complexo serão determinados pelas raízes da equação transcendental complexa (8.9). De (8.8) e (8.9) obtém-se a seguinte relação entre α e o parâmetro complexo A :

$$\alpha^{-1} \sin \alpha = \pm A^{-1}; \quad A \neq 0 \quad (8.10)$$

desta equação calculamos os valores de α para cada valor do parâmetro A e obtemos os polos correspondentes pela eq. (8.8). Como estamos interessados no deslocamento dos polos de $S(\beta)$ em função da variação do potencial, escrevemos uma relação explícita entre o parâmetro complexo A e o potencial. De (8.7) temos:

$$A^2 = 2m(V_1 + i V_2) r_0^2 / \hbar^2 = v_1 + i v_2; \quad v_1, v_2 > 0 \quad (8.11)$$

onde,

$$v_1 = 2m V_1 r_0^2 / \hbar^2$$

$$v_2 = 2m V_2 r_0^2 / \hbar^2$$

Chamando $a = \text{Re}(A)$ e $b = \text{Im}(A)$, então:

$$a^2 - b^2 = v_1 \quad (8.12)$$

$$ab = v_2/2$$

Como v_1 e v_2 são positivos, têm-se:

$$\text{sgn } a = \text{sgn } b \quad (8.13)$$

$$|a| \geq |b|$$

ainda de (8.12) obtém-se a e b , em função da parte real (v_1) e imaginária (v_2) do potencial definido como em (8.11):

$$a = \pm \left\{ v_1/2 + \left[(v_1^2 + v_2^2)/4 \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (8.14)$$

$$b = v_2/2a$$

A equação (8.10) é uma equação inteira e possui infinitas raízes para cada valor do parâmetro A ³⁰. Consequentemente existem infinitos polos de $S(\beta)$ para cada valor do potencial. As raízes da eq. (8.10) estão discutidas no apêndice -A.

Determinadas as raízes α , para cada A , da eq. (8.10) obtemos os polos de $S(\beta)$ por meio da eq. (8.8). Como (8.8) apresenta uma duplicidade no sinal de β , pois

$$\beta = \pm (\alpha^2 - A^2)^{1/2}, \quad (8.15)$$

toma-se o sinal que torna β consistente com (8.9). Então fa-

zendo $\beta = \beta_1 + i\beta_2$ e $\alpha = x + iy$ em (8.9), onde $\beta_1 = \text{Re}(\beta)$, $\beta_2 = \text{Im}(\beta)$, $x = \text{Re}(\alpha)$ e $y = \text{Im}(\alpha)$, e após manipulações usuais com as funções hiperbólicas e trigonométricas, obtém-se:

$$\beta_1 = \frac{y \sin 2x - x \sinh 2y}{\cosh 2y - \cos 2x} \quad (8.16)$$

$$\beta_2 = -\frac{y \sinh 2y + x \sin 2x}{\cosh 2y - \cos 2x} \quad (8.17)$$

Como $\cosh 2y - \cos 2x > 0$, teremos:

$$\text{sgn } \beta_1 = \text{sgn} [y \sin 2x - x \sinh 2y] \quad (8.18)$$

e

$$\text{sgn } \beta_2 = -\text{sgn} [y \sinh 2y + x \sin 2x] \quad (8.19)$$

logo (8.18) e (8.19) determinam univocamente o sinal a ser tomado no cálculo de $\text{Re}(\beta)$ e $\text{Im}(\beta)$.

Comportamento Assintótico dos Polos de $S(\beta)$

Além do cálculo numérico da localização de alguns polos de $S(\beta)$, fazemos um estudo analítico do comportamento assintótico destes polos, bem como para alguns valores particulares de β e de v . O que nos permite obter um melhor conhecimento das trajetórias dos polos de $S(\beta)$ em todo o plano complexo $\beta = kr_0$, em função da variação do potencial.

O Limite de $|\beta| \rightarrow \infty$.

Para $v \neq 0$, com v_1 e v_2 finitos, quando $|\beta| \rightarrow \infty$, os polos de $S(\beta)$ poderão ser determinados pelas seguintes fórmulas as-

sintóticas (cf. apêndice C):

$$\beta_1 \approx \arctan(a/b) \pm n\pi \mp \frac{\log(2n\pi/|A|)}{n\pi} \quad (8.20)$$

$$\beta_2 \approx -\log(2n\pi/|A|) - \frac{1}{n\pi} \arctan(a/b) \quad (8.21)$$

onde n assume valores inteiros positivos. Os polos determinados por (8.20) e (8.21) têm uma aproximação da ordem de $n^{-1} \log n$ que se torna infinitesimal à medida que $n \rightarrow \infty$. A distância entre dois polos consecutivos se aproxima do valor π , à medida que $|\beta| \rightarrow \infty$. Nesta aproximação β só será um polo de $S(\beta)$ no infinito se β_2 é negativo (semi-plano inferior) e ambos β_1 e β_2 tendem a infinito e β_1 é da ordem de $e^{-\beta_2}$ (cf. eq. C9). Todos estes resultados (exceto a distribuição assimétrica em relação ao eixo imaginário de β , que se observa da fórmula assintótica (8.20) são igualmente válidos para poço de potencial real ^{4,31,32}.

Polos de $S(\beta)$ para $\text{Re}(\beta) = 0$

Da condição de existência de polos de $S(k)$ no semi-plano superior (5.13), conclui-se que não existem polos sobre o eixo imaginário positivo, i.e., para $\text{Re}(\beta) = 0$ com $\text{Im}(\beta) > 0$. Mostraremos agora, que no problema que tratamos, $S(\beta)$ não tem polos em todo o eixo imaginário, i.e., em $\text{Re}(\beta) = 0$. Se existe um polo de $S(\beta)$, sobre o eixo imaginário, as equações (8.16) e (8.17) serão satisfeitas para $\beta_1 = 0$, então a menos que x ou y seja nulo, temos:

$$\frac{\sin 2x}{2x} = \frac{\sinh 2y}{2y}$$

que é impossível, o lado direito sendo numericamente menor, e o lado esquerdo numericamente maior que a unidade. Logo $\alpha = x + iy$, que satisfaz (8.16) e (8.17) é um imaginário puro ou um número real. Por outro lado de (8.8) e (8.11) teremos, para $\beta = i\beta_2$:

$$\alpha = \sqrt{\beta_2^2 + v_1 + i v_2}$$

que é um número complexo para $v_2 \neq 0$. Consequentemente não existem polos de $S(\beta)$ no eixo imaginário positivo ou negativo, para potenciais complexos ou imaginário puro.

Polos de $S(\beta)$ para $\text{Im}(\beta) = 0$

De (8.9) e (8.8), tem-se que os polos de $S(\beta)$ sobre o eixo real dos momenta serão dados pelas raízes da equação transcendental complexa

$$\sqrt{[\text{Re}(\beta)]^2 + v'} \cot \sqrt{[\text{Re}(\beta)]^2 + v'} = i \text{Re}(\beta). \quad (8.22)$$

Quando v' é real, verifica-se imediatamente, que para $\text{Re}(\beta) \neq 0$ a eq. acima não admite nenhuma solução. Consequentemente não existem polos, sobre o eixo real dos momenta, de uma matriz S para um espalhamento por um poço de potencial real. No caso de potenciais complexos, ou imaginário puro, o radical $\sqrt{|\text{Re}(\beta)|^2 + v'}$ é uma quantidade complexa, podendo então existir polos sobre o eixo real dos momenta, de uma matriz S para um espalhamento por um poço de potencial complexo.

Para mostrar que no caso de potenciais absorptivos (emissivos) não existem polos no eixo real positivo (negativo), consideramos o sistema (8.16) e (8.17). Quando $\text{Im}(\beta) = \beta_2 = 0$ (polos sobre o eixo real) tem-se:

$$y \sinh 2y = -x \sin 2x$$

substituindo-se em (8.16), vem:

$$\beta_1 = -\frac{x}{\sinh 2y} \left[\frac{\cos^2 2x + \cosh^2 2y}{\cosh 2y - \cos 2x} \right]$$

Escrevendo (8.8) como (8.23), tem-se para $\beta_2 = 0$ que $2xy = v_2$. Então para $v_2 > 0$ (potencial absorvivo) tem-se $\operatorname{sgn} x = \operatorname{sgn} y$, logo da expressão de β_1 (acima) tem-se $\beta_1 < 0$, ou seja os polos só podem ocorrer sôbre o eixo real negativo. Anàlogamente, para $v_2 < 0$ (potencial emissivo) tem-se $\operatorname{sgn} x = -\operatorname{sgn} y$, logo $\beta_1 > 0$ e os polos só podem ocorrer sôbre o eixo real positivo.

O Limite de Potenciais Fracos

É conveniente escrever as equações (8.8) e (8.10) nas formas:

$$\alpha^2 = \beta^2 + v_1 + i v_2 \quad (8.23)$$

$$\alpha^{-1} \sin \alpha = \pm 1/(v_1 + i v_2)^{\frac{1}{2}} \quad (8.24)$$

No caso de potenciais complexos é preciso definir o modo como $v = v_1 + i v_2$ tende a zero na equação (8.24). Considerando os dois casos possíveis: Para $\lim_{v_1 \rightarrow 0} \left\{ \lim_{v_2 \rightarrow 0} (v) \right\}$ (cai-se no caso de potenciais reais fracos ⁴) obtém-se de (8.23) e (8.24) que os polos β_n correspondentes a v neste limite são:

$$\beta_n = n\pi - i \infty; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8.25)$$

Para $\lim_{v_2 \rightarrow 0} \left\{ \lim_{v_1 \rightarrow 0} (v) \right\}$ (cai-se no caso de potencial imaginária-

rio puro), análogamente com uso de (8.23) e (8.24) obtém-se que os polos β_n são dados por:

$$\beta_n = (-1/4 + n) \pi - i \infty; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8.26)$$

O limite de $v_2 \rightarrow \infty$ ($v_1 = 0$)

Considerando em (8.23) e (8.24) que $v_1 = 0$ (potencial imaginário puro) e passando ao limite de $v_2 \rightarrow \infty$, obtém-se para os polos β , neste limite:

$$\beta = \pm \infty \mp i \infty. \quad (8.27)$$

Então os polos tendem ao bissetor do segundo ou quarto quadrante no infinito, para potenciais puramente absorvivos muito grandes.

Com auxílio destes resultados limites e com o cálculo numérico de alguns polos, apêndice A e B representamos graficamente o deslocamento dos polos de $S(\beta)$ no plano complexo β , para um poço de potencial complexo (fig^s. 3 e 4) e para um poço de potencial imaginário (fig. 2). O caso de poço de potencial real ⁴ (fig.1) é considerado como um caso particular, bastando fazer $v_2 = 0$ em (8.23) e (8.24).

9. POLOGIA

9.a) Limite dos polos de $S(\beta)$ para potenciais complexos, quando $\text{Im } V \rightarrow 0^-$.

Para $S(\beta)$ com potencial real, fig. 1, todo par simétrico de c-polos vem originar um a-polo e um b-polo, não sendo possível

determinar se é β_n ou β_{-n} que se transforma no a-polo ou no b-polo 4, 19, 34.

No caso de potenciais complexos, figuras 3 e 4, todos os polos de $S(\beta)$ tendem à localização dos polos de $S(\beta)$ para potenciais reais, dados pela figura 1, quando $\text{Im}(V) \rightarrow 0$. Para $S(\beta)$ com potencial complexo com a parte imaginária negativa (fig.4) no limite quando $\text{Im}(V) \rightarrow 0$, para valores convenientes da profundidade do poço, os polos β_{-n} tendem ao eixo imaginário positivo e os polos β_n tendem ao eixo imaginário negativo. Existe um comportamento simetricamente oposto, para os polos de $S(\beta)$ com potencial emissivo, quando $\text{Im}(V) \rightarrow 0$, em virtude da relação de simetria (6.19), então os polos β_n tendem ao eixo imaginário positivo e os polos β_{-n} tendem ao eixo imaginário negativo.

Ao se impor à matriz S a condição de causalidade de Schützer e Tiomno, seção 4, excluimos a possibilidade do limite quando $\text{Im } V \rightarrow 0^+$, porque a matriz S para potenciais complexos emissivos ($\text{Im } V > 0$) não é causal (seção 7). O que nos sugere, considerar os polos de $S(\beta)$ para potenciais reais como o limite dos polos de $S(\beta)$ para potenciais complexos absorptivos ($\text{Im } V < 0$) quando a parte imaginária do potencial tende a zero. Consequentemente os polos que irão formar os estados ligados (b-polos) serão os polos β_{-n} e os que irão formar os estados virtuais (a-polos) serão os β_n , quando a profundidade do poço atingir valor conveniente (fig. 4).

9.b) Características da função de onda assintótica para valores de k que são polos de $S_\ell(k)$.

A expressão assintótica de componente ℓ da solução radial de Schrödinger equação (1.13), incluindo a parte temporal é

$$\psi_\ell(r, \theta, t) \rightarrow \frac{1}{2ikr} P_\ell(\cos \theta)(2\ell+1) \left\{ S_\ell(k) e^{ikr} - (-1)^\ell \frac{1}{e^{-ikr}} \right\} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (9.1)$$

Se $S_\ell(k) = 0$, para $k = k_1 + ik_2$, $E = \frac{\hbar^2}{2m} [k_1^2 - k_2^2 + 2ik_1 k_2]$, então,

$$\psi_\ell(r, \theta, t) \rightarrow \frac{1}{2ikr} P_\ell(\cos \theta)(2\ell+1) e^{-i \left[k_1 r + (k_1^2 - k_2^2) \frac{\hbar}{2m} t \right]} \times e^{k_1 k_2 \frac{\hbar}{m} t} \times e^{k_2 r} \quad (9.2)$$

Onde o fator $\exp \left\{ -i \left[k_1 r + (k_1^2 - k_2^2) \frac{\hbar}{2m} t \right] \right\}$ representa uma função de onda incidente ($k_1 > 0$) ou emergente ($k_1 < 0$), de comprimento de onda k_1 , associada a um estado de energia positiva ($|k_1| > |k_2|$). O fator $\exp \left[k_1 k_2 \frac{\hbar}{m} t \right]$ mostra que o estado representado por esta função de onda, decai (cresce) para $\text{sgn } k_1 = -\text{sgn } k_2$ (para $\text{sgn } k_1 = \text{sgn } k_2$) na razão de $k_1 k_2 \frac{\hbar}{m}$ (cf. eq. 2.16).

Então, um zero de $S_\ell(k)$ para $k_1 > 0$ e $k_2 < 0$ (polo no segundo quadrante) a equação (9.2) tem as características de um sistema em aniquilação, i.e., uma onda incidente com intensidade decrescente no tempo. Tudo se passa como se o centro espalhador absorvesse as partículas incidentes. Para $k_1 < 0$ e $k_2 > 0$ (polo no primeiro quadrante) (9.2) representa uma onda emergente com intensidade crescente no tempo, como se existisse criação de partículas

pelo centro espalhador. Para $k_1 < 0$ e $k_2 > 0$ (polo no quarto quadrante), (9.2) representa uma onda emergente com intensidade de crescente no tempo, que é característica de um estado em decaimento. Para $k_1 < 0$ e $k_2 > 0$ (polo no terceiro quadrante) (9.2) representa uma onda incidente com intensidade crescendo exponencialmente com o tempo, característica de um estado de captura. Para $k_2 = 0$ e $k_1 \neq 0$ (polos no eixo real) a equação (9.2) caracteriza uma função de onda emergente se $k_1 < 0$ (polo no eixo real positivo) e incidente se $k_1 > 0$ (polo no eixo real negativo) com amplitude constante no tempo, ou seja, característica de partículas livres.

CAPÍTULO IV

10. CONCLUSÕES

10.1 - Definiu-se a matriz S , $S_\ell(k)$, de um espalhamento por potencial complexo, de alcance finito, esféricamente simétrico, como sendo a razão entre a amplitude de onda emergente pela amplitude de onda incidente (5.6). Mostramos (seção 5) que $S_\ell(k)$, assim definida, é uma função meromórfica no plano complexo dos momenta e apresenta singularidades essenciais no infinito.

10.2 - $S_\ell(k)$ assim definida, satisfaz a relação de simetria (6.6) $S_\ell(k) = [S_\ell(-k)]^{-1}$ (como no caso da matriz S de espalhamento para potenciais reais esféricamente simétricos (seção 3)), uma vez que esta relação entre polos e zeros é característica apenas da simetria da equação de Schrödinger para potenciais esféricamente simétricos. A relação (3.6), $S_\ell(k) = S_\ell^*(-k^*)$, derivada para potenciais reais, é generalizada pela equação (6.19), $S_\ell(k, V) = S_\ell^*(-k^*, V^*)$. A simetria dos polos de $S_\ell(k)$ em relação ao eixo imaginário é uma característica do espalhamento elástico unicamente, e a introdução de uma parte imaginária no potencial quebra esta simetria (veja fig. 3).

10.3 - A condição de causalidade de Schützer e Tioimo ^{20,21} é satisfeita para $S_\ell(k)$ quando $\text{Im}(V) < 0$ (potenciais absorptivos), no caso em que $\text{Im}(V) > 0$ (potenciais emissivos) esta condição

não é satisfeita (cf. seção 7).

10.4 - A matriz S , para espalhamento por um potencial esféricamente simétrico de alcance finito, quando é unitária satisfaz a condição de causalidade de Schützer e Tiomno. A recíproca não é verdadeira. Como exemplo, temos $S_{\mu}(k)$ de um espalhamento por um potencial complexo absorvivo, que satisfaz esta condição de causalidade mas não é unitária (cf. seção 7).

10.5 - Calculou-se explicitamente o deslocamento dos polos de $S(\beta)$ no plano complexo $\beta = k r_0$ (seção 8), para onda $\underline{\ell}(\ell=0)$, onde r_0 é o alcance do potencial, para um espalhamento por um poço de potencial complexo. Resumindo as características gerais destes polos:

- i) Existem infinitos polos todos fora do eixo imaginário.
- ii) Existem polos no segundo quadrante para potenciais absorvivos ($\text{Im}(V) < 0$) e polos no primeiro quadrante para potenciais emissivos ($\text{Im}(V) > 0$). Estes polos não ocorrem no caso de potenciais reais, uma vez que violariam a equação de continuidade³⁵. Estes polos têm uma função de onda característica de um estado de aniquilação (polos no segundo quadrante) ou de criação (polos no primeiro quadrante) (cf. seção 9).
- iii) Para n grande todos os β_n estão no semi-plano inferior e a distância, $|\beta_{n+1} - \beta_n|$, entre dois polos consecutivos se aproxima de π (cf. 8.20.e 8.21). A distância dos polos ao eixo real cresce logaritmicamente com n . Para valores grandes de n .

iv) A parte imaginária do potencial elimina a possibilidade de existir polos sobre o eixo imaginário. Não existindo, então, estados ligados nem estados virtuais. (cf. seção 8). É possível haver polos no eixo real negativo (positivo) de β para $\text{Im}(V) < 0$ ($\text{Im}(V) > 0$) que dão à função de onda assintótica (cf. seção 9b) as características de uma partícula livre incidente (partícula livre emergente).

10.6) A localização dos polos da matriz S de um espalhamento por potencial real pode ser considerada como o limite da localização dos polos da matriz S de um espalhamento por potencial complexo absorvivo, quando $\text{Im}(V) \rightarrow 0$, baseando-se em um requerimento de causalidade (cf. seção 9.a). Então, os polos que irão formar os estados ligados serão os do terceiro quadrante e os do quarto quadrante se transformam em polos que representam estados virtuais à medida que o nível do poço atinge valores convenientes ³⁴ (cf. fig. 4).

* * *

APÊNDICE ADETERMINAÇÃO DAS RAÍZES DA EQUAÇÃO (8.10)

Chamando $\alpha = x + iy$ e $A = a + ib$ a equação (8.10) é substituída pelo sistema de equações de variáveis reais:

$$\sin x \cosh y = \pm \frac{1}{\rho^2} (ax + by) \quad (A1)$$

$$\cos x \sinh y = \pm \frac{1}{\rho^2} (-bx + ay)$$

onde $\rho^2 = a^2 + b^2$.

Como o sistema (A1) é simétrico na troca $x \rightarrow -x$ simultaneamente com $y \rightarrow -y$, é suficiente determinar as raízes de (A1) na região $x > 0$. Por inspeção direta de (A1) tem-se que para $x = 0 \iff y = 0$, sendo a e $b \neq 0$. Pelo sistema (A1) verifica-se que, se trocamos o sinal de a e b simultaneamente o sistema não se altera; toma-se para o sinal de a o valor positivo, consequentemente $b > 0$ (cf. eq. 8.13).

Para $y > 0$, obtém-se o seguinte sistema equivalente a (A1):

$$\begin{aligned} (y-cx) \tan x &= (cy+bx) \tanh y \quad (I) \\ (-xb + ya &\neq 0) \end{aligned} \quad (A2)$$

$$\cosh y = \left| \frac{xa + yb}{\rho^2 \sin x} \right| \quad (II)$$

onde $c = b/a$. De (8.13), tem-se $0 < c < 1$. No caso em que $-xb + ya = 0$, para $y > 0$, as soluções são obtidas diretamente do sistema (A1). Então $x = (n + 1/2)\pi$ e $y = c(n + 1/2)\pi$, onde n é um inteiro positivo, tal que:

$$n = \frac{a}{b\pi} \operatorname{arc} \cosh \left\{ \frac{(n+1/2)\pi (a+b^2/a)}{a^2+b^2} \right\} - 1/2$$

Analogamente, para $y < 0$, usa-se o seguinte sistema equivalente a (A1):

$$(y - cx) \tan x = (cy + x) \tanh y \quad (I)$$

$$\sinh |y| = \left| \frac{xb + |y| a}{\rho^2 \cos x} \right| \quad (III)$$

$$(xa + yb \neq 0) \quad (A3)$$

No caso em que $xa + yb = 0$, a solução excluída de (A1) por (A3) é dada por: $x = n\pi$ e $y = -n\pi/c$, onde n é um inteiro positivo, que satisfaz a relação:

$$n = \frac{b}{a\pi} \operatorname{arc} \sinh \left\{ \frac{n\pi (b+a^2/b)}{a^2+b^2} \right\}$$

Para cada valor de a e b , isto é, do potencial (8.14), determina-se as soluções aproximadas dos sistemas (A2) e (A3) pelo método gráfico (fig. 5). Os dois primeiros programas do apêndice B, nos permite a construção gráfica das curvas (I) e (II), a solução aproximada de sistema (A3) pode ser determinada fazendo-se a interseção da curva (I) com a curva (II) estendida para região $y < 0$.

Conhecida as soluções aproximadas, determina-se as soluções exatas por iterações sucessivas e em seguida obtém-se os polos de $S(\beta)$ por meio de (8.8) tomando-se o sinal de β dado por (8.18) e (8.19) (estas operações estão todas incluídas no "programa final" do apêndice B).

APÊNDICE B

```

C
C   GRAFICO FUNÇÃO (Y-CX)TAN(X)=(CY+X)TANH(Y)
C   S. JOFFILY - CBPF 11 DEZ. 68
C
C
C
C
1   AEXF(Y)=FXP(-2.*Y)
2   TANH(Y)=(1.-AEXF(Y))/(1.+AEXF(Y))
   ETANF(X,Y,C,T)=T*(Y-C*X)-TANH(Y)*(C*Y+X)
1   READ2,V1,V2
2   FORMAT(2F14.8)
   PRINT 97,V1,V2
   RAD1=SQRT(V1*V1/4.+V2*V2/4.)
   A=SQRT(V1/2.+RAD1)
   B=V2/(2.*A)
   C=B/A
   PRINT3,A,B,C
3   FORMAT(1H ,2HA=,F14.8/1H ,2HB=,F14.8/1H ,2HC=,F14.8)
   TC=ATAN(C)
   PRINT9,TC
9   FORMAT(1H ,8HATAN(C)=,F8.3)
   PRINT6
6   FORMAT(1H ,2HAN,11X 1HX, 16X,1HY)
   DO 301 J=1,4
   AN=J-1
   DO 300 I=1,20
   AM=I
   X=(AN+AM/21.)*3.1415927
   T=SIN(X)/COS(X)
   Y=-100
   N=0
4   FT=ETANF(X,Y,C,T)
   IF(Y+100.)5,20,5
5   IF(FT)7,8,7
8   YFTS=Y
   PRINT100,AN,X,YFTS
   FTY=-FTY
   N=N+1
   GOTO 170
7   IF(FTY*FT)30,120,120
30  YFTS=(Y+YFT)/2.
   PRINT100,AN,X,YFTS
   N=N+1
120 YFT=Y
   FTY=FT
   GOTO 170
20  IF(FT)120,40,120
40  PRINT100,AN,X,Y
   GO TO 300

```

```
170 IF(ABS(Y)-10.)180,200,200
180 Y=Y+.1
    GO TO 4
200 Y=Y+1.
    IF(Y-100.)4,4,215
215 IF(N)300,220,300
220 PRINT99,AN,X
    GO TO 300
97  FORMAT(1H ,///10X,3HV1=,F14.8;10X,3HV2=,F14.8/)
99  FORMAT(1H ,F3.0,F14.3,28HN. EXISTE SOL. EM -100 A 100)
100 FORMAT(1H ,F3.0,2F14.3)
300 CONTINUE
301 CONTINUE
    GO TO 1
    END
```

```

C
C   GRAFICO FUNÇÃO (A*A+B*B)ABS(SIN(X))COSH(Y)-ABS(A*X+B*Y)=0
C   S. JOFFILY CBPF.- 13. DEZ. 68
C
C
C
1  READ2,V1,V2
2  FORMAT(2F14.8)
   PRINT 97,V1,V2
   RAD1=SQRT(V1*V1/4.+V2*V2/4.)
   A=SQRT(V1/2.+RAD1)
   B=V2/(2.*A)
   RHO=A*A+B*B
   C=B/A
   T=ATAN(C)
   C1=1./C
   PRINT5,A,B,C,C1,T
3  FORMAT(1H ,2HA=,F6.3,3X,2HB=,F6.3,3X,2HC=,F6.3,3X,4H1/C=,F6.3/1H,
18HATAN(C)=,F6.3//)
   PRINT4
4  FORMAT(1H ,10HINTERVALO ,8X,1HX,8X,1HY)
   DO 201 J=1,4
   INT=J-1
   AN=INT
   DO 200 I=1,20
   AM=I
   X=(AN+AM/21.)*3.1415927
   S=ABS(SIN(X))
   XA=X*A
   N=1
10 Y=.00000001
   EYP=EXP(Y)
   EYN=1./EYP
   COSHY=(EYP+EYN)/2.
   GO TO (14,15),N
14 CF=RHO*S*COSHY-XA-B*Y
   GO TO 16
15 CF=RHO*S*COSHY-ABS(XA-B*Y)
16 YA=Y
   CFA=CF
   IF(CF)22,21,22
21 PRINT100,INT,X,Y,N
   N=N+1
   GO TO (10,10,200),N
22 Y=Y+.1
23 EYP=EXP(Y)
   EYN=1./EYP
   COSHY=(EYP+EYN)/2.
   GO TO (25,26),N
25 CF=RHO*S*COSHY-XA-B*A
   GO TO 29
26 CF=RHO*S*COSHY-ABS(XA-B*Y)
29 IF(CF*CFA)30,31,32

```

```
30 Y=(Y+YA)/2.
31 PRINT100.INT,X,Y,N
   N=N+1
   GO TO (200,10,200),N
32 CFA=CF
   YA=Y
   IF(Y-100.)34,45,45
34 IF(Y-10.)35,36,36
35 Y=Y+.1
   GO TO 23
36 Y=Y+1.
   GO TO 23
45 GO TO (50,51),N
50 PRINT 98,INT,X
   N=N+1
   GO TO 10
51 PRINT 99,INT,X
200 CONTINUE
201 CONTINUE
   GO TO 1
97 FORMAT(1H ,///10X,3HV1=,F14.8,10X,3HV2=,F14.8/)
98 FORMAT(1H ,3X,13,8X,F8.3,33H N. EX. SOL. EM (0.0000001,100))
99 FORMAT(1H ,3X,13,8X,F8.3,35H N. EX. SOL. EM (-0.0000001,-100))
100 FORMAT(1H ,3X,13,8X,F8.3,1X,F8.3,2X,1H-,12)
   END
```

```

C
C   PROGRAMA FINAL
C   S. JOFFILY      C.B.P.F.   1/7/69
C
C
C   COSHF(Y)=(EXP(Y)+EXP(-Y))*0.5
C   SINHF(Y)=(EXP(Y)-EXP(-Y))*0.5
C   TANHF(Y)=SINHF(Y)/COSHF(Y)
C   V11=0.
C   V22=0.
1   READ2,V1,V2,X,Y
2   FORMAT(4F14.8)
   IF(V1)5,3,5
3   IF(V2)5,4,5
4   STOP
C
C   CALCULO DE A,B
C
5   RAD1=SQRT(V1*V1/4.+V2*V2/4.)
   A=SQRT(V1/2.+RAD1)
   B=V2/(2.*A)
   RO2=A*A+B*B
   C=B/A
   TC=ATAN(C)
   IF(V11-V1)14,13,14
13  IF(V22-V2)14,15,14
14  PRINT97,V1,V2
   PRINT98,A,B,C,TC
   PRINT99
15  V11=V1
   V22=V2
   PI=3.14159265
   AK=X/PI
   K=AK
   IJ=0
C
C   CALCULO DE X E Y POR ITERACAO
C
200 S=SIN(X)
   CO=COS(X)
   TANX=S/CO
   COH=COSHF(Y)
   EX2Y=EXP(-2.*Y)
   TANHY=(1.-EX2Y)/(1.+EX2Y)
   F=(Y-C*X)*TANX-(C*Y+X)*TANHY
   CO2=CO*CO
   FX=-C*TANX+(Y-C*X)/CO2-TANHY
   SECHY2=1.-TANHY*TANHY
   FY=TANX-C*TANHY-(C*Y+X)*SECHY2
   SINHY=SQRT(COH*COH-1.)
   IF(Y)251,201,201

```

```

201 G=RO2*ABS(S)*COH-A*X-B*Y
    IF(TANK) 203,204,204
203 SINAL=-1
    GO TO 205
204 SINAL=1.
205 GX=RO2*COH*SINAL*ABS(CO)-A
    GY=RO2*ABS(S)*SINHY-B
209 DELTA=FX*GY-GX*FY
    DELTA1=F*GY-G*FY
    DELTA2=F*GX-G*FX
    XI=X-DELTA1/DELTA
    YI=Y+DELTA2/DELTA
    IJ=IJ+1
    IF(IJ-1) 206,206,208
206 X=XI
    Y=YI
    FI=F
    GI=G
    IF(IJ-20)200,200,215
208 IF(ABS(F)-0.0001)210,210,206
210 IF(ABS(G)-0.0001)900,900,206
215 PRINT95,K,X,Y,IJ
    GO TO 1
251: SIH= SINHY
    G=RO2*ABS(CO)*SIH-X*B-ABS(Y)*A
    IF(TANK)253,254,254
253 SINAL=1.
    GO TO 255
254 SINAL=-1.
255 GX=SIH*RO2*SINAL*ABS(S)-B
    GY=-RO2*ABS(CO)*COH+A
    GO TO 209
C
C   CALCULO DOS POLOS - BETA 1 (EIX. REAL)  BETA 2 (EIX. IMAG.)
C
900 DOISY=2.*Y
    TERMO=Y*SINH(F*DOISY)+X*SIN(2.*X)
    IF(TERMO)901,902,902
901 SIGNB2=1.
    GO TO 903
902 SIGNB2=-1.
903 X2Y2=X*X-Y*Y
    A2C=A*A*(1.-C)
    TERAD=X2Y2-A2C
    PARENT=X*Y-A*A*C
    TERADR=TERAD*TERAD+4.*PARENT*PARENT
    RAIZIN=SQRT( TERADR)
    BETA2=SIGNB2*SORT((RAIZIN-TERAD)/2.)
    BETA1=PARENT/BETA2
    PRINT100,K,X,Y,IJ,BETA1,BETA2
    GO TO 1

```

```
95  FORMAT(1H ,10X,I5,10X,2(F12.5,4X),10X,I5)
97  FORMAT(1H ,///10X,3HV1=,F14.8,10X,3HV2=,F14.8/)
98  FORMAT(1H ,2HA=,F14.8,4X,2HB=,F14.8,4X,2HC=,F14.8,4X,8HATAN(C)=,
1F14.8//)
99  FORMAT(1H ,10X, 9HINTERVAL0,12X,1HX,15X,1HY,16X,8HTTERRACAO,15X,
16HBETA 1,10X,6HBETA 2/)
100 FORMAT(1H ,2(10X,I5,10X,F12.5,4X,F12.5))
    END
```

APÊNDICE CDerivação das equações (8.20) e (8.21)

De (8.8), tem-se:

$$\alpha = \pm \sqrt{\beta^2 + A^2} \quad (C.1)$$

expandindo em série:

$$\alpha = \pm \left[\beta + \frac{1}{2\beta} A^2 + \dots \right] \quad (C.2)$$

quando $|\beta| \rightarrow \infty$ e A é finito, tem-se:

$$\alpha \approx \pm \beta \quad (C.3)$$

que substituído na equação (8.8) ela só será satisfeita no infinito se β_2 é negativo (semi-plano inferior). Levando-se (C.3) em (8.10), obtem-se:

$$\sin \beta = \pm \frac{1}{A} \beta \quad (C.4)$$

$$\therefore e^{i\beta} - e^{-i\beta} = \pm \frac{2i}{A} \beta$$

chamando:

$$\omega = i\beta \quad (C.5)$$

vem:

$$e^{\omega} - e^{-\omega} = \pm \frac{2}{A} \omega$$

onde, $\omega = -\beta_2 + i\beta_1$ $e^{|e^{-\omega}|} = |e^{\beta_2 - i\beta_1}| = e^{\beta_2} \xrightarrow{\beta_2 \rightarrow -\infty} 0$

desprezando a quantidade infinitesimal $e^{-\omega}$:

$$e^{\omega} = \pm \frac{2}{A} \omega \quad (C.6)$$

Para uma raiz arbitrária, $\omega = \omega_1 + i\omega_2$ onde $\omega_1 = \text{Re}(\omega)$ e $\omega_2 = \text{Im}(\omega)$, desta equação tem-se:

$$|e^{\omega}| = \frac{2}{|A|} |\omega|$$

ou

$$e^{\omega_1} = \frac{2}{|A|} \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2} \quad (\text{C.7})$$

como

$$|\omega| = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2} \longrightarrow +\infty$$

então e^{ω_1} também tende a $+\infty$ e conseqüentemente ω_1 . Reescrevendo (C.7) na forma:

$$\left(\frac{\omega_2}{e^{\omega_1}}\right)^2 = \frac{|A|^2}{2^2} - \left(\frac{\omega_1}{e^{\omega_1}}\right)^2$$

e considerando que $\frac{\omega_2}{e^{\omega_1}} \rightarrow 0$ o quando $\omega_1 \rightarrow +\infty$, concluímos que vale a seguinte relação assintótica entre a parte real e imaginária de ω :

$$|\omega_2| \approx \frac{|A|}{2} e^{\omega_1} \quad (\text{C.8})$$

que reescrita em termos de β , fica:

$$|\beta_1| \approx \frac{|A|}{2} e^{-\beta_2} \quad (\text{C.9})$$

Ou seja, para $\beta \rightarrow \infty$ e A finito, β_1 e β_2 tendem a infinito onde β_1 é da ordem de $e^{-\beta_2}$.

Separando (C.6) em sua parte real e imaginária:

$$e^{\omega_1} \cos \omega_2 = \pm 2 \left\{ \frac{a\omega_1 + b\omega_2}{a^2 + b^2} \right\} \quad (\text{C.10a})$$

$$e^{\omega_1} \sin \omega_2 = \pm 2 \left\{ \frac{a\omega_2 - b\omega_1}{a^2 + b^2} \right\} \quad (\text{C.10b})$$

onde $a = \text{Re}(A)$ e $b = \text{Im}(A)$.

Dividindo (C.10b) por (C.10a), obtem-se:

$$\tan \omega_2 = \frac{a\omega_2 - b\omega_1}{a\omega_1 + b\omega_2} . \quad (\text{C.11})$$

Foi mostrado acima que as partes reais das raízes da eq. (C.6) tendem à $+\infty$ quando $\omega \rightarrow \infty$. Logo, para raízes da eq. (C.6) com valores absolutos muito grande, se pode assumir que $\omega_1 > 0$. Examinando primeiro as raízes para as quais $\omega_2 > 0$: De (C.11), notando que $\frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{2\omega_1}{|A|e^{+\omega_1}} \xrightarrow{\omega_1 \rightarrow \infty} 0$, obtem-se:

$$\tan \omega_2 = \frac{a}{b} .$$

Significando que:

$$\omega_2 \approx \arctan \frac{a}{b} + n\pi - \epsilon_n ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{C.12})$$

onde $\epsilon_n \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$.

De (C.12) e (C.10a) vem:

$$e^{\omega_1} \cos \left[\arctan \left(\frac{a}{b} \right) + n\pi - \epsilon_n \right] = \pm \frac{2}{|A|^2} (a\omega_1 + b\omega_2)$$

donde,

$$e^{\omega_1} \left\{ \cos \left[\arctan \left(\frac{a}{b} \right) + n\pi \right] \cos \epsilon_n + \sin \left[\arctan \left(\frac{a}{b} \right) + n\pi \right] \sin \epsilon_n \right\} =$$

$$= \pm \frac{2}{|A|^2} (a\omega_1 + b\omega_2).$$

Considerando que $\sin \epsilon_n \approx \epsilon_n$ e $\cos \epsilon_n \approx 1$, pois $\epsilon_n \approx 0$ quando $\omega_1 \rightarrow \infty$, teremos:

$$e^{\omega_1} \left\{ \pm \cos \left[\arctan \left(\frac{a}{b} \right) \right] \pm \sin \left[\arctan \left(\frac{a}{b} \right) \right] \cdot \epsilon_n \right\} = \pm \frac{2}{|A|^2} (a\omega_1 + b\omega_2)$$

$$\therefore e^{\omega_1} (b + a \epsilon_n) = \frac{2}{|A|} (a\omega_1 + b\omega_2)$$

usando (C.8); vem:

$$\epsilon_n \approx \frac{\omega_1}{\omega_2} \approx \frac{\log(2\omega_2/|A|)}{\omega_2}. \quad (\text{C.13})$$

Da relação assintótica (C.12) de ω_2 , temos que: $\omega_2 = n\pi$, logo

$$\epsilon_n = \frac{\log(2n\pi/|A|)}{n\pi} \text{ que substituído em (C.12), nos dá:}$$

$$\omega_2 \approx \arctan \frac{a}{b} + n\pi - \frac{\log(2n\pi/|A|)}{n\pi} \quad (\text{C.14})$$

e de (C.8), vem:

$$\omega_1 \approx \log(2\omega_2/|A|) =$$

$$= \log \left[\frac{2}{|A|} \arctan \left(\frac{a}{b} \right) + \frac{2n\pi}{|A|} - \frac{2 \log(2n\pi/|A|)}{|A|n\pi} \right] =$$

$$= \log \left[\frac{2n\pi}{|A|} \left[\frac{1}{n\pi} \arctan \left(\frac{a}{b} \right) + 1 - \frac{1}{n^2 \pi^2} \log(2n\pi/|A|) \right] \right] =$$

$$(\text{C.15})$$

$$= \log(2n\pi/|A|) + \log \left[1 + \frac{1}{n\pi} \arctan \left(\frac{a}{b} \right) - \frac{1}{n^2 \pi^2} \log(2n\pi/|A|) \right]$$

usando a aproximação:

$$\log(1 + \xi) = \xi, \text{ quando } \xi \rightarrow 0;$$

$$\text{onde } \xi = \frac{1}{n\pi} \arctan \left(\frac{a}{b} \right) - \frac{1}{n^2 \pi^2} \log(2n\pi/|A|)$$

vem:

$$\omega_1 \approx \log(2n\pi/|A|) + \frac{1}{n\pi} \arctan \left(\frac{a}{b} \right). \quad (\text{C.16})$$

Para determinar as raízes quando $\omega_2 < 0$, basta reescrever as eq^s. (C.10a) e (C.10b) na forma:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} e^{i\omega_1} \cos|\omega_2| &= \pm \left\{ \frac{a\omega_1 - b|\omega_2|}{a^2 + b^2} \right\} \\ \frac{1}{2} e^{i\omega_1} \sin|\omega_2| &= \pm \left\{ \frac{a|\omega_2| + b\omega_1}{a^2 + b^2} \right\} \end{aligned}$$

então:

$$\tan |\omega_2| = -\frac{a}{b}, \text{ i.e.,}$$

$$|\omega_2| = \arctan \left(\frac{a}{b} \right) + n\pi - \epsilon_n$$

onde n são inteiros positivos. Procedendo como no caso anterior ($\omega_2 > 0$), obtém-se para $\omega_2 < 0$:

$$\omega_2 \approx \arctan \left(\frac{a}{b} \right) - n\pi + \frac{\log(2n\pi/|A|)}{n\pi} \quad (\text{C.17})$$

Reescrevendo os resultados (C.14), (C.16) e (C.17) em termos

de β , considerando (C.5), teremos:

$$\beta_1 \approx \arctan\left(\frac{a}{b}\right) \pm n\pi \mp \frac{\log(2n\pi/|A|)}{n\pi}. \quad (\text{C.18})$$

$$\beta_2 \approx -\log(2n\pi/|A|) - \frac{1}{n\pi} \arctan\left(\frac{a}{b}\right). \quad (\text{C.19})$$

APÊNDICE D

ANALITICIDADE DE $u_l(k,r)$ e $u'_l(k,r)$

Levinson ³⁶ mostrou que $u_0(k,r)$, solução de uma equação diferencial do tipo (5.1) para $l = 0$, satisfazendo condição de contôrno $u_0(k,0) = 0$ é uma função inteira para todo k . Barut e Ruei ³² mostraram que $u_l(k,r)$, para $l \neq 0$, é uma função analítica no semi-plano superior dos momenta k complexo, para potenciais que satisfazem a condição:

$$\int_0^{\infty} r |V(r)| dr < \infty,$$

resultado que vale também para potenciais complexos (op. cit.).

Nêste apêndice, mostraremos que para um potencial que satisfaz a desigualdade acima, $u_l(k,r)$ solução de eq. (5.1), com a condição de contôrno $u_l(k,0) = 0$ é uma função analítica em todo o plano complexo k . Ou seja, $u_l(k,r)$, é uma função inteira de k . Então, seguirá de imediato que $u'_l(k,r)$ também é uma função inteira de k .

A equação radial de Schrödinger (5.1):

$$u_l''(k,r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - V(r) \right] u_l(k,r) = 0, \quad (D.1)$$

satisfazendo a condição de contôrno $u_l(k,0) = 0$, onde assumimos que k seja complexo desde o início e $V(r)$ também complexo, pode ser escrita na forma integral:

$$u_\ell(k, r) = \frac{\hat{j}_\ell(k, r)}{k^{\ell+1}} - \frac{1}{k} \int_0^r g_\ell(k, r, \zeta) V(\zeta) u_\ell(k, \zeta) d\zeta \quad (D.2)$$

onde $V(\zeta) = V_1(\zeta) + i V_2(\zeta)$ e

$$g_\ell(k, r, \zeta) = \hat{j}_\ell(kr) \hat{\eta}_\ell(k, \zeta) - \hat{j}_\ell(k\zeta) \hat{\eta}_\ell(kr) \quad (D.3)$$

onde

$$\hat{j}_\ell(Z) = Z j_\ell(Z)$$

$$\hat{\eta}_\ell(Z) = Z \eta_\ell(Z)$$

sendo $j_\ell(Z)$ e $\eta_\ell(Z)$ as funções esféricas de Bessel definidas como na seção 1.

O que pode ser verificado por diferenciação de (D.2) e usando-se a relação Wronskiana

$$\hat{j}_\ell(Z) \left[\frac{d}{dZ} \hat{\eta}_\ell(Z) \right] - \left[\frac{d}{dZ} \hat{j}_\ell(Z) \right] \hat{\eta}_\ell(Z) = 1$$

e com a condição de contorno

$$u_\ell(k, r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} \hat{j}_\ell(kr) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} \frac{(kr)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} .$$

A fato do potencial ser de alcance finito assegura que a equação (D.1) possui soluções assintóticas proporcionais à $\sin \left[kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell(k) \right]$ ³² (cf. eq. 1.9).

Para mostrar que $u_\ell(k, r)$ definida por (D.2) é uma função inteira de k , para qualquer r fixo, usaremos as seguintes desigualdades ³⁷:

$$|\hat{j}_\ell(kr)| \leq C e^{|k_2|r} \frac{|kr|^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}}, \quad r \geq 0 \quad (D.4)$$

$$|g_{\ell}(k, r, \zeta)| \leq C e^{|k_2|(r-\zeta)} \frac{(1+|k\zeta|)^{\ell}}{|k\zeta|^{\ell}} \cdot \frac{|kr|^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}}, \quad 0 \leq \zeta < r \quad (D.5)$$

onde $k_2 = \text{Im}(k)$.

Considerando a sequência $u_{\ell}^n(k, r)$, onde $u_{\ell}^0(k, r) = 0$ e

$$u_{\ell}^n(k, r) = \frac{\hat{J}_{\ell}(kr)}{k^{\ell+1}} - \frac{1}{k} \int_0^r g_{\ell}(k, r, \zeta) V(\zeta) u_{\ell}^{n-1}(k, \zeta) d\zeta, \quad (D.6)$$

obtemos, usando a desigualdade (D.4),

$$|u_{\ell}^1(k, r) - u_{\ell}^0(k, r)| = \left| \frac{\hat{J}_{\ell}(kr)}{k^{\ell+1}} \right| \leq \frac{C e^{|k_2|r} r^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}}.$$

Analogamente, por (D.6) e usando a desigualdade (D.5),
obtem-se:

$$\begin{aligned} |u_{\ell}^2(k, r) - u_{\ell}^1(k, r)| &= \left| \frac{\hat{J}_{\ell}(kr)}{k^{\ell+1}} - \frac{1}{k} \int_0^r g_{\ell}(k, r, \zeta) V(\zeta) u_{\ell}^1(k, \zeta) d\zeta - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\hat{J}_{\ell}(kr)}{k^{\ell+1}} + \frac{1}{k} \int_0^r g_{\ell}(k, r, \zeta) V(\zeta) u_{\ell}^2(k, \zeta) d\zeta \right| = \\ &= \left| \frac{1}{k} \int_0^{\infty} g_{\ell}(k, r, \zeta) V(\zeta) [u_{\ell}^1(k, \zeta) - u_{\ell}^2(k, \zeta)] d\zeta \right| \leq \\ &\leq C^2 e^{|k_2|r} \frac{r^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}} \int_0^r \frac{\zeta |V(\zeta)|}{1+|k\zeta|} d\zeta \end{aligned}$$

chamando

$$B(r) = \int_0^r \frac{\zeta |V(\zeta)|}{1+|k\zeta|} d\zeta < \int_0^{\infty} \frac{\zeta |V(\zeta)|}{1+|k\zeta|} d\zeta \quad (D.7)$$

que deve ser finito, daí a necessidade de impor ao potencial a condição:

$$\int_0^{\infty} \zeta |V(\zeta)| d\zeta < \infty$$

Então,

$$|u_{\ell}^2(k, r) - u_{\ell}^1(k, r)| \leq c^2 e^{|k_2|r} \frac{r^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}} \cdot B(r)$$

Repetindo-se o processo mais uma vez, teremos:

$$\begin{aligned} |u_{\ell}^3(k, r) - u_{\ell}^2(k, r)| &= \frac{1}{k} \int_0^r g_{\ell}(k, r, \zeta) V(\zeta) [u_{\ell}^1(k, \zeta) - u_{\ell}^2(k, \zeta)] d\zeta \leq \\ &\leq \frac{c^3 e^{|k_2|r} r^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}} \int_0^r \frac{\zeta |V(\zeta)|}{1+|k\zeta|} B(\zeta) d\zeta \end{aligned}$$

usando-se (D.7), obtem-se:

$$|u_{\ell}^3(k, r) - u_{\ell}^2(k, r)| \leq \frac{c^3 e^{|k_2|r} r^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}} \int_0^r d[B(\zeta)] B(\zeta)$$

logo,

$$|u_{\ell}^3(k, r) - u_{\ell}^2(k, r)| \leq \frac{c^3 e^{|k_2|r} r^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}} \cdot \frac{[B(r)]^2}{2!}$$

Pelo método da indução, supondo que vale a relação

$$|u_{\ell}^{n-1}(k, r) - u_{\ell}^{n-2}(k, r)| \leq \frac{c^{n-1} e^{|k_2|r} r^{\ell+1}}{(1+|kr|)^{\ell+1}} \cdot \frac{[B(r)]^{n-2}}{(n-2)!}$$

teremos

$$|u_{\ell}^n(k,r) - u_{\ell}^{n-1}(k,r)| \leq \frac{c^n e^{|k_2|r} r^{\ell+1}}{(1 + |kr|)^{\ell+1}} \cdot \frac{|B(r)|^{n-1}}{(n-1)!}$$

Então a sequência $u_{\ell}^n(k,r)$ converge absolutamente para o limite $u_{\ell}(k,r)$, para qualquer r finito e qualquer região k finita. Cada $u_{\ell}^n(k,r)$ é uma função analítica desde que envolve apenas funções analíticas $\hat{f}_{\ell}(k,r)$ e $g_{\ell}(k,r,\zeta)$. Logo o limite $u_{\ell}(k,r)$ é uma função analítica em todo o plano complexo k , isto é, é uma função inteira em k .

Para mostrar que $u_{\ell}^i(k,r)$ também é uma função inteira de k , basta derivar em relação a \underline{r} a equação (D.2) e usa-se, como foi mostrado acima, que $u_{\ell}(k,r)$ é uma função inteira de k . Então,

$$u_{\ell}^i(k,r) = \frac{\hat{f}_{\ell}(kr)}{k^{\ell+1}} - \frac{1}{k} \int_0^r \frac{\partial g_{\ell}(k,r,\zeta)}{\partial r} v(\zeta) u_{\ell}(k,\zeta) d\zeta \quad (D.8)$$

pois $g_{\ell}(k,r,r) = 0$, (cf. eq. D3).

Logo $u_{\ell}^i(k,r)$, dado por (D.8), será uma função inteira de k , uma vez que envolve apenas funções inteiras.

LEGENDAS PARA AS FIGURAS

Fig. 1 - Deslocamento dos polos de $S(\beta)$, $l=0$, no plano complexo $\beta = kr_0$ (cf. ref. 4). Para $v = v_1$ (potencial real) variando de 0 a $+\infty$. Os valores de v_1 estão representados ao lado dos polos correspondentes. Os polos estão numerados em função de suas posições limites para $v_1 \rightarrow 0$, i.e., $\beta_n = (\beta_1)_n - i(\beta_2)_n$, onde $\lim_{v_1 \rightarrow 0} \beta_n = n\pi - i0$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Trajetórias dos a-polos (anti-polos): Quando v_1 cresce de 0 (partícula livre) a ∞ (poço de potencial infinito) existe um a-polo que se move de $-i0$ em direção à origem se transforma num b-polo e continua se movendo para $i0$. Trajetória dos c-polos (polos complexos): Os pares de c-polos, $\beta_{\pm n}$, $n \geq 1$ são simétricos em relação ao eixo imaginário. Eles saem assintoticamente da reta $\text{Re}(\beta) = \pm n\pi$ para $v_1 \rightarrow 0$ e se movem em direção ao eixo real, até atingir a reta $\text{Im}(\beta) = -1$, então passam a se mover em direção ao eixo imaginário onde os pares simétricos dos c-polos se encontram no ponto $\beta = -1$, surgindo aí um polo duplo. À medida que v_1 continua crescendo o polo duplo se separa num par de a-polos que se movem em direções opostas, um deles vai a $-i0$ e o outro à $+i0$ formando um novo b-polo.

Fig. 2 - Deslocamentos dos polos de $S(\beta)$, $l=0$, no plano complexo $\beta = kr_0$, para $v = -iv_2$ (potencial imaginário puro). Os valores de v_2 estão representados junto aos polos correspondentes. Cada trajetória é numerada, segundo a sua posição limite quando $v_2 \rightarrow 0$, i.e., $\lim_{v_2 \rightarrow 0} \beta_{\pm n} = (-1/4 + n)\pi - i0$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, (cf. eq. (8.26). Para valores pequenos de v_2 (limite de potencial fracamente absorvivo) os polos saem assintoticamente pela direita (para $\text{Re}(\beta) > 0$) e pela esquerda (para $\text{Re}(\beta) < 0$) da reta $\text{Re}(\beta) = (-1/4 + n)\pi$.

Para valores grandes de n a tendência à esta reta é mais demorada. A medida que v_2 cresce os polos β_{+n} caminham em direção ao eixo real, os polos β_{-n} cruzam o eixo bissetor do quarto quadrante e antes de atingirem o eixo real voltam em direção ao eixo bissetor e tendem por cima a este eixo quando $v_2 \rightarrow \infty$, os polos β_{-n} vão até o eixo real negativo e cada polo cruza este eixo num ponto do intervalo $[(-1/4+n)\pi, (-1/4+n-1)\pi]$. À medida que v_2 continua crescendo estes polos se aproximam do eixo bissetor do segundo quadrante e tendem assintoticamente a este eixo por baixo, quando $v_2 \rightarrow \infty$ (cf. eq. 8.27).

Fig. 3 - Deslocamento dos polos de $S(\beta)$, $l=0$, no plano complexo $\beta = kr_0$, para potenciais do tipo $v = 0.01 + iv_2$ com v_2 variando de 0 a $+\infty$. Os polos representados por um círculo envolvendo um \times , \otimes , são os polos de $S(\beta)$ para potencial real ($v_2 = 0$) e os representados por um ponto cheio, \bullet , são polos de $S(\beta)$ para potenciais complexos ($v_2 \neq 0$). Os valores de v_2 estão assinalados ao lado dos polos correspondentes. Quando $v_2 \rightarrow 0$ os polos tendem à localização dos polos para potencial real $v = v_1$ ($v_1 = 0.01$, neste caso) que são simétricos em relação ao eixo imaginário, o polo que tende ao eixo imaginário se desloca no semi-plano $\text{Re}(\beta) < 0$. Para valores de v_2 pequenos os polos β_{+n} se deslocam pouco da posição para potencial real, pela esquerda dos mesmos, quebrando assim a simetria entre os β_{+n} e os β_{-n} . Quando v_2 continua crescendo este afastamento é cada vez maior e os polos se deslocam em direção ao eixo real. Para $v_2 > v_1$ os polos tendem ao comportamento do tipo de um imaginário puro (cf. fig. 2). β_{-n} passa para o segundo quadrante e se aproxima assintoticamente, por baixo do eixo bissetor quando $v_2 \rightarrow +\infty$. Os polos β_{-n} nunca

deixam o quarto quadrante e tendem assintoticamente ao eixo bissetor por cima para $v_2 \rightarrow +\infty$.

Fig. 4 - Deslocamento dos polos de $S(\beta)$, $l = 0$, no plano complexo $\beta = kv_0$, para $v = v_1(1 + i\eta)$ onde $\eta = v_2/v_1$. Os valores de v_1 estão assinalados junto aos polos correspondentes. Estão representados apenas os polos $\beta_{\pm 1}$, i.e., $n = \pm 1$. Os valores de η estão assinalados em baixo das respectivas trajetórias. Para $\eta = 0$ têm-se a trajetória dos polos para potenciais reais (cf. fig. 1). Para $\eta = 0.1$ os polos β_{-1} se afastam muito pouco da trajetória de $\eta = 0$, os polos β_{+n} acompanham o eixo imaginário negativo e os β_{-n} acompanham o eixo imaginário positivo. A medida que η cresce as novas trajetórias estarão mais afastadas da trajetória para potencial real, sendo que este afastamento é mais pronunciado para os valores grandes de v_1 . Quando $\eta \gg 1$ as trajetórias tendem à dos polos para potenciais puramente imaginários (cf. fig. 2).

Fig. 5 - Comportamento das curvas (I), (II) e (III) (cf. eqs. A2 e A3). A curva (I) está traçada em linha cheia apresentando as seguintes características: $y = +\infty$ nos pontos $x = \arctan c + n\pi$, ($n = 0, 1, 2, \dots$). Para $x = (n + 1/2)\pi$ a curva (I) cruza a reta $y = cx$ e vai a zero em $x = n\pi$. Para os valores de $y < 0$ a curva (I) apresenta dois ramos que se encontram no ponto $\xi_n(x, y)$, um ramo decresce de $x = n\pi$ e $y = 0$ até o ponto $\xi_n(x, y)$, o outro ramo vem de $x = \arctan(-c) + n\pi$ e $y = -\infty$ cruza a reta $y = -x/c$ no ponto $x = n\pi$ e continua crescente até o ponto $\xi_n(x, y)$. Este ponto, $\xi_n(x, y)$, está sempre na região $x: (n\pi, (n+1/2)\pi)$ e $y: (0, -x/c)$. A curva (II) definida na região $y > 0$ apresenta o seguinte comportamento: $y = +\infty$ em $x = n\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) indo cruzar o eixo dos x em $x = \zeta_n$, se a seguinte desigualdade for

satisfeita: $|\sin x| > \frac{a}{\rho^2} |x|$, onde ζ_n é dado pelas soluções da equação $|\sinh \zeta| = \frac{a}{\rho^2} |\zeta|$. Se x não satisfaz a desigualdade acima a curva (II) apresenta um mínimo em cada intervalo $x: (n\pi, (n+1)\pi)$. A curva (III) está traçada em linhas pontilhadas na região $y < 0$. Apresenta um comportamento parecido com o da curva (II), sem entretanto cruzar o eixo dos x . Para $x = (n+1/2)\pi$, $n = 0, 1, 2, \dots$, y tende a $-\infty$, passando por um máximo entre cada dois valores consecutivos de n .

* * *

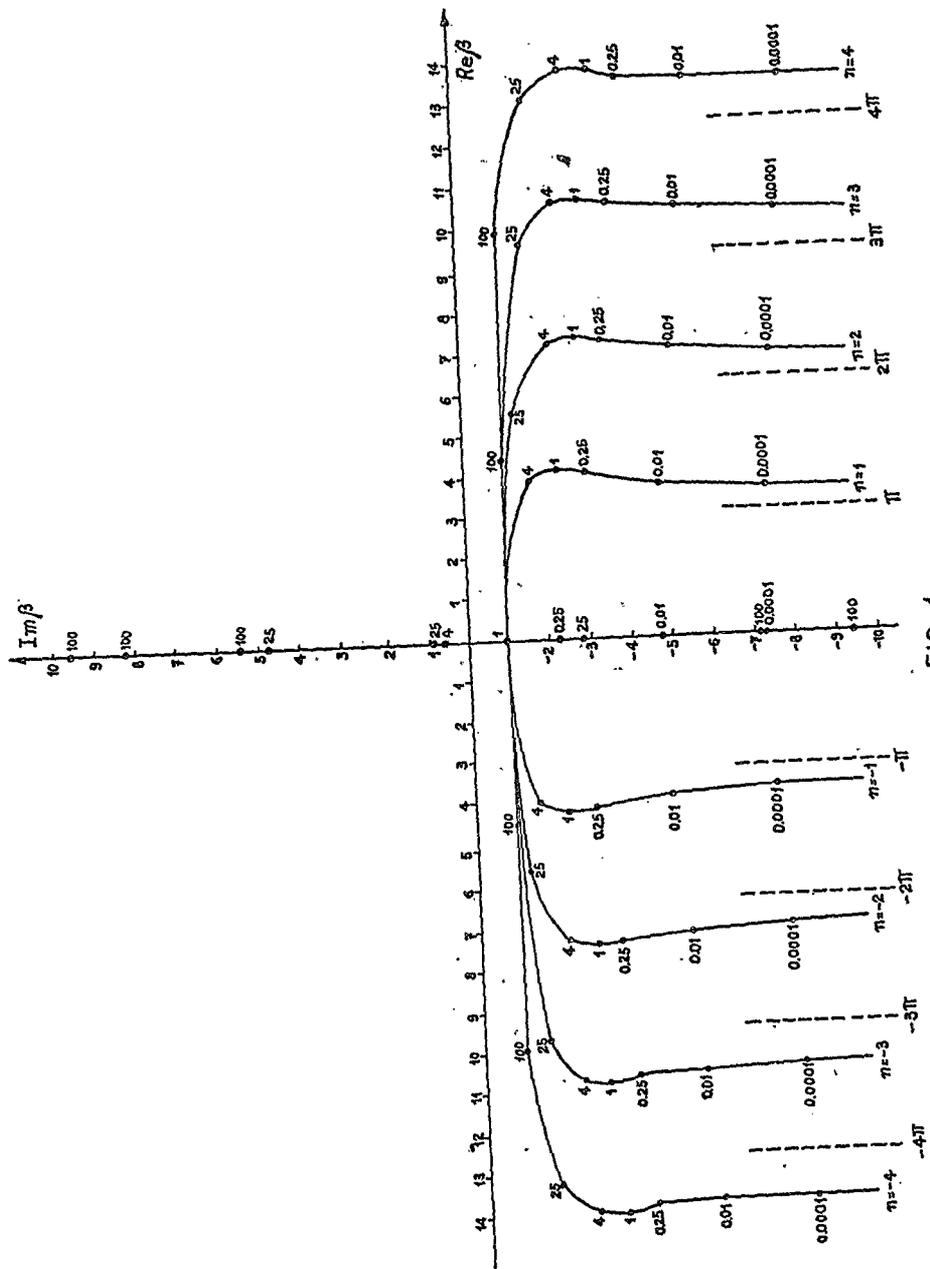


FIG. 1

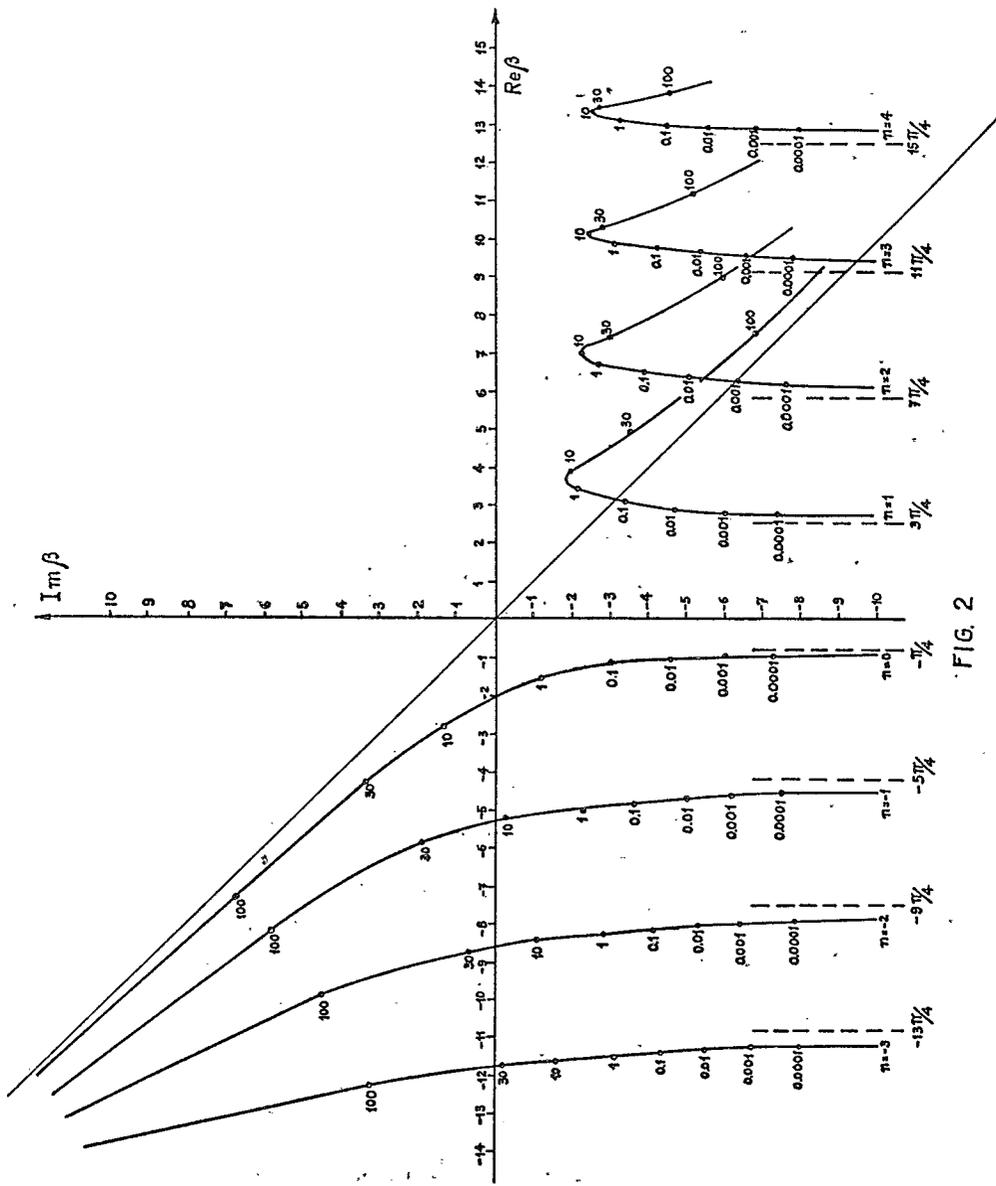


FIG. 2

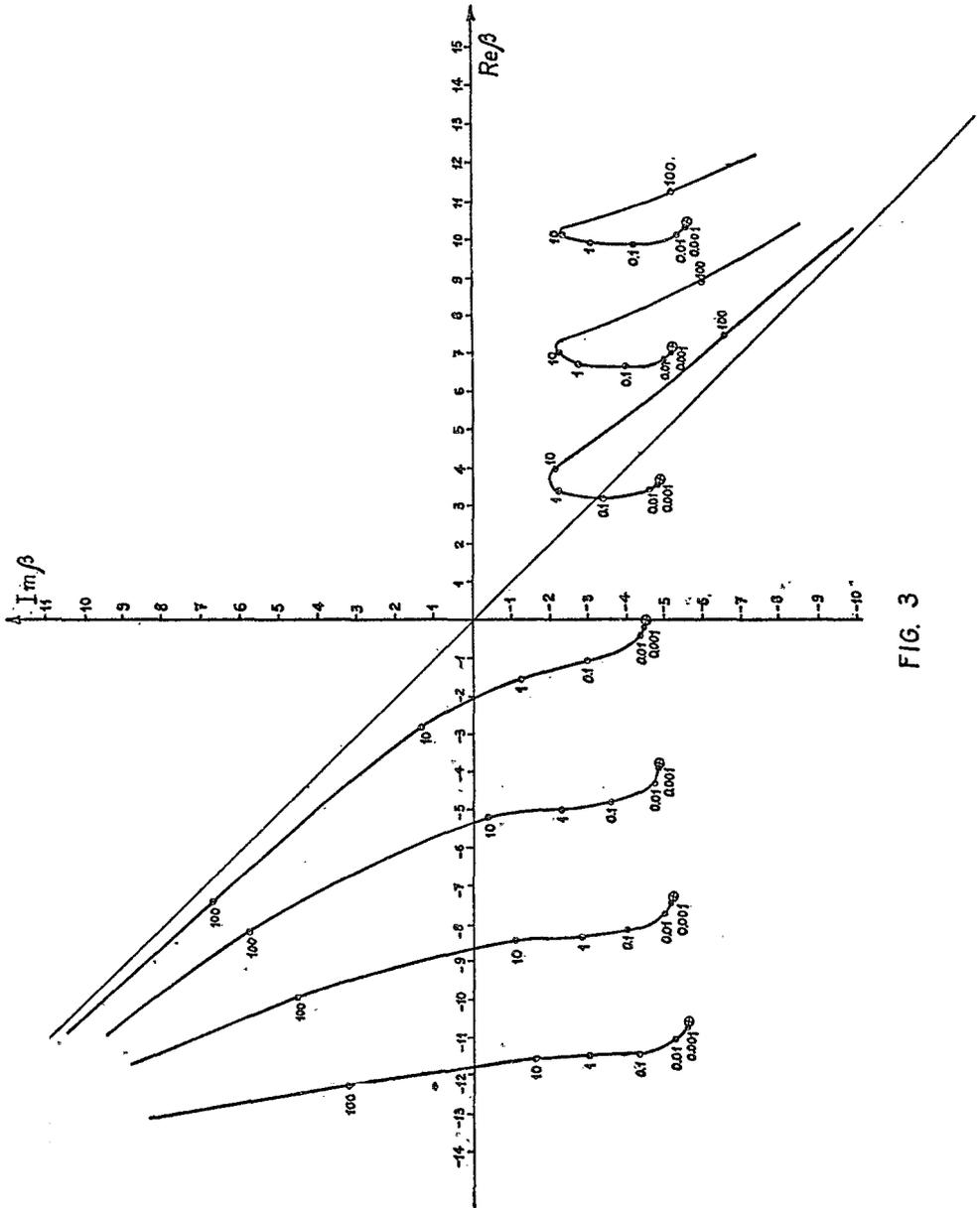


FIG. 3

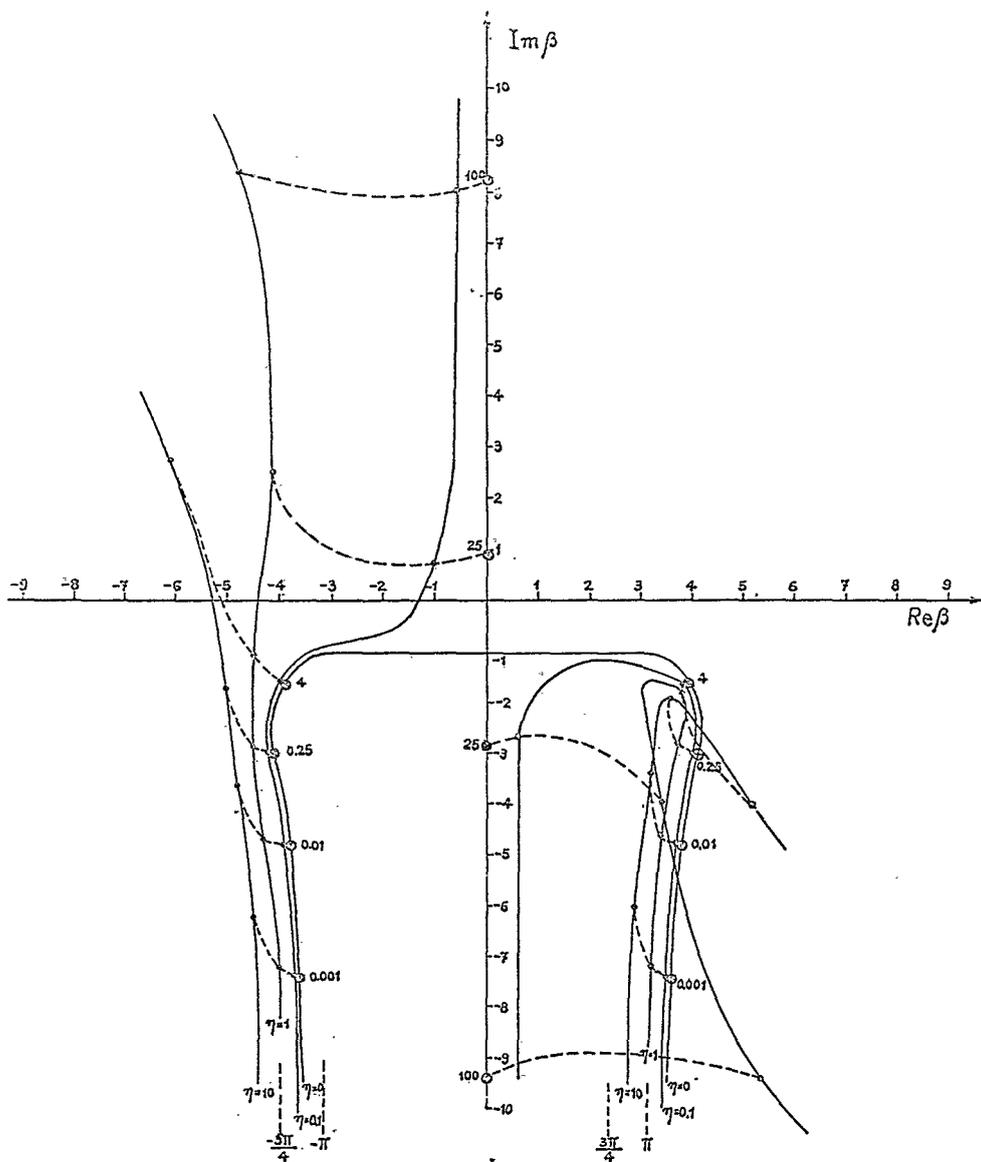


FIG. 4

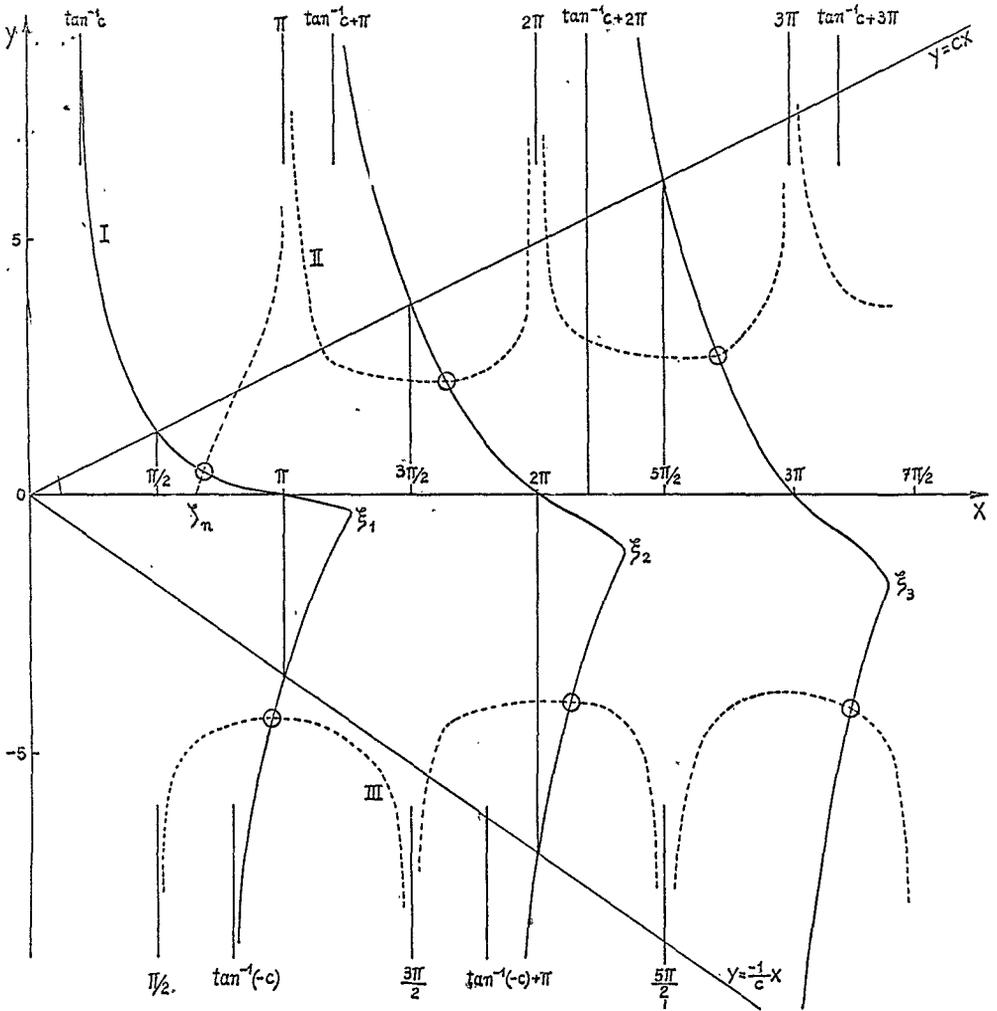


FIG. 5

REFERÊNCIAS:

1. J. A. Wheeler, Phys. Rev. 52, 1107 (1937).
2. W. Heisenberg, Z. Physik 120, 513, 673 (1943).
3. G. Møller, Kgl. Danske Videnskab Selskab, Mat. fys. Medd. 23, Nº 1 (1945), 22, nº 19 (1946); N. Hu, Phys. Rev. 74, 131 (1948); Ver referências: 12, 16, 20, 22 e 32; Ver também a lista bibliográfica no fim dos capítulos 11 e 12 do livro de R. G. Newton ³⁴.
4. H. M. Nussenzveig, Nuclear Physics 11, 499 (1959).
5. E. M. Ferreira e A. F. F. Teixeira, J. Math. Phys. 7, 1207 (1966).
6. E. M. Ferreira, Tese apresentada à Congregação da Escola Nacional de Química, Rio de Janeiro, (1967).
7. R. M. Thaler, Lectures in Theoretical Physics, Vol. IV, Interscience Pub. Inc. (1961) pp. 393-435.
8. L. I. Schiff, "Quantum Mechanics", McGraw-Hill Book Company, New York, (1955) p. 77.
9. H. Feshbach, G. E. Porter e V. F. Weisskopf, Phys. Rev. 96, 448 (1954).
10. P. B. Jones, "The Optical Model in Nuclear and Particle Physics", Interscience Tracts on Physics and Astronomy, Nº 14, John Wiley & Sons, Inc. (1963).
11. G. Gamow, Z. Physik 51 204 (1928) e 52, 510 (1928).
12. A. Martin, Nuovo Cimento 14, 403 (1959).
13. H. Poincare, Acta Math. 4, 201 (1884), p. 215.
14. Ver nota de pé de página 8 de Newton ³⁷.
15. A. Martin, "Progress in Elementary Particle and Cosmic Ray Physics" Wiley, N.Y. vol. 8 (1965) pp. 1-66.
16. W. Schutzler, An. da Acad. Brasileira de Ciências 19, 283 (1947).
17. R. Kronig, Physica 12, 543 (1946).
18. E. C. Titchmarsh, "Introduction to the Theory of Fourier Integrals", Oxford Univ. Press, 2nd ed. (1948) pp. 125/129.

19. H. M. Nussenzveig, "Analytic Properties of Nonrelativistic Scattering Amplitudes", Escuela Latino Americana de Fisica, Universidad de Mexico, Mexico, D.F. (1962) pp. 20-21.
20. W. Schutzler e J. Tiommo, Phys. Rev. 83, 249 (1951).
21. W. Schutzler e J. Tiommo, "On the Connection of the Scattering Matrix with Causality" no Simpósio sôbre novas técnicas de pesquisa em Física Rio de Janeiro (1952).
22. N. G. van Kampen, Phys. Rev. 82, 1079 (1953) e 91, 1267 (1953).
23. Ver ref. 19, pp. 44/46.
24. F. Calogero, "Variable Phase Approach to Potential Scattering". Academic Press, Inc., New York (1967) p. 203.
25. Ibid., p. 199.
26. A. I. Markushevich, "Entire Functions", American Elsevier Publishing Company Inc., New York, (1966) p. 7.
27. Para uma análise mais detalhada veja por exemplo, G. Beck e H. M. Nussenzveig, Nuovo Cimento 26, 416 (1960). e H. M. Nussenzveig, N.C. 20, 694 (1961).
28. "Handbook of Mathematical Functions", editado por M. Abramowitz e I. A. Stegun, Dover Publications, Inc., New York (1965) p. 361.
29. Ver ref. 19, pp. 38/39.
30. Ver ref. 26, pp. 48/52.
31. Ver ref. 19, pp. 92/96.
32. A. O. Barut e K. H. Ruei, J. Math. Phys. 2, 181 (1961).
33. A origem β_0 não pode ser um polo de $S(\beta)$, pois $\beta_0^* = -\beta_0$ que é um zero de $S(\beta)$, se aproxima da origem simultaneamente com β_0 e cancela a singularidade neste ponto ⁴.
34. R. G. Newton, "Scattering Theory of Waves and Particles", McGraw-Hill Book Company, New York (1966) p. 360.
35. C. Møller, "Lectures on Elementary S-Matrix Theory", Universitetets Institut for Teoretisk Fysik e NORDITA, Copenhagen, (1958/59) p. 54.

36. N. Levinson, Kgl. Danske Videnskab Selskab, Mat. fys. Medd. 25, No 9 (1949).
37. R. G. Newton, J. Math. Phys. 1, 319 (1960).

* * *