

Alan Carlos Maioli

Soluções Analíticas para a Equação de Lippmann-Schwinger

Volta Redonda 2020

Alan Carlos Maioli

Soluções Analíticas para a Equação de Lippmann-Schwinger

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt

Volta Redonda 2020

Ficha catalográfica automática - SDC/BIF Gerada com informações fornecidas pelo autor

M217s Maioli, Alan Carlos Soluções Analíticas para a Equação de Lippmann-Schwinger / Alan Carlos Maioli ; Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt, orientador. Niterói, 2020. 143 f. : il. Tese (doutorado)-Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2020. DOI: http://dx.doi.org/10.22409/PPGF.2020.d.13760962777 1. Lippmann-Schwinger. 2. Espalhamento. 3. Físicamatemática. 4. Solução Analítica. 5. Produção intelectual. I. Schmidt, Alexandre Grezzi de Miranda, orientador. II. Universidade Federal Fluminense. Instituto de Física. III. Título. CDD -

Bibliotecário responsável: Mario Henrique de Oliveira Castro - CRB7/6155

"What is the son but an extension of the father?" Princesa Irulan.

Dedico este trabalho à minha amada esposa que esteve sempre ao meu lado, e que possui imensa compreensão e carinho. Dedico-o também à toda a minha família e amigos.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à minha esposa Jéssica Maioli, por me ajudar durante meu doutorado, por ter sido uma pessoa, carinhosa e amorosa. Agradeço a toda a minha família, pelo suporte financeiro e emocional. Agradeço a minha mãe Emília e meu falecido pai Aroldo por terem me trazido à esse mundo e por terem me educado. Agradeço aos meus sogros José Carlos e Vanusa Cristina pelos momentos de descontração e felicidade, pelas pizzas a noite e os churrascos aos sábados. Agradeço a todos os meus irmãos Augusto, Antônio, Liana e Giuliana. Agradeço à minha cunhada Natália, por ser uma amiga e ter nos agraciado com sua alegria. Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Alexandre G. M. Schmidt por ter sido uma pessoa inspiradora, saber lidar com os desafios e por ter paciência de me guiar por todos esses anos. Agradeço ao Prof. Dr. Ladário Silva por ter me trazido ao ICEx. Agradeço ao Prof. Dr. José A. O. Huguenin pelas poesias e pela arte. Agradeço aos Professores Dr. Carlos E. Fellows, Dr. Marcos Veríssimo, Dr. Rodrigo Amorim, pelas piadas e pelos momentos engraçados na copa. Agradeço ao Prof. Dr. Adriano Martins por ter me apresentado o bar do Julião. Agradeço ao Prof. Dr. Thadeu Pena pelas excelentes cervejas. Agradeço aos colegas Marcello Passos, Anderson Luiz, Lais Lessa, pelo apoio moral, pela amizade, pelos momentos de descontração e pela metáfora da ovelha. Agradeço aos meus antigos alunos, Diego, Raiane, Lais por se tornarem meus colegas.

Finalmente agradeço ao café, pois sem ele esse trabalho não existiria.

Sumário

1	Intr	odução	1				
2	Dist	tribuições 6					
	2.1	Definições					
		2.1.1 Notação multi-índice	7				
		2.1.2 Suporte	7				
		2.1.3 Funções teste	8				
		2.1.4 Funções localmente integráveis	9				
		2.1.5 Funcional linear	9				
	2.2	Distribuição	10				
		2.2.1 Propriedades	11				
	2.3	Expansão em série de deltas	13				
	2.4	Distribuição ao longo de uma curva	13				
	2.5	Distribuição ao longo de uma superfície	15				
3	O e	spalhamento e as soluções para potenciais em forma de					
	circunferência 1						
	3.1	Equação de Fredholm	18				
	3.2	Grandezas físicas para problemas de espalhamento	18				
	3.3	Parede de contorno	22				

		3.3.1	Autofunção de um operador integral	2
	3.4	Soluçã	o através da expansão	4
		3.4.1	Comparação	8
		3.4.2	Função de Green total	3
	3.5	Múltip	blas paredes de contorno circulares	4
		3.5.1	Solução para duas circunferências	5
		3.5.2	Comportamento assintótico 3	9
		3.5.3	Ressonância	0
		3.5.4	Invisibilidade	3
		3.5.5	Múltiplas circunferências	8
	3.6	O Pot	encial como uma distribuição5	2
		3.6.1	Delta de Dirac e sua derivada	3
		3.6.2	Série de deltas de Dirac	8
4	\mathbf{Esp}	alham	ento por barreiras elípticas 6	1
4	Esp 4.1	alham Noçõe	ento por barreiras elípticas 6 s básicas	1 2
4	Esp 4.1	alham Noçõe 4.1.1	ento por barreiras elípticas 6 s básicas	1 2
4	Esp 4.1	alham Noçõe 4.1.1 4.1.2	ento por barreiras elípticas 6 s básicas	1 52 52 3
4	Esp 4.1	alhama Noçõe 4.1.1 4.1.2 4.1.3	ento por barreiras elípticas 6 s básicas	1 52 53 5
4	Esp 4.1	alhama Noçõe 4.1.1 4.1.2 4.1.3 4.1.4	ento por barreiras elípticas 6 s básicas	1 2 3 5 6
4	Esp 4.1 4.2	alhama Noçõe 4.1.1 4.1.2 4.1.3 4.1.4 Paredo	ento por barreiras elípticas 6 s básicas	1 22 33 56 8
4	Esp 4.1 4.2	alhama Noçõe 4.1.1 4.1.2 4.1.3 4.1.4 Pareda 4.2.1	ento por barreiras elípticas 6 s básicas 6 Coordenadas elípticas 6 Autofunções da equação de Hemholtz 6 Correspondências 6 Expansões 6 O potencial variável 6	1 52 53 56 89
4	Esp 4.1 4.2 4.3	alhama Noçõe 4.1.1 4.1.2 4.1.3 4.1.4 Pareda 4.2.1 Soluçã	ento por barreiras elípticas 6 s básicas 6 Coordenadas elípticas 6 Autofunções da equação de Hemholtz 6 Correspondências 6 Expansões 6 o de contorno elíptica 6 O potencial variável 6 o da equação de Lippmann-Schwinger 7	1 52 53 55 56 58 9 70
4	Esp4.14.24.3	alhama Noçõe 4.1.1 4.1.2 4.1.3 4.1.4 Pareda 4.2.1 Soluçã 4.3.1	ento por barreiras elípticas 6 s básicas 6 Coordenadas elípticas 6 Autofunções da equação de Hemholtz 6 Correspondências 6 Expansões 6 e de contorno elíptica 6 O potencial variável 6 o da equação de Lippmann-Schwinger 7 Ressonância 7	1 ² ³ ³ ⁵ ⁶ ⁸ ⁹ ⁰ ³
4 5	 Esp 4.1 4.2 4.3 Pot 	alhama Noçõe 4.1.1 4.1.2 4.1.3 4.1.4 Pareda 4.2.1 Soluçã 4.3.1 encial	ento por barreiras elípticas 6 s básicas 6 Coordenadas elípticas 6 Autofunções da equação de Hemholtz 6 Correspondências 6 Expansões 6 e de contorno elíptica 6 O potencial variável 6 to da equação de Lippmann-Schwinger 7 Ressonância 7 duplo 7	1 ¹ ² ³ ³ ⁵ ⁶ ⁸ ⁹ ⁰ ³ 9
4	 Esp 4.1 4.2 4.3 Pot 5.1 	alhama Noçõe 4.1.1 4.1.2 4.1.3 4.1.4 Pareda 4.2.1 Soluçã 4.3.1 encial Forma	ento por barreiras elípticas 6 s básicas 6 Coordenadas elípticas 6 Autofunções da equação de Hemholtz 6 Correspondências 6 Expansões 6 e de contorno elíptica 6 O potencial variável 6 o da equação de Lippmann-Schwinger 7 duplo 7 lismo 7	1 ¹ ² ³ ⁵ ⁶ ⁸ ⁹ ⁰ ³ 9 ⁹ ⁹

	5.3	.3 Onda espalhada pelo potencial linear			
	5.4 Comparação com a solução do potencial duplo				
6	reira esferoidal	90			
6.1 Conceitos introdutórios					
		6.1.1 Sistema de coordenadas	91		
		6.1.2 A equação de Helmholtz	91		
6.2 Equação de Lippmann-Schwinger			92		
	6.3	Solução para a função de intensidade do potencial variável	95		
		6.3.1 Ressonância	97		
		6.3.2 Amplitude de espalhamento	.00		
	6.4	Generalização para múltiplas barreiras esferoidais $\ . \ . \ . \ .$ 1	01		
7	Con	nclusões e projetos futuros 10	06		
A	O n	nétodo de paredes de contorno 10	08		
В	Fun	ções de Airy 11	12		
	B.1	Relação de Ortogonalidade	12		
	B.2	Cálculo da Integral (5.16) $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 1$	14		
С	\mathbf{Sist}	ema de unidades 13	16		
D	List	a de Publicações 11	17		

Lista de Figuras

3.1 O espalhamento de uma onda plana incidente por uma barreira circular (circunferência preta). Na esquerda é mostrada a densidade de probabilidade calculada usando as soluções exatas (3.57) e (3.58). Na direita é apresentada a densidade de probabilidade calculada usando o método de paredes de contorno. A constante de acoplamento $\gamma = 2$ e a curva foi divida em 100 partes e pode-se observar que a função de onda atravessa a barreira.

29

30

- 3.3 Gráfico de cores da densidade de probabilidade de uma onda plana que foi espalhada por uma circunferência. Na figura à esquerda está presente a solução analítica enquanto que a da direita está presente a solução numérica usando o método de paredes de contorno. Note que, para o número de onda k = 4, a solução exata possui valores nulos dentro da barreira, enquanto que na solução numérica existem pequenos valores na parte interna. Nesse caso dividimos a barreira em 300 partes e o domínio é uma malha de 101×101
- 3.4 Gráfico de cores da densidade de probabilidade, de modo que as cores mais claras representam os maiores valores enquanto que as mais escuras os menores valores. Os raios dos círculos são $R_1 = 1$ e $R_2 = 2$, e os parâmetros do potencial são $\gamma_1 = 1$ e $\gamma_2 = 2$. O número de onda da onda plana incidente é k = 2. 38

- 3.7 Gráfico de cores para a função de onda espalhada por uma circunferência com raio $R = z_{2,2}/k$. Esse raio é o mesmo valor do raio da circunferência externa da figura 3.6. Para poder comparar com o caso de duas circunferências, foi escolhido o mesmo esquema de cores e mesmo número de onda. Essa função de onda é exatamente a mesma que aquela da figura 3.6. 45

- 4.2 Gráfico de cores da densidade de probabilidade $|\Psi(\mu, \theta)|^2$ nas regiões interna e externa da barreira elíptica que é desenhada como uma linha vermelha. A função de intensidade do potencial $\gamma(s)$ é dada pela equação (4.30), onde $\gamma_0 = 7$. No gráfico de cima, é mostrada a onda plana incidente com número de onda $k_{0x} = 6.4$ e o parâmetro h = 3.2 que não é um zero da equação transcendental (4.42). No gráfico de baixo, o parâmetro é h = 4.03 e o número de onda $k_{0x} = 8.06$, portanto é observado que a onda plana incidente é espalhada em múltiplas direções e penetra a barreira. Foi usado o parâmetro $\mu_0 = 1/2$.

77

- 5.2 Gráfico de cores da densidade de probabilidade $|\psi(x, y)|^2$ para o espalhamento de uma onda plana, que colide com uma barreira horizontal de comprimento L = 2, da esquerda para direita com energia E = 2. Em (a) o chão é modelado com a parede de contorno. Em (b) a condição de contorno está contida na função de Green (5.21). Em (c) está presente o potencial linear que atrai a função de onda para o chão. 88

87

6.1 Gráfico de cores da densidade de probabilidade não normalizados $|\Psi(\xi, \eta, \phi)|^2$, equação (6.20), para $\phi = 0$ e $\phi = \pi$, onde x > 0 e x < 0, respectivamente. A barreira esferoidal oblata é representada pela linha preta e o padrão de espalhamento pode ser gerado efetuando a rotação em torno do eixo z. Os valores do número de onda foram escolhidos de tal forma que são associados aos zeros da função esferoidal radial de primeira espécie. Nos gráficos superiores: k = 3.3388 (esquerda) e k = 5.4872 (direita) são os primeiro zeros de $S_0^{0(1)}(-ik; i\xi_0)$ e de $S_1^{0(1)}(-ik; i\xi_0)$, respectivamente. Nos gráficos inferiores: k = 7.7257 (esquerda) e k = 9.6543 (direita), são os segundo zeros de $S_0^{0(1)}(-ik; i\xi_0)$ e de $S_2^{0(1)}(-ik; i\xi_0)$, respectivamente. Os parâmetros são: $\gamma_0 = 1000, \xi_0 = 0.693147, a = 2, n_{max} =$ 17, e foram usadas as unidades $\hbar = m^* = 1$, i.e. A = 2. 105

Lista de Tabelas

- 3.2 Tabela contendo os desvios de fase para o espalhamento por uma e por duas circunferências. Na quarta coluna está presente a diferença relativa percentual, que foi calculada como sendo o modulo da diferença entre os desvios de fase e depois dividido pelo desvio de fase relacionado a uma circunferência.

6.1	Soluções da equação (6.23) para o parâmetro c quando $\xi_0 =$					
	$0.693147 = \operatorname{arccosh}(1.25). \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $	98				

Resumo

São apresentadas soluções analíticas da equação de Lippmann-Schwinger para diversos potenciais modelados como uma parede de contorno usando o conceito de distribuição definidos em curvas e superfícies. Foram obtidas as soluções para a equação de Lippmann-Schwinger para o espalhamento bidimensional de uma onda plana por potenciais em forma de circunferência e elipse, enquanto que em três dimensões foi determinado o espalhamento por uma barreira esferoidal. Através do formalismo de potencial duplo foi encontrada a solução para o espalhamento bidimensional por um potencial linear e por uma barreira arbitrária.

Abstract

Analytical solutions of the Lippmann-Schwinger equation are presented for several potentials modeled as a boundary wall using the concept of a distribution defined in curves and surfaces. The solutions for the Lippmann-Schwinger equation were obtained for the two-dimensional scattering of a plane wave by potentials in the form of circumference and ellipse, while in three dimensions the scattering by a spheroidal barrier was determined. Through the double potential formalism, a solution was found for two-dimensional scattering over a linear potential and an arbitrary barrier.

Capítulo 1

Introdução

A Física dos processos de espalhamento é muito rica. Na época da velha mecânica quântica Rutherford [1] investigou a estrutura atômica por meio do espalhamento de partículas α sobre lâminas de ouro. Franck e Hertz descobriram os níveis atômicos de energia estudando o espalhamento de elétrons por vapor de mercúrio, e na física de partículas elementares são estudadas colisões [2] em caráter teórico, enquanto que experimentalmente é investigada a possibilidade de se criar novas partículas é [3, 4, 5]. A ideia chave de um problema de espalhamento é analisar a interação entre uma partícula livre, chamada de projétil, que é lançada sobre um dado objeto chamado alvo. Este alvo, por sua vez, pode ser outra partícula, um átomo, uma molécula, ou mesmo um objeto macroscópico e todos eles são modelados por meio de um potencial. Depois que a interação ocorre, a partícula é espalhada em um estado livre, que pode ser diferente do estado inicial, e esta alteração nos permite inferir grandezas físicas como por exemplo: momento angular, energia, polarização, intensidade e assim por diante. A natureza e a intensidade das forças envolvidas no processo podem ser avaliadas a partir das variações nestas grandezas. Em outras palavras, a estrutura interna, a forma e a posição de componentes do alvo, que são na maioria das vezes inacessíveis, podem ser investigadas a partir dos dados coletados em um processo de espalhamento.

Esta metodologia encontra aplicações em áreas onde as interações são conhecidas, como por exemplo na física atômica, e em áreas como a física nuclear onde as interações devem ser postuladas. A teoria do espalhamento também é estudada como um tema da física-matemática, principalmente do ponto-de-vista da análise espectral e também como uma ferramenta para explorar a própria dinâmica dos sistemas físicos [6]. Fenômenos ionizantes, por exemplo, são importantes para se testar modelos de espalhamento oriundos da física de poucos corpos [7]. Este efeito torna-se ainda mais relevante quando sabemos que a interação entre partículas carregadas com o tecido humano é uma linha de pesquisa onde a física teórica tem um ponto de contato com a física médica. Assim, podemos afirmar categoricamente que grande parte do conhecimento que temos a respeito do mundo microscópico foi conseguido através da análise e do estudo de processos de espalhamento. Macroscopicamente, e não apenas na Física, o espalhamento está presente nos estudos de engenharia civil: construção de túneis e análise de risco em trens de metrô [8]; em problemas acústicos e no espalhamento de ondas de água e na engenharia oceânica [9, 10]. Na área de geologia há estudos sismológicos importantes e também na detecção de defeitos em meios contínuos [11, 12]. Existem também, aplicações promissoras como concentradores de ondas de água para produção de energia [13].

Fisicamente, a dinâmica quântica é governada pelas equações de Schrödinger, ou de Pauli, ou de Dirac, dependendo da energia envolvida no processo e da presença ou ausência do spin. Estas três equações são equações diferenciais parciais: relacionam grandezas físicas e suas derivadas em certos pontos do espaço. Pode-se dizer que esta é uma formulação local da mecânica quântica. Em 1950, B. Lippmann e J. Schwinger introduziram uma abordagem global para os mesmos problemas e chegaram a uma equação integral que governa a dinâmica quântica. Esta equação ficou conhecida como equação de Lippmann-Schwinger (LS) [14] que é uma equação integral de Fredholm de segunda espécie [15, 16] cujo núcleo (*kernel*) é o produto da função de Green do problema com o potencial espalhador. Nesta abordagem, uma grandeza física ψ avaliada em um dado ponto se relaciona com uma integral dela mesma multiplicada pelo núcleo da equação. Assim, para calcular a função de onda em um dado ponto do espaço devemos conhecer a sua integral em um domínio pré-estabelecido.

Os estados físicos de partículas são representados por funções de onda que podem ser classificados de acordo com seu espectro de energia, quando o espectro de energia é discreto o estado físico é denominado de *estado ligado*, enquanto que o espectro de energia contínuo define um *estado de espalhamento*.

Experimentalmente, a grandeza a ser medida é a seção de choque diferencial (em três dimensões) ou o comprimento de choque diferencial (em duas dimensões). Do ponto de vista teórico, a seção de choque (ou comprimento de choque) pode ser obtida através da função de onda do estado espalhado ψ , como será visto na seção 3.2. Do ponto de vista cronológico, a teoria do espalhamento foi desenvolvida utilizando a onda plana $\phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ como sendo a função que representa a onda incidente. Esse tipo de função não representa uma partícula pois ocupa todo o espaço e não é normalizável, ou seja, não pertence à um espaço de Hilbert. Um estado como o representado pela onda plana é chamado de estado *impróprio*, justamente por não representar uma partícula. Portanto, a função de onda espalhada obtida através da equação de LS também será um estado impróprio. Para representar uma partícula, é necessário que a função de onda que representa o estado seja normalizável, ou seja um estado *próprio*, e com isso pode-se representá-lo por $\int w(E)\psi(E) \exp(-iEt)dE$, onde $\psi(E)$ é a função de onda de um estado impróprio e w(E) uma distribuição de energia. Nessa tese serão utilizados apenas estados impróprios.

Quando as energias envolvidas no processo de espalhamento são altas a técnica usual é conhecida como aproximação de Born, no entanto, se uma certa condição envolvendo o momento inicial não for satisfeita, a série deixa de ser convergente e deve-se recorrer a outras técnicas como a expansão em ondas parciais. Entretanto, se as energias envolvidas no problema não forem nem tão altas para justificar a aproximação de Born, e nem tão baixas para utilizar os desvios de fase das ondas parciais, a alternativa é recorrer a métodos numéricos. Belkić [17] afirma que muitas vezes a Física mais interessante ocorre justamente nesta região de energias intermediárias.

Os trabalhos contidos nessa tese, não necessitam de analisar previamente a energia da partícula incidente. Afinal as soluções aqui encontradas são analíticas, portanto são válidas para todos os valores de energia. Soluções exatas não possuem a dificuldade de se avaliar regiões de convergência, no entanto soluções exatas da equação de LS são raras. Neste trabalho nosso objetivo será construir uma metodologia para se obter estas soluções para diversas geometrias para o espalhamento de ondas planas por barreiras contínuas modeladas como paredes de contorno, em duas e em três dimensões. Mostraremos aplicações dos resultados como no cálculo exato de seções e comprimentos de choque, cálculo de ressonâncias e de condições de invisibilidade de barreiras. A ideia principal será obter autofunções do operador integral presente na equação de LS e escrever a função de Green dos problemas como uma expansão bilinear, que possui a propriedade de convergência uniforme. Com isso temos os ingredientes necessários para resolver a equação de LS.

A estrutura da tese é a seguinte: no capítulo 2 são introduzimos os conceitos da teoria das distribuições que são fundamentais para o bom entendimento do trabalho: definição, suporte, funções teste, operações de diferenciação e propriedades. Define-se as paredes de contorno ao tratar de distribuições escritas ao longo de curvas e de superfícies. No capítulo 3 é resolvida analiticamente a equação de LS para o problema do espalhamento de uma onda plana por uma barreira circular do tipo boundary-wall modelada com distribuições delta de Dirac. No capítulo 4 é determinada analiticamente a solução a equação de LS para o problema do espalhamento de uma onda plana por uma barreira elíptica do tipo *boundary-wall* modelada com distribuições delta de Dirac mas onde a intensidade $\gamma(s)$ é variável. No capítulo 5 é apresentado uma aplicação desta metodologia para um problema que envolve dois potenciais: um do tipo *boundary-wall* e outro externo que depende linearmente de uma das coordenadas. No capítulo 6 é extendida a técnica de solução da equação de LS desenvolvida nos capítulos 3 e 4 para um problema em três dimensões espaciais. Neste capítulo é resolvido analiticamente o problema do espalhamento de uma onda plana por uma barreira esferoidal do tipo boundary-wall. Finalmente, no capítulo 7 conclui-se o trabalho e apresentam-se as perspectivas futuras.

Capítulo 2

Distribuições

O conceito de distribuição foi introduzido por Dirac em seus trabalhos seminais sobre mecânica quântica [19] na década de 1920. No entanto, apesar de ser um conceito fundamental ele foi formalizado matematicamente em 1950 por Schwartz [20] que deu início ao que se conhece hoje, em Matemática, como teoria das distribuições. As distribuições são objetos matemáticos que se assemelham à funções, mas podem ter um caráter singular, como a delta de Dirac $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$. Ela é amplamente utilizada em física e engenharias. Um exemplo simples é a densidade de carga $\rho(\mathbf{x})$ de partículas pontuais $\rho(\mathbf{x}) = q\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, ou seja, em qualquer posição do espaço $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_0$ não há carga, e se for efetuada a integração em todo o espaço tem-se,

$$\int_{\mathbb{R}^n} \rho(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x} = q, \qquad (2.1)$$

onde q é a carga da partícula. Como pode ser visto nesse exemplo, a delta de Dirac é uma ótima ferramenta para representar singularidades. Nesse presente capítulo serão apresentados conceitos e definições relevantes para o entendimento das distribuições.

2.1 Definições

Para compreender o significado das distribuições é necessário apresentar algumas definições primárias, tais como: suporte, funções teste, funções localmente integráveis e funcionais lineares.

2.1.1 Notação multi-índice

As derivadas parciais de ordem arbitrária com respeito a diferentes variáveis serão utilizadas diversas vezes nesse capítulo, portanto se torna evidente o uso de uma notação compacta para representá-las. Primeiramente considerase um conjunto ordenado de j números inteiros não-negativos representados por $m = (m_1, m_2, ..., m_j)$ de modo que $|m| = m_1 + m_2 + ... + m_j$, e a partir disso define-se a m-ésima derivada com respeito a diferentes variáveis como:

$$\partial^m f = \frac{\partial^{|m|} f}{\partial x_1^{m_1} \partial x_2^{m_2} \dots \partial x_j^{m_j}}.$$
(2.2)

Para elucidar a utilidade dessa notação, será escrita uma derivada de ordem |m| = 6, sendo que será tomada a segunda derivada parcial com respeito a coordenada x, uma em relação a y e três em z, portanto m = (2, 1, 3),

$$\partial^{(2,1,3)}f = \frac{\partial^6 f}{\partial x^2 \partial y \partial z^3}.$$
(2.3)

2.1.2 Suporte

O suporte de uma função f, que "transforma"n números reais em apenas um número real, é definido como o menor conjunto fechado "fora" de f no qual a função se anula. Rigorosamente podemos escrever, seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $\mathbf{x} \mapsto f(\mathbf{x})$, onde \mathbb{R}^n é o espaço real de n dimensões, pode-se definir o suporte como,

$$supp(f) := \overline{\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : f(\mathbf{x}) \neq 0\}}.$$
(2.4)

Um exemplo simples é a função,

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x \le -1 \\ \frac{2+x^2}{1+x^2} & -1 < x < 1 \\ 0 & x \ge 1 \end{cases}$$

cujo suporte é $supp(f) = \{-1 \le x \le 1\}$, ou seja, apesar da função ser nula nos pontos x = 1 e x = -1 eles também são considerados como parte desse conjunto chamado de suporte. Os pontos $x = \pm 1$ são o fechamento do conjunto no qual f não se anula.

2.1.3 Funções teste

As funções teste f são aquelas que possuem suporte em algum subespaço de \mathbb{R}^n , que possuem derivadas de qualquer ordem com respeito a qualquer variável, e que as derivadas dessas funções também possuam suporte em algum subespaço de \mathbb{R}^n . Em outras palavras, as funções teste são aquelas que pertencem ao conjunto $C_0^{(\infty)}(\mathbb{R}^n)$, como por exemplo,

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x \le -1 \\ \exp \frac{-1}{1-x^2} & -1 < x < 1 \\ 0 & x \ge 1 \end{cases}$$

2.1.4 Funções localmente integráveis

Funções localmente integráveis são úteis para definir o funcional linear. Essas funções são definidas de forma que sua integral em um subespaço de \mathbb{R}^n exista:

$$\int_{\mathbb{K}} |f(\mathbf{x})| \ d\mathbf{x} < \infty, \tag{2.5}$$

onde \mathbb{K} é um subespaço limitado de \mathbb{R}^n . Enquanto essas funções são essenciais para descrever um funcional linear, o mesmo não pode ser dito para uma distribuição. Essa afirmação se tornará mais clara na seção 2.2.

2.1.5 Functional linear

Um funcional linear (F_l) é um mapeamento de uma função (f) para um número que pode ser complexo, ou seja, $C_0^{(\infty)}(\mathbb{R}^n) \mapsto \mathbb{C}$. Esse mapeamento é definido como

$$\langle F_l, f \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} F_l(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$
 (2.6)

onde $\langle F_l, f \rangle$ é um número complexo, $F_l(\mathbf{x})$ é uma função localmente integrável e $f(\mathbf{x})$ é a função na qual o funcional atua. Esse mapeamento deve satisfazer duas condições: a linearidade e a continuidade.

• Linearidade:

$$\langle F_l, (c_1 f_1 + c_2 f_2) \rangle = c_1 \langle F_l, f_1 \rangle + c_2 \langle F_l, f_2 \rangle \tag{2.7}$$

• Continuidade: Uma sequência de números $\langle F_l, f_m \rangle$ converge para $\langle F_l, f \rangle$, quando a sequência de funções f_m converge para f. Podemos dizer que,

$$\lim_{m \to \infty} \langle F_l, f_m \rangle = \langle F_l, \lim_{m \to \infty} f_m \rangle.$$
(2.8)

2.2 Distribuição

Foram apresentadas todas as definições iniciais necessárias para o entendimento do conceito de distribuição. A mesma pode ser representada de maneira semelhante ao funcional linear, a única diferença, entretanto, é o fato de que F_l não precisa ser uma função localmente integrável. Quando F_l é uma função localmente integrável pode-se usar a equação (2.6) para representar a distribuição, e a mesma é chamada de distribuição regular. Por outro lado, não se deve usar a equação (2.6) para o caso de F_l não ser uma função localmente integrável, e tal distribuição é chamada de distribuição singular. Um exemplo de distribuição singular é aquela que possui $F_l = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, onde $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ é a delta de Dirac. A delta de Dirac não é uma função, mas sabe-se qual é o seu "efeito" quando integra-se com funções teste:

$$\langle \delta, f \rangle = f(\mathbf{x}_0). \tag{2.9}$$

É importante notar que em diversos livros-texto é apresentada a delta de Dirac na forma

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \begin{cases} 0 & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_0 \\ & \\ \infty & \mathbf{x} = \mathbf{x}_0 \end{cases},$$
(2.10)

ou da forma,

$$\langle \delta, f \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$
 (2.11)

ambas são formas incorretas de representar uma distribuição singular. A primeira (2.10) é usada de maneira pedagógica apenas para introduzir aos novos alunos o seu efeito devido à integração, enquanto que a segunda (2.11) é usada devido a sua praticidade para efetuar cálculos. Nessa tese será usada diversas vezes essa segunda notação fictícia com o intuito de agilizar os cálculos e por ser uma prática comum nas diversas áreas da física.

Uma distribuição também possui as duas condições referentes ao funcional linear, que são a linearidade e a continuidade.

2.2.1 Propriedades

As distribuições possuem diversas propriedades interessantes, entretanto serão descritas apenas aquelas relevantes para a compreensão da tese, tais como: a derivação e a generalização de função.

Derivação unidimensional

Primeiramente será descrito a derivação de uma distribuição unidimensional $\langle F_l, f \rangle$,

$$\left\langle \frac{dF_l}{dx}, f \right\rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{dF_l(x)}{dx} f(x) dx.$$
 (2.12)

Integrando por partes e levando em conta que as funções teste possuem suporte compacto, ou seja,

$$F_l(x)f(x)\Big|_{x=-\infty}^{\infty} = 0, \qquad (2.13)$$

temos que a equação (2.12) se torna,

$$\left\langle \frac{dF_l}{dx}, f \right\rangle = -\int_{\mathbb{R}} F_l(x) \frac{df(x)}{dx} dx = -\left\langle F_l, \frac{df}{dx} \right\rangle.$$
 (2.14)

Pode-se repetir esse procedimento para determinar a derivada de ordem n de uma distribuição,

$$\left\langle \frac{d^n F_l}{dx^n}, f \right\rangle = (-1)^n \left\langle F_l, \frac{d^n f}{dx^n} \right\rangle,$$
 (2.15)

e para isso vale lembrar que as derivadas das funções teste também possuem suporte. Usando a delta de Dirac como exemplo:

$$\left\langle \frac{d^n \delta(x - x_0)}{dx^n}, f \right\rangle = (-1)^n \frac{d^n f(x)}{dx^n} \Big|_{x = x_0}.$$
 (2.16)

Derivação multidimensional

O procedimento para descrever as derivadas com respeito a diferentes variáveis é análogo ao caso anterior, sendo assim, será usada a equação (2.15) como definição para a derivação parcial. Através de aplicações sucessivas da derivada parcial pode-se escrever,

$$\langle \partial^m F_l, f \rangle = (-1)^{|m|} \langle F_l, \partial^m f \rangle, \qquad (2.17)$$

onde m é um multi-índice.

Generalização de função

A distribuição também é conhecida por ser uma generalização do conceito de função. Usualmente, uma função $g(\mathbf{x})$ pode ser descrita pelos seus valores quando \mathbf{x} varia em todo o seu domínio. Entretanto, a mesma função pode ser descrita ao saber os valores devido à integração com todas as funções testes $f(\mathbf{x})$, supondo uma função teste específica $\Psi_{\mathbf{x},\epsilon}(\mathbf{y})$ da forma,

$$\Psi_{\mathbf{x},\epsilon}(\mathbf{y}) = \epsilon^{-1} \Psi\left(\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{y})\right), \qquad (2.18)$$

podemos integra-las e tomar o limite de $\epsilon \to 0$,

$$\lim_{\epsilon \to 0} \int_{\mathbb{R}^n} g(\mathbf{y}) \Psi_{\mathbf{x},\epsilon}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = \lim_{\epsilon \to 0} \epsilon^{-1} \int_{\mathbb{R}^n} g(\mathbf{y}) \Psi\left(\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{y})\right) \, d\mathbf{y} = g(\mathbf{x}), \quad (2.19)$$

a prova da última igualdade pode ser encontrada na referência [21], teorema 7.7 e página 242.

2.3 Expansão em série de deltas

A delta de Dirac e suas derivadas formam uma base no espaço de distribuições, portanto pode-se expandir qualquer distribuição D(x) em termos das derivadas das deltas.

$$D(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \delta^{(i)}(x), \qquad (2.20)$$

onde c_i são números, que podem ser complexos, e $\delta^{(i)}(x)$ é a i-ésima derivada da delta de Dirac em relação a x, vale a pena destacar que quando i = 0nenhuma derivada é efetuada. Para conseguir obter os números c_i que caracterizam a distribuição é necessário usar um procedimento muito comum em relação as séries, que é utilizar-se de condições de ortogonalidade. Entretanto, as funções que são ortogonais às derivadas das deltas não pertencem ao espaço de distribuições, tais funções são as potências de x e a condição de ortogonalidade é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(i)}(x) x^j dx = (-1)^i \ i! \ \delta_{i,j}, \tag{2.21}$$

onde $\delta_{i,j}$ é a delta de Kroenecker.

2.4 Distribuição ao longo de uma curva

Será definido uma distribuição ao longo de uma curva. Seja C uma curva suave e $d\sigma$ um elemento infinitesimal de comprimento, pode-se definir uma

distribuição ao longo de uma curva como,

$$\langle F, f \rangle_C = \int_C F(\mathbf{y}) f(\mathbf{y}) d\sigma.$$
 (2.22)

Parametrizando a curva C por um vetor $\mathbf{P}(s)$ em \mathbb{R}^n , pode-se escrever a distribuição na curva como,

$$\langle F, f \rangle_C = \int_a^b F(\mathbf{y}(s)) f(\mathbf{y}(s)) \left| \frac{d\mathbf{P}(s)}{ds} \right| ds,$$
 (2.23)

onde $a \in b$ são os extremos do parâmetro s. No capítulo 3 será utilizado um potencial em duas dimensões que possui a forma de uma distribuição em uma circunferência de raio R, que é parametrizada por,

$$\mathbf{P}(s) = (R\cos s, R\sin s). \tag{2.24}$$

A distribuição usada para descrever o potencial é o produto de uma delta de Dirac e uma função de intensidade de acoplamento,

$$V(\mathbf{r}') = \langle \gamma \delta, f \rangle_C = \int_0^{2\pi} \gamma(s) \ \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}(s)) \ f(\mathbf{r}(s)) \ R \ ds, \qquad (2.25)$$

onde a função teste será o produto da função de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ com a função de onda $\psi(\mathbf{r}')$. A mesma ideia é reproduzida no capítulo 4 para descrever um potencial em forma de elipse, que é parametrizada por,

$$\mathbf{P}(s) = \left(\frac{a}{2}\cosh\mu_0\cos s, \frac{a}{2}\sinh\mu_0\sin s\right),\tag{2.26}$$

portanto o potencial é escrito,

$$V(\mathbf{r}') = 4 \int_0^{2\pi} \gamma(s) \,\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}(s)) \,f(\mathbf{r}(s)) \,\frac{a}{2} \sqrt{\cosh^2 \mu_0 - \cos^2 s} \,ds, \quad (2.27)$$

note que nesse caso foi introduzido um fator 4 por conveniência, e a função teste f será novamente o produto da função de Green e da função de onda.

2.5 Distribuição ao longo de uma superfície

É possível definir uma distribuição em uma superfície de maneira semelhante à curva feita na seção anterior,

$$\langle F, f \rangle_S = \int_S F(\mathbf{y}) f(\mathbf{y}) \, dS(\mathbf{y}),$$
 (2.28)

onde S é a superfície onde está presente a distribuição e $dS(\mathbf{y})$ é o elemento de superfície. Será utilizada essa distribuição no capítulo 6, para representar uma casca esferoidal oblata.

$$V(\xi',\eta',\phi') = \int \int_{S} \gamma(u,v) \frac{\delta(\xi'-\xi_0)\delta(\eta'-u)\delta(\phi'-v)}{|J|} \, dS, \qquad (2.29)$$

onde S é uma casca esferoidal definida por $\xi = \xi_0$, J é o Jacobiano, a função de intensidade do potencial é escrita como $\gamma(u, v)$ e o elemento de superfície é escrito como,

$$dS = \frac{a^2}{4}\sqrt{(1+\xi_0^2)(\xi_0^2+u^2)} \, du \, dv.$$
 (2.30)

Capítulo 3

O espalhamento e as soluções para potenciais em forma de circunferência

Neste capítulo será resolvida analiticamente a equação de LS para o espalhamento de uma onda plana por uma barreira circular modelada como uma parede de contorno. Os resultados presentes nesse capítulo foram baseados em dois artigos, um sobre espalhamento por um círculo [22] e outro que está submetido na revista Journal of Mathematical Physics cujo título é Exact Solutions for the Lippmann-Schwinger Equation in Two Dimensions and Invisibility Conditions. Esse estudo foi motivado pelos trabalhos das referências [23, 24, 25]. Enquanto que uma possível aplicação no ponto de vista experimental, é estabelecer uma conexão entre o espalhamento quântico e o espalhamento de luz. De modo que experimentalmente pode-se utilizar de um modulador espacial de luz (SLM- Spatial Light Modulator) para obter um padrão de espalhamento que seja análogo ao espalhamento quântico. Tal conexão que espera-se alcançar é a maneira de produzir uma máscara no *SLM* que simula um potencial qualquer discutido nessa tese. A equação que caracteriza o espalhamento quântico é a equação de LS,

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\phi^{\pm}\rangle + (E - \hat{H}_0 \pm i\eta)^{-1} \hat{V} |\psi^{\pm}\rangle, \qquad (3.1)$$

onde \hat{H}_0 é o hamiltoniano da partícula livre, \hat{V} é o potencial e $\eta = 0^+$. Utilizando-se da representação de posição para a função de onda espalhada em um problema bi-dimensional, pode-se observar que a equação anterior torna-se,

$$\psi^{+}(\mathbf{r}) = \phi^{+}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbb{R}^{2}} G_{0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi^{+}(\mathbf{r}') d^{2}\mathbf{r}', \qquad (3.2)$$

onde $\phi^+(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ é a onda plana incidente e $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de Green relacionado ao problema da partícula livre [26],

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sigma H_0^{(1)} \left(k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \right), \qquad (3.3)$$

onde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $\sigma = -im/2\hbar^2$ e $H_0^{(1)}(z)$ função de Hankel de primeira espécie e ordem zero [27]. É importante salientar que o potencial usado nessa tese é escrito como uma integral de linha de uma delta de Dirac,

$$V(\vec{r}) = \int_C ds \ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s))\gamma(s), \qquad (3.4)$$

onde C é uma curva arbitrária, podendo ser fechada ou aberta, $\mathbf{r}(s)$ é o vetor posição na curva C, e $\gamma(s)$ é um parâmetro que representa a intensidade do potencial. Substituindo esse potencial na equação de LS e integrando na posição,

$$\psi^{+}(\mathbf{r}) = \phi^{+}(\mathbf{r}) + \int_{C} \gamma(s) G_{0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s)) \psi^{+}(\mathbf{r}(s)) ds, \qquad (3.5)$$

que é uma equação integral para ψ .
3.1 Equação de Fredholm

A equação de LS (equação 3.2) é uma equação de Fredholm de segunda espécie que é definida como,

$$y(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) + \lambda \int_{\Sigma} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') y(\mathbf{r}') d^{n} \mathbf{r}', \qquad (3.6)$$

onde Σ é uma região de um espaço \mathbb{R}^n , \mathbf{r} é um vetor no interior da região Σ , $f(\mathbf{r})$ é uma função conhecida, $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é denominada função núcleo (kernel). É uma equação integral, ou seja, a função $y(\mathbf{r})$ é desconhecida. Levando em consideração os problemas bidimensionais de espalhamento, pode-se identificar que a região Σ é o espaço bidimensional R^2 , a função conhecida $f(\mathbf{r})$ é a onda plana incidente $\phi(\mathbf{r})$, a função núcleo $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é o produto entre a função de Green e o potencial $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')V(\mathbf{r}')$ e a função desconhecida $y(\mathbf{r})$ é a onda espalhada $\psi(\mathbf{r})$ a ser determinada.

3.2 Grandezas físicas para problemas de espalhamento

Nessa seção, será apresentada uma pequena revisão de algumas grandezas físicas para problemas de espalhamento que serão calculadas em outras seções [17], tais como o comprimento de choque e a amplitude de espalhamento. Também serão mostradas a análise de ondas parciais e o teorema ótico. Note que nessa tese os conceitos e as grandezas são escritas levando em consideração apenas os casos bidimensionais, o que difere da grande maioria dos livros-texto. Tais conceitos podem ser encontrados em [28, 29, 30], enquanto que uma comparação direta com o caso tridimensional pode ser visualizada em [25]. É importante notar que na teoria do espalhamento é levado em con-

sideração o fato de que a onda espalhada a ser detectada está muito distante da região onde o potencial atua, em outras palavras, é exigido do potencial espalhador que,

$$\lim_{r \to \infty} V(\mathbf{r}) = 0, \tag{3.7}$$

então é considerada a forma assintótica da função de onda,

$$\psi \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta - \alpha)\frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}},$$
(3.8)

onde f é a amplitude de espalhamento , \mathbf{k} é o número de onda incidente e α é o ângulo que \mathbf{k} faz com o eixo horizontal, ele indica a direção de incidência da onda plana, vale salientar que o termo \sqrt{r} no denominador está relacionado com a dimensionalidade. Pode-se definir o comprimento de choque de espalhamento l, que é o análogo bidimensional da seção de choque σ , como sendo,

$$l = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dl}{d\theta} d\theta, \qquad (3.9)$$

onde a derivada é denominada comprimento de choque diferencial e possui a seguinte relação,

$$\frac{dl}{d\theta} = \left| f(\theta - \alpha) \right|^2. \tag{3.10}$$

Pode-se usar a análise de ondas parciais, pois é útil quando o potencial é invariante sob rotação. Então a amplitude de espalhamento pode ser escrita como,

$$f(\theta - \alpha) = \sum_{n = -\infty}^{\infty} \exp\left[in(\theta - \alpha)\right] f_n(k), \qquad (3.11)$$

onde $f_n(k)$ é definido,

$$f_n(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(i\frac{\pi}{4}\right) \sqrt{\frac{1}{k}} \exp\left[i\delta_m(k)\right] \sin\delta_m(k), \qquad (3.12)$$

onde $\delta(k)$ é o desvio de fase, que é um ângulo que mede o quão afastado a solução assintótica da onda espalhada está da onda plana. O comprimento de choque de espalhamento l, que é o análogo bidimensional da seção de choque (definida em um espaço tridimensional), possui as seguintes relações,

$$l(k) = \int_0^{2\pi} |f(\theta - \alpha)|^2 d\theta \qquad (3.13)$$

$$=\sum_{n=-\infty}^{\infty}2\pi\left|f_{n}(k)\right|^{2}$$
(3.14)

$$=\sum_{n=-\infty}^{\infty}l_n(k),\tag{3.15}$$

onde $l_n(k)$ é limitado pelo valor máximo 4/k,

$$l_n(k) = \frac{4}{k} \sin^2(\delta_n(k)).$$
 (3.16)

Um caso importante dessa análise é o teorema óptico,

$$Re\left[\exp\left(i\frac{\pi}{4}\right)f(0)\right] = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{k}{2\pi}}l(k), \qquad (3.17)$$

que é uma consequência imediata da conservação do fluxo de probabilidade.

Comportamento assintótico

Ao obter a solução analítica é possível relacioná-la com as grandezas de espalhamento. Supondo que uma solução seja descrita como,

$$\psi_3(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \beta_l i^l \exp(il\theta) H_l^{(1)}(kr), \qquad (3.18)$$

de modo que β_l é um coeficiente. A partir disso é utilizado o comportamento assintótico da função de Hankel,

$$H_l^{(1)}(kr) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \exp\left(ikr - \frac{i\pi}{4} - \frac{il\pi}{2}\right),\tag{3.19}$$

então a função de onda pode ser escrita como,

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \phi(\mathbf{r}) + \frac{\exp[ikr]}{\sqrt{r}} f(\theta - \alpha),$$
(3.20)

onde a amplitude de espalhamento $f(\theta - \alpha)$ é

$$f(\theta - \alpha) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \exp\left(\frac{-i\pi}{4}\right) \sum_{l=-\infty}^{\infty} \beta_l \exp(il\theta), \qquad (3.21)$$

e usando a análise de ondas parciais pode-se obter,

$$f_l = \beta_l \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \exp\left(\frac{-i\pi}{4}\right), \qquad (3.22)$$

e comparando com a equação (3.12) é calculado o desvio de fase δ_l

$$\delta_l = \frac{\log(1+2\beta_l)}{2i},\tag{3.23}$$

que é uma comparação direta entre o desvio de fase e a solução analítica da função de onda.

3.3 Parede de contorno

Uma pare de contorno é definida através de um potencial $V({\bf r})$ de modo que,

$$V(\vec{r}) = \int_C ds \ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s))\gamma(s), \qquad (3.24)$$

onde C é uma curva representada por uma circunferência de raio R e que é parametrizada pelo vetor $\mathbf{r}(s)$,

$$\mathbf{r}(s) = (R\cos s, R\sin s), \qquad (3.25)$$

onde s é um parâmetro que pertence ao intervalo $[0, 2\pi]$. Então para esse caso, a equação (3.5) se torna,

$$\psi^{+}(r,\theta) = \phi^{+}(r,\theta) + (3.26) + R\sigma\gamma \int_{0}^{2\pi} H_{0}^{(1)} \left(k\sqrt{r^{2} + R^{2} - 2rR\cos(s-\theta)}\right)\psi^{+}(R,s) \, ds,$$

que é uma equação de Fredholm de segunda espécie cujo núcleo é,

$$H_0^{(1)}\left(k\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos(s-\theta)}\right).$$
 (3.27)

Essa equação é resolvida através da equação de autovalor para um operador integral, que será explorada na subseção 3.3.1.

3.3.1 Autofunção de um operador integral

Considere o operador integral $\mathbb F,$

$$\mathbb{F} = \int_0^{2\pi} H_0^{(1)} \left(k \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos(s-\theta)} \right) \, ds, \qquad (3.28)$$

que é essencial para determinar a solução da equação de LS, que pode ser resumidamente escrita $\psi^+ = \phi^+ + \mathbb{F}\psi^+$, portanto será calculada as autofunções desse operador integral,

$$F(\theta) = \lambda \int_0^{2\pi} H_0^{(1)} \left(k \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos(s-\theta)} \right) F(s) \, ds, \qquad (3.29)$$

onde $F(\theta)$ é a autofunção¹ do operador integral, λ é o valor característico e o autovalor é $1/\lambda$. Utilizando-se da expansão de Graff (equação 8.531 da referência [31]),

$$H_0^{(1)}\left(k\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos(s-\theta)}\right) = J_0(kr)H_0^{(1)}(kR)$$

$$+2\sum_{l=1}^{\infty} J_l(kr)H_l^{(1)}(kR)\cos(l(s-\theta)),$$
(3.30)

onde $J_l(z)$ é a função de Bessel de ordem l e escrevemos r < R para encontrar a solução interna (para encontrar a solução exterior r > R apenas é necessário trocar $r \in R$ na equação anterior). Então podemos integrar (3.29) em relação à θ ,

$$g_{0} = 2\pi\lambda J_{0}(kr)H_{0}^{(1)}(kR)g_{0} +$$

$$+2\lambda\sum_{l=1}^{\infty}J_{l}(kr)H_{l}^{(1)}(kR)\int_{0}^{2\pi}\int_{0}^{2\pi}F(s)\cos[l(s-\theta)]\,ds\,d\theta,$$
(3.31)

onde foi definido $g_0 = \int_0^{2\pi} F(\theta) d\theta$. A integral em θ no lado direito se anula, portanto λ_0 ,

$$\lambda_0 = \frac{1}{2\pi J_0(kr) H_0^{(1)}(kR)} \tag{3.32}$$

 $^{^1{\}rm \acute{E}}$ importante não confundir a autofunção do operador integral com a autofunção do Hamiltoniano, ambos não são necessariamente iguais.

que é o valor característico λ_0 associado à autofunção $F(\theta) = 1$. O próximo passo é encontrar os autovalores $1/\lambda$ e suas autofunções correspondentes. Para isso, multiplica-se a equação (3.29) por $\cos(m\theta)$ e integramos em θ ,

$$g_m = 2\lambda_m \sum_{l=1}^{\infty} J_l(kr) H_l^{(1)}(kR) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} F(s) \cos[l(s-\theta)] \cos(m\theta) \, ds \, d\theta,$$
(3.33)

onde $g_m = \int_0^{2\pi} F(\theta) \cos(m\theta) d\theta$. Utilizando-se da fórmula de soma de arcos e da relação de ortogonalidade,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(l(s-\theta)) \cos(m\theta) d\theta ds = \pi g_l \delta_{l,m}, \qquad (3.34)$$

então a equação torna-se,

$$g_m = 2\pi g_m \lambda_m J_m(kr) H_m^{(1)}(kR),$$
 (3.35)

portanto o autovalor $1/\lambda_m$ associado com a autofunção $\cos(m\theta)$ é dado por,

$$\lambda_m = \frac{1}{2\pi J_m(kr)H_m^{(1)}(kR)}.$$
(3.36)

O mesmo autovalor é encontrado ao multiplicar a equação (3.29) por $\sin(m\theta)$ e integrar em θ . Então esse mesmo autovalor é associado a $\sin(m\theta)$, i.e., é degenerado.

3.4 Solução através da expansão

Nessa subseção será resolvida a equação de LS usando as autofunções do operador integral. Essas autofunções formam um conjunto completo, que é exatamente a base usada na série de Fourier. Portanto, será efetuada a expansão em série de Fourier para as funções $\psi \in \phi$,

$$\psi(\vec{r}) = \frac{a_0(r)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n(r) \cos(n\theta) + b_n(r) \sin(n\theta), \qquad (3.37)$$

$$\phi(\vec{r}) = \frac{c_0(r)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n(r) \cos(n\theta) + d_n(r) \sin(n\theta), \qquad (3.38)$$

onde $\phi(\vec{r})$ é a onda plana incidente. Pode-se determinar os coeficientes c_0 , c_n e d_n usando relação de ortogonalidade entre as funções seno e cosseno, assim como a representação integral das funções de Bessel — integral de número 2.5.40.10 da referência [32] —

$$\int_{a}^{a+2\pi} \exp{(i\nu z - w\sin{z})} dz = 2\pi J_{\nu}(w), \qquad (3.39)$$

onde $|\arg(z)| < \pi \in \nu \in \mathbb{Z}$. A onda plana incidente pode ser escrita como,

$$\phi(\vec{r}) = \exp\left(i\vec{k}\cdot\vec{r}\right) = \exp\left[ikr\cos(\theta - \alpha)\right],\tag{3.40}$$

onde α é o angulo entre a direção positiva do eixo x e o vetor de onda \vec{k} . Então os coeficientes da série de Fourier podem ser calculados,

$$c_0(r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left[(ikr\cos(\theta - \alpha))\right] d\theta = 2J_0(kr), \quad (3.41)$$

$$c_n(r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left[ikr\cos(\theta - \alpha)\right] \cos(n\theta) d\theta = 2i^n J_n(kr)\cos(n\alpha), \quad (3.42)$$

е

$$d_n(r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left[ikr\sin(\theta - \alpha)\right] \cos(n\theta) d\theta = -2i^n (-1)^n J_n(kr)\sin(n\alpha).$$
(3.43)

Então, para encontrar os coeficientes da expansão na equação (3.37), é substituído na integral da equação (3.26),

$$\int_{0}^{2\pi} H_{0}^{(1)} \left(k \sqrt{r^{2} + R^{2} - 2rR\cos(s - \theta)} \right) \psi(R, s) \, ds = (3.44)$$
$$= \frac{a_{0}(R)}{2\lambda_{0}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_{n}} \left[a_{n}(R)\cos(n\theta) + b_{n}(R)\sin(n\theta) \right],$$

então são encontrados os coeficientes da série de Fourier da função de onda $\psi,$

$$a_0(r) = c_0(r) + 2\pi\gamma\sigma Ra_0(R)J_0(kr)H_0^{(1)}(kR), \qquad (3.45)$$

assim como,

$$a_n(r) = c_n(r) + 2\pi\gamma\sigma Ra_n(R)J_n(kr)H_n^{(1)}(kR), \qquad (3.46)$$

e,

$$b_n(r) = d_n(r) + 2\pi\gamma\sigma Ra_n(R)J_n(kr)H_n^{(1)}(kR), \qquad (3.47)$$

avaliando a equação (3.45) em r = R e usando (3.41),

$$a_0(r) = 2J_0(kr) \left(1 + \frac{2\pi\gamma\sigma R J_0(kR) H_0^{(1)}(kR)}{1 - 2\pi\gamma\sigma R J_0(kR) H_0^{(1)}(kR)} \right),$$
(3.48)

e repetindo o mesmo procedimento acima, tem-se,

$$a_n(r) = 2i^n J_n(kr) \cos n\alpha \left(1 + \frac{2\pi\gamma\sigma R J_n(kR) H_n^{(1)}(kR)}{1 - 2\pi\gamma\sigma R J_n(kR) H_n^{(1)}(kR)} \right)$$
(3.49)

e

$$b_n(r) = 2i^n (-1)^{n+1} J_n(kr) \sin(n\alpha) \left(1 + \frac{2\pi\gamma\sigma R J_n(kR) H_n^{(1)}(kR)}{1 - 2\pi\gamma\sigma R J_n(kR) H_n^{(1)}(kR)} \right).$$
(3.50)

Para a região exterior, r > R, é modificada a equação (3.30),

$$H_0^{(1)}\left(k\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos(s-\theta)}\right) = J_0(kR)H_0^{(1)}(kr)$$

$$+2\sum_{l=1}^{\infty} J_l(kR)H_l^{(1)}(kr)\cos[l(s-\theta)],$$
(3.51)

e aplica-se a metodologia de forma análoga de modo que são obtidos os coeficientes da série de Fourier para a função de onda $\psi,$

$$a_0(r) = 2\left(J_0(kr) + \frac{2\pi\gamma\sigma R J_0^2(kR)}{1 - 2\pi\gamma\sigma R J_0(kR) H_0^{(1)}(kR)} H_0^{(1)}(kr)\right), \qquad (3.52)$$

$$a_n(r) = 2i^n \cos(n\alpha) \left(J_n(kr) + \frac{2\pi\gamma\sigma R J_n^2(kR)}{1 - 2\pi\gamma\sigma R J_n(kR) H_n^{(1)}(kR)} H_n^{(1)}(kr) \right),$$
(3.53)

е

$$b_n(r) = 2i^n (-1)^{n+1} \sin(n\alpha) \left(J_n(kr) + \frac{2\pi\gamma\sigma R J_n^2(kR)}{1 - 2\pi\gamma\sigma R J_n(kR) H_n^{(1)}(kR)} H_n^{(1)}(kR) \right),$$
(3.54)

Definindo $w_n(\gamma)$,

$$w_n(\gamma) = \frac{2\pi\gamma\sigma R J_n(kR) H_n^{(1)}(kR)}{1 - 2\pi\gamma\sigma R J_n(kR) H_n^{(1)}(kR)},$$
(3.55)

e $u_n(\gamma)$,

$$u_n(\gamma) = \frac{w_n(\gamma)J_n(kR)}{H_n^{(1)}(kR)},$$
(3.56)

É possível escrever a solução interior como,

$$\psi(\mathbf{r}) = J_0(kr)[1+w_0(\gamma)] + 2\sum_{n=1}^{\infty} i^n J_n(kr)[1+w_n(\gamma)] \cos\left[n(\theta+(-1)^n\alpha)\right],$$
(3.57)

enquanto que a exterior é

$$\psi(\mathbf{r}) = J_0(kr) + u_0(\gamma)H_0^{(1)}(kr) + 2\sum_{n=1}^{\infty} i^n \left[J_n(kr) + u_n(\gamma)H_n^{(1)}(kr)\right] \\ \times \cos\left[n(\theta + (-1)^n\alpha)\right].$$
(3.58)

Note que o potencial é invariante sob rotação, portanto o espalhamento ocorre de maneira semelhante para qualquer ângulo de incidência α . Tendo isso em mente, pode-se escolher o ângulo de incidência $\alpha = 0$, com o único objetivo de simplificar a solução. Observe também que os termos dos somatórios são pares com relação ao índice, ou seja,

$$i^{-n}J_{-n}(kr) = i^n J_n(kr), (3.59)$$

e o mesmo vale para $w_n(\gamma)$ e $u_n(\gamma)$. Por fim as soluções se tornam,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(kr) [1 + w_n(\gamma)] \exp(in\theta), \qquad (3.60)$$

para a parte interna, enquanto que para a parte externa,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n \left[J_n(kr) + u_n(\gamma) H_n^{(1)}(kr) \right] \exp\left(in\theta\right).$$
(3.61)

3.4.1 Comparação

É feita a comparação entre a solução analítica e a numérica com o objetivo de verificar se a solução encontrada é a correta. Então é utilizado o método de paredes de contorno (BWM) do apêndice A, por ser um método que fornece resultados confiáveis [33]. O método numérico foi implementado no *software* Mathematica a fim de reproduzir as soluções numéricas.



Figura 3.1: O espalhamento de uma onda plana incidente por uma barreira circular (circunferência preta). Na esquerda é mostrada a densidade de probabilidade calculada usando as soluções exatas (3.57) e (3.58). Na direita é apresentada a densidade de probabilidade calculada usando o método de paredes de contorno. A constante de acoplamento $\gamma = 2$ e a curva foi divida em 100 partes e pode-se observar que a função de onda atravessa a barreira.

A solução exata será comparada com a numérica, nessa subseção, através de alguns exemplos. Foi escolhido $\hbar = m = 1$ e o raio da circunferência R = 1. No método numérico, a barreira foi dividida em N = 100 partes e na solução analítica nós truncamos a série em 50 termos. As funções foram normalizadas sobre seus valores máximos. Então, no primeiro exemplo, escolhemos $\gamma = 2$ e a direção de propagação da onda plana incidente da esquerda para a direita (direção +x), ou seja, $\alpha = 0$ com o número de onda $k_{1,1} = z_{1,1}/R$, onde $z_{n,m}$ é o *m*-ésimo zero da função de Bessel $J_n(z)$. Na fig. 3.1, pode-se notar dois gráficos de cores, que mostram a função de onda devido ao espalhamento pela barreira. Tais funções foram obtidas através do método numérico e através da solução analítica. Pode-se observar um excelente acordo entre os dois casos. Com o objetivo de verificar esse excelente acordo, foi calculado (ponto a ponto) o modulo da diferença entre os módulos quadrados das duas soluções $||\psi_e|^2 - |\psi_n|^2|$, e o maior valor encontrado foi de 0.07, onde ψ_e e ψ_n



Figura 3.2: Gráfico da densidade de probabilidade para uma onda plana incidente espalhada por uma barreira circular impenetrável. Na figura da esquerda está presente a solução exata enquanto que a da direita está presente a numérica usando o método de paredes de contorno. Em ambos os casos o número de onda é $k_{1,1} = z_{1,1}/R$ e se propaga para a direita. Aqui pode-se observar o tunelamento. A maior diferença entre ambas as soluções é de 0.1. Aqui foi usado $\hbar = m = 1, R = 1$ e a barreira foi divida em 300 partes e o domínio em uma malha de 101 × 101.

são as soluções das funções de onda analítica e numérica respectivamente.

Ressonância e Tunelamento

Em um segundo e terceiro exemplo foi estudado o caso onde o potencial ao longo da barreira é infinito ($\gamma \to \infty$), ou seja a barreira é impenetrável. Ao escolher o valor do número de onda relacionado com um zero da função de Bessel de ordem p da forma $k_{p,m} = z_{p,m}/R$, é possível observar que o termo $w_{\pm p}(\gamma) = 0$, enquanto que todos os os outros termos são,

$$w_n(\gamma) = -1 \qquad \forall n \neq \pm p. \tag{3.62}$$

Isso significa que, dentro da circunferência, apenas os termos de ordem p não se anulam, como por exemplo o caso $k_{p,m} = k_{1,1}$, que possui solução interna,

$$\psi(r,\theta) = 2iJ_1\left(\frac{z_{1,1}r}{R}\right)\cos\theta.$$
(3.63)

Essa solução é a mesma para o problema de uma partícula confinada em poço circular infinito, quando o valor esperado do momento angular é zero. Em outras palavras, é uma superposição de autoestados

$$\psi(r,\theta) = J_1\left(\frac{z_{1,1}r}{R}\right)e^{i\theta} + J_1\left(\frac{z_{1,1}r}{R}\right)e^{-i\theta}.$$
(3.64)

Observa-se então que o efeito de tunelamento ocorre somente quando o número de onda da onda plana incidente coincide com uma autoenergia de uma partícula confinada em um poço circular infinito de modo que sua solução (interna) é,

$$\psi(r,\theta) = 2i^p J_p(k_{p,m}r) \cos p\theta.$$
(3.65)

A comparação para esse caso pode ser observada usando as duas soluções exata e numérica na figura 3.2.

Quando é alterado o número de onda para um valor diferente daquele associado à autoenergia de uma partícula confinada em um poço de potencial circular infinito, a função de onda se anula. Então, quando o número de onda obedece a relação $kR \neq z_{n,m}$ tem-se que,

$$\lim_{\gamma \to \infty} w_n(\gamma) = -1, \tag{3.66}$$

para todos os n inteiros. Na figura 3.3 está presente um gráfico de densidade de probabilidade, onde foi considerada a onda plana tendo o número



Figura 3.3: Gráfico de cores da densidade de probabilidade de uma onda plana que foi espalhada por uma circunferência. Na figura à esquerda está presente a solução analítica enquanto que a da direita está presente a solução numérica usando o método de paredes de contorno. Note que, para o número de onda k = 4, a solução exata possui valores nulos dentro da barreira, enquanto que na solução numérica existem pequenos valores na parte interna. Nesse caso dividimos a barreira em 300 partes e o domínio é uma malha de 101×101 .

de onda diferente de um zero da Bessel. Por esse motivo, a densidade de probabilidade da solução exata é nula dentro da barreira. Com o objetivo de verificar essa solução, foi dividida a barreira em 300 segmentos e foi calculada numericamente a solução. A diferença entre as densidades de probabilidades das duas soluções (exata e numérica) é menor que 0.05, um resultado que confirma a exatidão da solução analítica. Por fim, esse exemplo ilustra que a solução encontrada é a exata. Para futuras comparações serão escritas as soluções interna e externa para o caso da circunferência na condição de ressonância,

$$\psi_i(r,\theta) = 2i^p J_p\left(k_{p,m}r\right)\cos p\theta,\tag{3.67}$$

onde ψ_i é a função de onda interna, enquanto que ψ_o ,

$$\psi_o(r,\theta) = \phi(\mathbf{r}) - \sum_{n \neq \pm p} i^n \frac{J_n(k_{p,m}r)}{H_n^{(1)}(k_{p,m}r)} H_n^{(1)}(kr) \exp\left[in\theta\right], \qquad (3.68)$$

é a solução da parte externa à circunferência. Também é possível encontrar as soluções usando a função de Green total do problema, que é a função de Green envolvendo o potencial. Tal procedimento é apresentado na subseção seguinte.

3.4.2 Função de Green total

Uma outra maneira de obter a solução analítica é através da seguinte equação,

$$\psi^{+}(\mathbf{r}) = \phi^{+}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbb{R}^{2}} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \phi^{+}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \qquad (3.69)$$

onde $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de Green do problema envolvendo o potencial que pode ser obtida através de uma equação integral para funções de Green [34, 35, 36, 37],

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int_{\mathbf{R}^2} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') V(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') d^2 \mathbf{r}'', \qquad (3.70)$$

Nota que, a equação (3.70) também é uma equação integral, onde o que queremos encontrar é o $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, enquanto que o potencial é conhecido e a função $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de Green relacionado com o problema da partícula livre equação (3.3), e o potencial $V(\mathbf{r}'')$ é referente à circunferência,

$$V(\mathbf{r}'') = \gamma R \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\delta(r'' - R)\delta(\theta'' - s)}{r''} ds.$$
(3.71)

Para resolver a equação integral, foi utilizada a expansão de Graff (equação (3.30) que é idêntica à seguinte equação),

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sigma \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr_{<}) H_l^{(1)}(kr_{>}) e^{il(\theta - \theta')}, \qquad (3.72)$$

onde $r_<=\min[r,r'],\,r_>=\max[r,r'],$ e foi substituída dentro da integral, de modo que a equação se torna

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + R\gamma \sigma \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr_{2<}) H_l^{(1)}(kr_{2>}) e^{il\theta} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ils} G(R, s, r', \theta') ds,$$
(3.73)

onde $r_{2<} = \min[r, R]$, $r_{2>} = \max[r, R]$. Ambos os lados da equação pode ser multiplicada por $e^{-il\theta}$ e são integrados, com respeito a θ de $-\pi$ até π , e avaliado em r = R, desse modo pode-se isolar a integral e obter

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{-ims} G(R, s, r', \theta') ds = \frac{2\pi\sigma J_m(kr_{3<}) H_m^{(1)}(kr_{3>}) e^{-im\theta'}}{1 - 2\pi R\sigma J_m(kR) H_m^{(1)}(kR)}, \qquad (3.74)$$

onde $r_{3<} = Min[r', R]$ e $r_{3>} = Max[r', R]$. Finalmente, o resultado é

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + 2\pi R \gamma \sigma^2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{J_l(kr_{2<}) H_l^{(1)}(kr_{2>}) J_l(kr_{3<}) H_l^{(1)}(kr_{3>})}{1 - 2\pi R \gamma \sigma J_l(kR) H_l^{(1)}(kR)} e^{il(\theta - \theta')}$$
(3.75)

Com essa função de Green pode-se encontrar os mesmos resultados, presentes nas equações 3.60 e 3.61, substituindo-a na equação (3.69).

3.5 Múltiplas paredes de contorno circulares

Nessa seção será calculada a função de onda devido ao espalhamento por múltiplas Paredes de Contorno Circulares. Primeiramente, será mostrada a solução, para duas circunferências concêntricos, e depois será discutido o efeito de ressonância e o de invisibilidade e suas conexões com as linhas nodais.

3.5.1 Solução para duas circunferências

As duas barreiras são circunferências concêntricas de raios R_1 e R_2 , e possuem a constante de acoplamento γ_1 e γ_2 , respectivamente. Por simplicidade assumimos $R_1 < R_2$. Portanto, o potencial pode ser descrito como,

$$V(\mathbf{r}) = \int_{C_1} ds_1 \ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s_1))\gamma_1 + \int_{C_2} ds_2 \ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s_2))\gamma_2, \qquad (3.76)$$

que é o mesmo que,

$$V(\mathbf{r}') = R_1 \gamma_1 \int_{-\pi}^{\pi} \delta(r' - R_1) \frac{\delta(\theta' - s)}{r'} ds + R_2 \gamma_2 \int_{-\pi}^{\pi} \delta(r' - R_2) \frac{\delta(\theta' - s)}{r'} ds.$$
(3.77)

Substituindo esse potencial na equação de LS,

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \sigma \gamma_1 R_1 \int_{-\pi}^{\pi} H_0^{(1)} \left(k |\mathbf{r} - \mathbf{r}(s_1)| \right) \psi(R_1, s_1) ds_1 \quad (3.78)$$
$$+ \sigma \gamma_2 R_2 \int_{-\pi}^{\pi} H_0^{(1)} \left(k |\mathbf{r} - \mathbf{r}(s_2)| \right) \psi(R_2, s_2) ds_2.$$

Como foi visto no caso de uma circunferência, as funções seno, cosseno e constante são autofunções do operador integral, portanto expandir as funções em série de Fourier é um bom procedimento para resolver essas equações integrais. Expandindo $\phi \in \psi$ em série de Fourier,

$$\phi(\mathbf{r}) = \exp\left(ikx\right) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l J_l(kr) \exp\left(il\theta\right), \qquad (3.79)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_l(r) \exp\left(il\theta\right), \qquad (3.80)$$

onde $c_l(r) = (1/2\pi) \int_{-\pi}^{\pi} \psi(r) \exp(-il\theta) d\theta$, e a função de Hankel é substituída pela expansão de Graf, equação (3.72), o que torna a equação (3.78),

$$c_{l}(r) = 2\pi i^{l} J_{l}(kr) + 2\pi R_{1} \gamma_{1} \sigma c_{l}(R_{1}) J_{l}(kr_{1<}) H_{l}^{(1)}(kr_{1>}) + + 2\pi R_{2} \gamma_{2} \sigma c_{l}(R_{2}) J_{l}(kr_{2<}) H_{l}^{(1)}(kr_{2>}), \qquad (3.81)$$

para chegar na equação acima, foi multiplicado por $\exp il\theta$ e integrado de 0 a 2π . Os sub-índices na variável r significam $r_{i<} = \min[R_i, r]$ e $r_{i<} = \max[R_i, r]$. Para resolver a equação (3.81), o coeficiente $c_l(r)$ é avaliado em $R_1 \in R_2$

$$c_{l}(R_{1}) = 2\pi i^{l} J_{l}(kR_{1}) + 2\pi R_{1} \gamma_{1} \sigma c_{l}(R_{1}) J_{l}(kR_{1}) H_{l}^{(1)}(kR_{1}) + + 2\pi R_{2} \gamma_{2} \sigma c_{l}(R_{2}) J_{l}(kR_{1}) H_{l}^{(1)}(kR_{2}), \qquad (3.82)$$

$$c_{l}(R_{2}) = 2\pi i^{l} J_{l}(kR_{2}) + 2\pi R_{1} \gamma_{1} \sigma c_{l}(R_{1}) J_{l}(kR_{1}) H_{l}^{(1)}(kR_{2}) + + 2\pi R_{2} \gamma_{2} \sigma c_{l}(R_{2}) J_{l}(kR_{2}) H_{l}^{(1)}(kR_{2}).$$
(3.83)

Com o objetivo de facilitar a escrita e a visualização das equações, é introduzido uma nova notação,

$$J_l(kR_i) = J_i \qquad H_l^{(1)}(kR_i) = H_i, \qquad (3.84)$$

e portanto tem-se um sistema de equações para $c_l(R_1)$ e $c_l(R_2)$,

$$\begin{pmatrix} 1 - 2\pi R_1 \gamma_1 \sigma J_1 H_1 & 2\pi R_2 \gamma_2 \sigma J_1 H_2 \\ 2\pi R_1 \gamma_1 \sigma J_1 H_2 & 1 - 2\pi R_2 \gamma_2 \sigma J_2 H_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_l(R_1) \\ c_l(R_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\pi i^l J_1 \\ 2\pi i^l J_2 \end{pmatrix}.$$
 (3.85)

Resolvendo esse sistema para $c_l(R_1) \in c_l(R_2)$,

$$c_l(R_1) = \frac{i^l J_1}{D},$$
(3.86)

$$c_l(R_2) = \frac{i^l}{D} \left[J_2 + 2\pi R_1 \gamma_1 \sigma J_1 \left(J_1 H_2 - J_2 H_1 \right) \right], \qquad (3.87)$$

e D é o denominador

$$D = 1 - 2\pi R_1 \gamma_1 \sigma J_1 H_1 - 2\pi R_2 \gamma_2 \sigma J_2 H_2$$

-4\pi^2 R_1 R_2 \gamma_1 \gamma_2 \sigma^2 J_1 H_2 (J_1 H_2 - J_2 H_1). (3.88)

Esse denominador é o determinante da matriz 2 × 2 da equação (3.85). Dessa forma, pode-se substituir $c_l(R_1)$ e $c_l(R_2)$ na equação (3.81) para encontrar a solução. Portanto, será escrita a função de onda em três regiões, dentro da circunferência menor (ψ_1), na região intermediária (ψ_2) e fora da circunferência maior (ψ_3),

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_1 i^l \exp(il\theta) J_l(kr), \qquad (3.89)$$

$$\psi_2(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l \exp(il\theta) \left[\alpha_2 J_l(kr) + \beta_2 H_l^{(1)}(kr) \right], \qquad (3.90)$$

$$\psi_3(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \beta_3 i^l \exp[il\theta] H_l^{(1)}(kr), \qquad (3.91)$$



Figura 3.4: Gráfico de cores da densidade de probabilidade, de modo que as cores mais claras representam os maiores valores enquanto que as mais escuras os menores valores. Os raios dos círculos são $R_1 = 1$ e $R_2 = 2$, e os parâmetros do potencial são $\gamma_1 = 1$ e $\gamma_2 = 2$. O número de onda da onda plana incidente é k = 2.

onde os coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, \beta_2, \beta_3$ foram obtidos substituindo $c_l(R_1)$ e $c_l(R_2)$ na equação (3.81),

$$\alpha_{1} = \frac{1}{D} [2\pi R_{1} \gamma_{1} \sigma J_{1} H_{1} + 2\pi R_{2} \gamma_{2} \sigma J_{2} H_{2} + 4\pi^{2} R_{1} R_{2} \gamma_{1} \gamma_{2} \sigma^{2} J_{1} H_{2} (J_{1} H_{2} - J_{2} H_{1})], \qquad (3.92)$$

$$\alpha_{2} = \frac{1}{D} [+2\pi R_{2} \gamma_{2} \sigma J_{2} H_{2} + 4\pi^{2} R_{1} R_{2} \gamma_{1} \gamma_{2} \sigma^{2} J_{1} H_{2} (J_{1} H_{2} - J_{2} H_{1})], \qquad (3.93)$$

n	$\delta_n(0.2)$	$\delta_n(2)$	$\delta_n(20)$
0	-0.95	-1.18	-0.09
± 1	-0.09	1.00	-0.21
± 2	$\approx 10^{-3}$	1.51	-0.09
± 3	$\approx 10^{-6}$	-0.87	-0.23
± 4	$\approx 10^{-8}$	-0.35	-0.06
l(k)	13.64	11.37	0.73

Tabela 3.1: Valores de desvio de fase $\delta_n(k)$ e o comprimento de choque total l(k) para k = 2, k = 0.2 e k = 20. Os valores de para os raios e paras os parâmetros dos potenciais são os mesmos do exemplo contido na figura 3.4.

$$\beta_2 = \frac{2\pi R_1 \gamma_1 \sigma(J_1)^2}{D},$$
(3.94)

$$\beta_3 = \frac{1}{D} [2\pi R_1 \gamma_1 \sigma (J_1)^2 + 2\pi R_2 \gamma_2 \sigma (J_2)^2 + 4\pi^2 R_1 R_2 \gamma_1 \gamma_2 \sigma^2 J_1 J_2 (J_1 H_2 - J_2 H_1)].$$
(3.95)

Com o objetivo de visualizar a função de onda, foi feito um gráfico onde a cor representa a densidade de probabilidade. Em todos os gráficos sobre as circunferências duplas foi utilizado $\hbar = m_e = 1$. Na figura 3.4 foi escolhido o número de onda da plana incidente k = 2, e os raios do círculos $R_1 = 1$ e $R_2 = 2$, e os parâmetros do potencial são $\gamma_1 = 1$ e $\gamma_2 = 2$.

3.5.2 Comportamento assintótico

Para determinar as grandezas relacionadas ao espalhamento, foi usada a solução exterior equação (3.91), onde seus coeficientes β_3 são dados pela equação (3.95). O desvio de fase é calculado usando a equação (3.23). Usando os valores obtidos para δ_l e as equações (3.16), (3.15) é possível determinar o comprimento de choque de espalhamento l. Usando o exemplo da figura 3.4, são mostrados alguns valores para o desvio de fase e o comprimento de cho-

que na tabela 3.1 para três valores de k. Foi feito um gráfico do comprimento de choque diferencial para os mesmos k na figura 3.5, foi truncada a série da equação (3.11) em n = 4 para k = 0.2, n = 10 para k = 2 e n = 50 para k = 20. Esses números de termos n são diferentes pois foi notado que a série precisa de mais termos para convergir conforme escolhemos valores maiores de k. Esse exemplo foi escolhido apenas para ilustar como é calculado o desvio de fase e o comprimento de choque de espalhamento. Esse procedimento será repetido na subseção 3.5.4 sobre invisibilidade.



Figura 3.5: Gráfico do comprimento de choque diferencial para os números de onda k = 0.2, k = 2 e k = 20. A série foi truncada para os valores de n = 5, n = 10 e n = 50, respectivamente. Os raios dos círculos são $R_1 = 1$ e $R_2 = 2$, os parâmetros dos potenciais são $\gamma_1 = 1$ e $\gamma_2 = 2$.

3.5.3 Ressonância

Nessa subseção serão apresentadas as condições para a ressonância, para duas paredes de contorno circulares quando $\gamma_1 \to \infty$ e $\gamma_2 \to \infty$.

Região interna

A dependência de γ_1 e γ_2 na equação (3.89) está contida em α_1 . Será analisado o comportamento de α_1 quando ambos os γ tendem ao infinito.

$$\lim_{\gamma_1 \to \infty} \lim_{\gamma_2 \to \infty} \alpha_1 = -1 \qquad \forall \ l \in \mathbb{N},$$
(3.96)

desde que sejam obedecidas as restrições $kR_1 \neq z_{l,n}$ ou/e $kR_2 \neq z_{l,m}$, onde $z_{l,n}$ e $z_{l,m}$ são zeros da função de Bessel de ordem *l*. Portanto, na região interna à circunferência menor, cada termo da soma na equação (3.89) cancela com cada termo de $\phi(\mathbf{r})$ (equação 3.79). Por outro lado, quando kR_1 e kR_2 são zeros da função de Bessel da mesma ordem p então $\alpha_p = 0$, então cada termo da equação (3.89) cancela um termo de $\phi(\mathbf{r})$, exceto para aqueles de ordem $p \in -p$. A solução interna então se torna,

$$\psi_1(\mathbf{r}) = i^p \exp(ip\theta) J_p(kr) + i^{-p} \exp(-ip\theta) J_{-p}(kr)$$

= $2i^p J_p(kr) \cos(p\theta).$ (3.97)

Região intermediária

A função de onda da equação (3.90) pertence à região entre as duas circunferências, ou seja $R_1 < r < R_2$. Os parâmetros do potencial γ_1 e γ_2 estão nos coeficientes α_2 e β_2 . É possível determinar o limite para os dois coeficientes. Ao calcular o limite para α_2 tem-se como resultado o mesmo de α_1 , por outro lado o coeficiente β_2 é

$$\lim_{\gamma_1 \to \infty} \lim_{\gamma_2 \to \infty} \beta_2 = 0 \qquad \forall \ l \in \mathbb{N},$$
(3.98)

para qualquer valor de k.

Região externa

Essa terceira região é a externa à circunferência maior, e a função de onda nessa região é $\psi_3(\mathbf{r})$. A mesma é analisada ao tomar o limite dos parâmetros tendendo ao infinito, que possui a seguinte forma,

$$\lim_{\gamma_1 \to \infty} \lim_{\gamma_2 \to \infty} \beta_3 = -\frac{J_l(kR_2)}{H_l^{(1)}(kR_2)} \qquad \forall \ l \in \mathbb{N},$$
(3.99)

portanto a equação (3.91) se torna,

$$\psi_3(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) - \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{J_l(kR_2)}{H_l^{(1)}(kR_2)} i^l \exp(il\theta) H_l^{(1)}(kr).$$
(3.100)

A partir dessa equação pode-se escrever sucintamente o desvio de fase,

$$\delta_l = \frac{1}{2i} \log \left(1 - 2 \frac{J_l(kR_2)}{H_l^{(1)}(kR_2)} \right), \qquad (3.101)$$

Note que o desvio de fase somente é identicamente zero quando kR_2 é um zero da função de Bessel. Isso ocorre porque esse termo da soma da função de onda (modo ou autoestado do momento angular) fica aprisionado dentro da circunferência, na figura 3.6 é mostrado um gráfico de cores da função de onda, de modo que o número de onda k e os raios das circunferências possuem a relação $kR_1 = z_{2,1}, kR_2 = z_{2,2}$ e k = 1. Nesse caso as expressões para a função de onda para as três regiões são,

$$\psi_2(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r}) = -2J_2(kr)\cos(2\theta),$$
 (3.102)

е,

$$\psi_3(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) - \sum_{l \neq \pm 2} \frac{J_l(kR_2)}{H_l^{(1)}(kR_2)} i^l \exp[il\theta] H_l^{(1)}(kr).$$
(3.103)

3.5.4 Invisibilidade

Nessa subseção são apresentadas algumas condições para tornar a circunferência interna invisível. Nessa tese é definida a invisibilidade como sendo a incapacidade de discernir a forma do potencial baseando-se apenas na detecção da onda espalhada longínqua a atuação do potencial. Portanto, desejase que a função de onda espalhada por duas paredes de contorno circulares concêntricas seja idêntica (ou aproximada) à onda espalhada por apenas uma circunferência. Em outras palavras, a circunferência interna se torna invisível para um detector posicionado longe da atuação do potencial. Os dois casos que foram identificados, onde ocorre a invisibilidade, são: quando $\gamma_1 = \gamma_2 \rightarrow \infty$ ou quando $\gamma_1 R_1/\gamma_2 R_2 \ll 1$.

Parâmetros infinitos

Nessa etapa é investigada a invisibilidade de paredes de contorno circulares com os parâmetros infinitos, $\gamma_1 = \gamma_2 \rightarrow \infty$. Ao analisar a condição de ressonância, $kR_1 = z_{p,n}$ e $kR_2 = z_{p,m}$ simultaneamente, nota-se que a função de onda é exatamente a mesma que aquela espalhada por apenas uma circunferência também na condição de ressonância $KR_2 = z_{p,m}$. Isso pode ser observado através das soluções para o espalhamento por duas circunferências (equações 3.97 e 3.100) e comparado com as soluções interna e externa para o espalhamento devido à presença de uma única circunferência (equação (3.67) e (3.68)). Para exemplificar essa situação são apresentados dois gráficos de cores de densidade de probabilidade, ambas ilustram o espalhamento devido a uma circunferência (figura 3.7). Na figura 3.7 a circunferência possui raio igual ao da circunferência externa da figura 3.6, que é $R_2 = z_{2,2}/k$. Em ambos os casos, tem-se k = 1, a circunferência interna possui raio $R_1 = z_{2,1}$. Portanto pode-se observar que a circunferência interna é completamente invisível para um detector situado longe da ação do potencial. Como as funções de onda são idênticas é impossível distinguir ambos os casos.

É importante salientar que isso ocorre pois a circunferência interna da figura 3.6 é posicionada exatamente na região denominada de linha nodal. Uma linha nodal é uma curva que é constituída de pontos onde a função de onda se anula. Em ambas as figuras 3.6 e 3.7, as linhas nodais são: as circunferências com raios relacionados com os zeros da função de Bessel de ordem dois, especificamente o primeiro e segundo zeros; e as retas correspondentes aos zeros da função angular cos 2θ , que são $\theta = \pm \pi/4$.

Segunda condição

A segunda condição encontrada é responsável por deixar a circunferência interna "quase invisível", ou seja, as funções de onda fora do potencial para os dois casos são numericamente próximas. Tal condição é

$$\frac{R_1\gamma_1}{R_2\gamma_2} \ll 1.$$
 (3.104)

Para mostrar tal afirmação, deve-se dividir cada termo da equação (3.95) por $(\gamma_2 R_2)^2$ e utilizar a relação presente na equação (3.104), então o coeficiente pode ser escrito como,

$$\beta_3 \approx \frac{2\pi R_2 \gamma_2 \sigma J_2^2}{1 - 2\pi R_2 \gamma_2 \sigma J_2 H_2},$$
(3.105)

que é aproximadamente $u_n(\gamma)$. Note que β_3 é o coeficiente presente na onda espalhada por duas circunferências e $u_n(\gamma)$ é o coeficiente da onda espalhada por uma circunferência apenas (equação (3.56)). Para comparar ambos os espalhamento, foi feito um gráfico de cores da densidade de probabilidade do espalhamento por uma e duas circunferências. Os gráficos estão presentes



Figura 3.6: Gráfico de cores da densidade de probabilidade de uma função de onda com número de onda k = 1. As cores mais claras indicam valores maiores de densidade de probabilidade, enquanto que o preto significa densidade de probabilidade nula. Os círculos possuem raios $R_1 = z_{2,1}/k$ e $R_2 = z_{2,2}/k$. Os parâmetros do potencial são considerados infinitos, $\gamma_1 = \gamma_2 \rightarrow \infty$. Devido à ressonância observa-se que existe função de onda dentro das circunferências.



Figura 3.7: Gráfico de cores para a função de onda espalhada por uma circunferência com raio $R = z_{2,2}/k$. Esse raio é o mesmo valor do raio da circunferência externa da figura 3.6. Para poder comparar com o caso de duas circunferências, foi escolhido o mesmo esquema de cores e mesmo número de onda. Essa função de onda é exatamente a mesma que aquela da figura 3.6.

nas figuras 3.8.a e 3.8.b, respectivamente. O número de onda usado nesse exemplo é k = 2, o raio do círculo interno é $R_1 = 1$, o raio do círculo externo $R_2 = 3$, os parâmetros dos potenciais são $\gamma_1 = 0.5$ e $\gamma_2 = 3$, de modo que a razão possui valor,

$$\frac{R_1 \gamma_1}{R_2 \gamma_2} \approx 0.056 \ll 1. \tag{3.106}$$

Deve-se notar que foram feitos gráficos de cores das densidades de probabilidades para o caso fora da condição de invisibilidade, que podem ser vistos nas figuras 3.8.c e 3.8.d. Nesse caso, o de visibilidade, os raios são exatamente os mesmo das anteriores, entretanto as constantes de intensidade do potencial são $\gamma_1 = 1$ e $\gamma_2 = 0.5$, fazendo com que a razão $R_1\gamma_1/R_2\gamma_2 \approx 0.6$. Com o objetivo de comparar as figuras 3.8.a e 3.8.b, foi calculada a diferença percentual entre $D_{\%}$ a densidade de probabilidade fora dos círculos,

$$D_{\%} = \frac{||\psi_o(x,y)|^2 - |\psi_3(x,y)|^2|}{M},$$
(3.107)

onde M é o maior valor de $|\psi_o|^2$. Na figura 3.9 foi percebido que o maior valor da diferença percentual é $D_{\%} = 4.52\%$, portanto pode-se afirmar que as funções de onda fora das circunferências são próximas. Foram calculados os desvios de fase para cada caso, como pode ser visto na tabela 3.2. Na quarta coluna da tabela pode ser vista a diferença relativa percentual. A mesma é calculada através do módulo da diferença dos desvios de fase e dividida pelo desvio de fase relacionado a uma circunferência. Foi calculada essa diferença com o objetivo de verificar o quão próximo o caso com duas circunferência está do caso de uma circunferência. Nesse exemplo, pode-se notar que a maior diferença relativa percentual ocorre para l = 3, que possui valor próximo à 9.3%.



Figura 3.8: Gráfico de cores da densidade de probabilidade. O raio das circunferências externas das figuras a) e b) e as das figuras c) e d) valem $R_2 = 3$, enquanto que o raio interno das circunferências das figuras a) e c) são $R_1 = 1$. Os potenciais da figura a) possui parâmetros que pertencem à condição de invisibilidade, fazendo com que a densidade de probabilidade na parte externa à circunferência se assemelhe a da figura b). Em contraste, os parâmetros referentes aos potenciais da figura c) não são válidos para a condição de invisibilidade, ou seja, a densidade de probabilidade, na região exterior à circunferência maior, é diferente daquela presente na figura d).



Figura 3.9: Gráfico da diferença percentual $D_{\%}$ calculada pela diferença das densidades de probabilidades dos espalhamentos presentes nas figuras 3.8.a e 3.8.b. O cilindro em preto representa a circunferência.

3.5.5 Múltiplas circunferências

Nessa subseção será apresentada a solução para a função de onda espalhada por N circunferências. Nessa generalização para N circunferências concêntricas, serão assumidas as notações,

$$R_1 < R_2 < \dots < R_N, \tag{3.108}$$

e para as funções cilíndricas (Bessel e Hankel), será usada a mesma que a equação (3.84), e para cada circunferência de raio R_i é associado um

1	Uma Circunferência	Duas Circunferências	Diferença relativa
0	2.8611	2.8413	pprox 0.7%
1	1.4019	1.3377	$\approx 4.6\%$
2	2.5674	2.5507	pprox 0.7%
3	1.3976	1.2683	pprox 9.3%
4	1.5722	1.5721	pprox 0.006%

Tabela 3.2: Tabela contendo os desvios de fase para o espalhamento por uma e por duas circunferências. Na quarta coluna está presente a diferença relativa percentual, que foi calculada como sendo o modulo da diferença entre os desvios de fase e depois dividido pelo desvio de fase relacionado a uma circunferência.

parâmetro do potencial γ_i . Portanto escreve-se a equação de LS,

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \sigma \gamma_1 R_1 \int_{-\pi}^{\pi} H_0^{(1)} \left(k |\mathbf{r} - \mathbf{r}(s_1)| \right) \psi(R_1, s_1) ds_1 \quad (3.109) + \sigma \gamma_2 R_2 \int_{-\pi}^{\pi} H_0^{(1)} \left(k |\mathbf{r} - \mathbf{r}(s_2)| \right) \psi(R_2, s_2) ds_2 + \dots + + \sigma \gamma_N R_N \int_{-\pi}^{\pi} H_0^{(1)} \left(k |\mathbf{r} - \mathbf{r}(s_N)| \right) \psi(R_N, s_N) ds_N,$$

ou de modo mais compacto,

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \sum_{n=1}^{N} \sigma \gamma_n R_n \int_{-\pi}^{\pi} H_0^{(1)} \left(k |\mathbf{r} - \mathbf{r}(s_n)| \right) \psi(R_n, s_n) ds_n.$$
(3.110)

Aplicando a mesma metodologia do problema de duas barreiras expandindo as funções de onda ($\phi(\mathbf{r}) \in \psi(\mathbf{r})$) em série de Fourier e usando a expansão de Graf equação (3.72),

$$c_l(r) = 2\pi i^l J_l(kr) + \sum_{n=1}^N 2\pi R_n \gamma_n \sigma c_l(R_n) J_l(kr_{n<}) H_l^{(1)}(kr_{n>}), \qquad (3.111)$$

onde $c_l(r)$ são os coeficientes da série de Fourier da função de onda $\psi(\mathbf{r})$. A partir disso, pode-se avaliar o coeficiente na região de cada barreira $r = R_1$, $r=R_2,\ldots$ e $r=R_N.$ Ao longo da primeira,

$$c_{l}(R_{1}) = 2\pi i^{l} J_{l}(kR_{1}) + 2\pi R_{1} \gamma_{1} \sigma c_{l}(R_{1}) J_{l}(kR_{1}) H_{l}^{(1)}(kR_{1}) + (3.112)$$

+
$$\sum_{n=2}^{N} 2\pi R_{n} \gamma_{n} \sigma c_{l}(R_{n}) J_{l}(kR_{1}) H_{l}^{(1)}(kR_{n}),$$

avaliando na segunda,

$$c_{l}(R_{2}) = 2\pi i^{l} J_{l}(kR_{2}) + 2\pi R_{2} \gamma_{2} \sigma c_{l}(R_{2}) J_{l}(kR_{2}) H_{l}^{(1)}(kR_{2}) + (3.113)$$

+2\pi R_{1} \gamma_{1} \sigma c_{l}(R_{1}) J_{l}(kR_{1}) H_{l}^{(1)}(kR_{2}) +
+ \sum_{n=3}^{N} 2\pi R_{n} \gamma_{n} \sigma c_{l}(R_{n}) J_{l}(kR_{2}) H_{l}^{(1)}(kR_{n}),

e para a última barreira,

$$c_{l}(R_{N}) = 2\pi i^{l} J_{l}(kR_{N}) + 2\pi R_{N} \gamma_{N} \sigma c_{l}(R_{N}) J_{l}(kR_{N}) H_{l}^{(1)}(kR_{N}) + \sum_{n=1}^{N-1} 2\pi R_{n} \gamma_{n} \sigma c_{l}(R_{n}) J_{l}(kR_{n}) H_{l}^{(1)}(kR_{N}),$$
(3.114)

ou de maneira mais sucinta incluindo a notação da equação (3.84),

$$c_{l}(R_{j}) = 2\pi i^{l} J_{j} + 2\pi R_{j} \gamma_{j} \sigma c_{l}(R_{j}) J_{j} H_{j} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{j-1} 2\pi R_{n} \gamma_{n} \sigma c_{l}(R_{n}) J_{n} H_{j} +$$

$$+ \sum_{n=j+1}^{N} 2\pi R_{n} \gamma_{n} \sigma c_{l}(R_{n}) J_{j} H_{n},$$
(3.115)

onde j = 1, 2...N. Portanto, é possível montar um sistema de equações lineares da forma,

$$\mathbf{AC} = \mathbf{J},\tag{3.116}$$

onde C é uma matriz coluna de modo que cada elemento é um coeficiente $c_l(R_j)$,

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} c_l(R_1) \\ \vdots \\ c_l(R_j) \\ \vdots \\ c_l(R_N) \end{pmatrix}, \qquad (3.117)$$

enquanto que \mathbf{J} contém as funções de Bessel que não multiplicam os coeficientes da função de onda,

$$\mathbf{J} = 2\pi i^{l} \begin{pmatrix} J_{1} \\ \vdots \\ J_{j} \\ \vdots \\ J_{N} \end{pmatrix}, \qquad (3.118)$$

e a matriz ${\bf A}$ pode ser escrita na forma,

$$\mathbf{A} = \mathbb{1} - \mathbf{B},\tag{3.119}$$

onde B possui os termos com a multiplicação da função de Bessel e Hankel,

$$2\pi R_n \gamma_n \sigma J_l(kR_{mn<}) H_l^{(1)}(kR_{mn>}), \qquad (3.120)$$

onde $m \in n$ indicam as posições do termo dentro matriz, $m \in n$ úmero da linha e $n \in o$ da coluna, e os raios são $R_{mn<} = \min[R_m, R_n] \in R_{mn>} = \max[R_m, R_n].$

Para facilitar a visualização de ${f B}$ é apresentado na forma matricial,

$$\mathbf{B} = 2\pi\sigma \begin{pmatrix} R_1\gamma_1J_1H_1 & R_2\gamma_2J_1H_2 & \cdots & R_N\gamma_NJ_1H_N \\ R_1\gamma_1J_1H_2 & R_2\gamma_2J_2H_2 & \cdots & R_N\gamma_NJ_2H_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R_1\gamma_1J_1H_N & R_2\gamma_2J_2H_N & \cdots & R_N\gamma_NJ_NH_N \end{pmatrix}.$$
(3.121)

Portanto para encontrar os coeficientes é necessário inverter a matriz A

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{J},\tag{3.122}$$

de modo que a inversa pode ser obtida,

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \left[Cof \mathbf{A} \right]^T, \qquad (3.123)$$

onde $Cof \mathbf{A}$ é matriz composta pelos cofatores de \mathbf{A} , det é o determinante e o símbolo T é a operação transposta. Vale salientar que o determinante da matriz \mathbf{A} é exatamente o denominador presente na solução final para a função de onda $\psi(\mathbf{r})$. Após ser resolvida esse sistema de equações através das operações matriciais, tem-se a expressão para cada coeficiente avaliado em cima de cada barreira R_1, R_2, \dots e R_N . Para saber o valor do coeficiente em todo o espaço $c_l(r)$ deve-se substituir cada expressão obtida $(c_l(R_1), c_l(R_2),$ \dots e $c_l(R_N)$) na equação (3.111).

3.6 O Potencial como uma distribuição

Nesta seção será calculada a função de onda espalhada por um potencial que é representado por distribuições ao longo de uma circunferência. Primeiramente, será apresentado a solução para uma distribuição que é representada por uma delta de Dirac e por sua derivada, subseção 3.6.1. Em segundo lugar será mostrada a solução para uma distribuição arbitrária em uma circunferência de raio R.

3.6.1 Delta de Dirac e sua derivada

O potencial utilizado nessa subseção é

$$V(\mathbf{r}') = \int_{C} \frac{1}{r'} \left[\gamma_0 \delta(r' - r(s)) + \gamma_1 \delta^{(1)}(r' - r(s)) \right] \delta(\theta' - \theta(s)) ds, \quad (3.124)$$

onde r no denominador é o Jacobiano das coordenadas polares devido à delta de Dirac em duas dimensões, o γ_0 e γ_1 são os parâmetros do potencial, e s é a variável de parametrização. Usando a parametrização para uma circunferência $\mathbf{P}(s) = (R \cos s, R \sin s)$ é fácil de observar que o potencial se torna,

$$V(\mathbf{r}') = R \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{r'} \left[\gamma_0 \delta(r' - R) + \gamma_1 \delta^{(1)}(r' - R) \right] \delta(\theta' - s) ds.$$
(3.125)

Usando a expansão de Graf equação (3.72) e substituindo na equação de LS tem-se,

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + 2\pi R\sigma \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\theta} \times$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} J_l(kr_{<}) H_l^{(1)}(kr_{>}) \left[\gamma_0 \delta(r'-R) + \gamma_1 \delta^{(1)}(r'-R) \right] \psi_l(r') dr',$$
(3.126)

onde $r_{<} = \min[r', R]$ e $r_{>} = \max[r', R]$. Para encontrar a solução dentro da circunferência, são escritas a funções de onda ψ e ϕ como superposições de
autofunções de momento angular, ou seja, escritas como uma série de Fourier,

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \psi_l(r) e^{il\theta}, \qquad \phi(r,\theta) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l J_l(kr) e^{il\theta}, \qquad (3.127)$$

integramos em r', e tomamos o produto interno em θ , ou seja, multiplicamos por $\exp(im\theta)$ e integramos de $-\pi$ até π com relação à θ ,

$$\psi_l(r) = i^l J_l(kr) + 2\pi R \sigma J_l(kr) \Big[\gamma_0 H_l^{(1)}(kR) \psi_l(R) - \gamma_1 \partial_{r'} \left(H_l^{(1)}(kr') \psi_l(r') \right) |_{r'=R} \Big],$$
(3.128)

onde o último termo é a derivada do produto da função de Hankel e do coeficiente da função de onda com respeito à r' e depois são avaliados em r' = R. Será introduzida uma nova notação para simplificar a leitura,

$$\partial_{r'}^{(n)} \left(H_l^{(1)}(kr')\psi_l(r') \right)_{r'=R} = \left[H\psi \right]^{(n)}, \qquad (3.129)$$

onde o super-índice (n) é a derivada de ordem n seguida da avaliação em r = R, caso n = 0 nenhuma derivada é efetuada, apenas existirá a avaliação em r = R, portanto nesse caso específico os colchetes serão omitidos. Então escreve-se a equação (3.128) como,

$$\psi_l(r) = i^l J_l(kr) + 2\pi R\sigma J_l(kr) \Big[\gamma_0 H \psi - \gamma_1 \left[H \psi \right]^{(1)} \Big].$$
(3.130)

Multiplicando a equação (3.130) pela função de Hankel e tomando a derivada em r, depois avaliando em R e rearranjando os termos,

$$\left(1 + 2\pi R \sigma \gamma_1 \left[JH\right]^{(1)}\right) \left[H\psi\right]^{(1)} - 2\pi R \sigma \gamma_0 \left[JH\right]^{(1)} H\psi = i^l \left[JH\right]^{(1)}.$$
 (3.131)

Monta-se um sistema de equações utilizando (3.131) e a equação (3.130),

onde suas funções foram avaliadas em r = R,

$$\begin{pmatrix} 2\pi R\sigma\gamma_1 J & 1 - 2\pi R\sigma\gamma_0 JH \\ 1 + 2\pi R\sigma\gamma_1 [JH]^{(1)} & -2\pi R\sigma\gamma_0 H [JH]^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\psi H]^{(1)} \\ \psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i^l J \\ i^l [JH]^{(1)} \end{pmatrix}.$$
(3.132)

As soluções desse sistema são

$$\psi = -\frac{i^l J}{1 - 2\pi R \sigma \gamma_0 J H + 2\pi R \sigma \gamma_1 \left[J H\right]^{(1)}},$$
(3.133)

е

$$[\psi H]^{(1)} = -\frac{i^{l} [JH]^{(1)}}{1 - 2\pi R \sigma \gamma_{0} JH + 2\pi R \sigma \gamma_{1} [JH]^{(1)}}.$$
 (3.134)

É importante notar que o determinante da primeira matriz presente na equação (3.132) é exatamente o determinante das soluções acima. Substituindo essas soluções na equação (3.130),

$$\psi_l(r) = i^l J_l(kr) + i^l J_l(kr) \frac{2\pi R\sigma \Big[\gamma_0 JH - \gamma_1 \left[JH\right]^{(1)}\Big]}{1 - 2\pi R\sigma \gamma_0 JH + 2\pi R\sigma \gamma_1 \left[JH\right]^{(1)}}.$$
 (3.135)

Para encontrar a solução externa deve-se proceder de maneira análoga. Ou seja, multiplica-se a equação (3.126) pela função de Bessel, depois deriva-se em r e avalia em r = R. Constrói-se e resolve-se um sistema de equações lineares, de modo que a solução é escrita como,

$$\psi_l(r) = i^l J_l(kr) + i^l H_l^{(1)}(kr) \frac{2\pi R\sigma \left[\gamma_0 J^2 - \gamma_1 \left[J^2\right]^{(1)}\right]}{1 - 2\pi R\sigma \gamma_0 JH + 2\pi R\sigma \gamma_1 \left[JH\right]^{(1)}}.$$
 (3.136)

Para ilustrar esse resultado, foi feito um gráfico de cores da função de onda com o número de onda k = 2 e os parâmetros do potencial $\gamma_0 = 2$ e $\gamma_1 = 0.5$, na figura 3.10. Nesse exemplo a função de onda foi normalizada pelo seu valor



Figura 3.10: Gráficos de cores da densidade de probabilidade da função de onda com número de onda k = 2, e os parâmetros do potencial são $\gamma_0 = 2$ e $\gamma_1 = 0.5$. Pode-se observar uma descontinuidade na função de onda ao passar do lado externo da circunferência para o lado interno. A função de onda foi normalizada pelo seu valor máximo

máximo. Nota-se que existe uma descontinuidade dessa função de onda entre o lado externo e o interno da circunferência, que ocorre devido à presença do termo que contém a derivada da delta de Dirac no potencial.

Ressonância

Com o objetivo de encontrar as condições de ressonância, foi utilizado o seguinte procedimento: determinar os valores de γ_0 e γ_1 que anulam o denominador da equação (3.135). O denominador da solução será representado

por D que é

$$D = 1 - 2\pi R \sigma \gamma_0 J_m(kR) H_m^{(1)}(kR) + 2\pi R \sigma \gamma_1 \partial_r \left(J_m(kr) H_m^{(1)}(kr) \right)_{r=R}.$$
 (3.137)

Então foi efetuada a derivada em r e depois reescrita a função de Hankel como dependendo das funções de Bessel e Neumann $H_m^{(1)}(kR) = J_m(kR) + iN_m(kr)$. Portanto o denominador pode ser escrito,

$$D = 1 - 2\pi R\sigma \bigg[\gamma_0 J_l^2(kR) - 2\gamma_1 J_l'(kR) J_l(kR) + (3.138) + i \bigg(\gamma_0 J_l(kR) N_l(kR) - \gamma_1 J_l(kR) N_l'(kR) - \gamma_1 J_l'(kR) N_l(kR) \bigg) \bigg].$$

A constante σ é imaginária, então separando os termos imaginários e igualandoos a zero,

$$\gamma_0 J_l^2(kR) - 2\gamma_1 J_l'(kR) J_l(kR) = 0, \qquad (3.139)$$

e fazendo o mesmo com a parte real,

$$2\pi R\sigma i \Big(\gamma_0 J_l(kR) N_l(kR) - \gamma_1 J_l(kR) N_l'(kR) - \gamma_1 J_l'(kR) N_l(kR) \Big) = 1. \quad (3.140)$$

Então é possível estabelecer uma relação entre os parâmetros γ_0 e $\gamma_1,$

$$\frac{\gamma_0}{\gamma_1} = \frac{2J_l'(kR)}{J_l(kR)},$$
 (3.141)

e pode-se substituir na equação (3.140),

$$2\pi R\sigma i\gamma_1 \Big(-J_l(kR)N_l'(kR) + J_l'(kR)N_l(kR) \Big) = 1.$$
 (3.142)

Os termos entre parênteses são exatamente o Wronskiano envolvendo a função de Bessel e Neumann,

$$2\pi R\sigma i\gamma_1\left(\frac{-2}{\pi R}\right) = 1, \qquad (3.143)$$

finalmente encontra-se,

$$\gamma_1 = \frac{-1}{4i\sigma} = \frac{-\hbar^2}{2m},\tag{3.144}$$

e,

$$\gamma_0 = \frac{-\hbar^2}{m} \frac{J_l'(kR)}{J_l(kR)}.$$
(3.145)

Os valores de γ_1 e γ_0 fornecem a condição de ressonância quando o produto kR é um zero da função de Bessel $z_{l,n}$ ou um zero da derivada da função de Bessel $b_{l,n}$. Para exemplificar essas condições, foi feito um gráfico de cores da densidade de probabilidade $|\psi(\mathbf{r})|^2$. Foi escolhido o valor do raio R = 1 e o número de onda k próximo a um zero da função de Bessel. Ao fazer essa escolha o valor de γ_0 possui um valor muito alto, em outras palavras, se $k \to z_{n,l}$ então $\gamma_0 \to \infty$. Na figura 3.11 foi escolhido $k = 11.6198 \approx z_{2,3}$, nesse caso os valores dos parâmetros do potencial são $\gamma_0 \to \infty$ e $\gamma_1 = -1/2$. A função de onda na parte externa à barreira possui um valor desprezível quando comparado com a parte interna, portanto ao normalizar a função de onda pelo maior valor, isso faz com que a parte externa seja quase zero.

3.6.2 Série de deltas de Dirac

Nessa subseção é apresentada a solução da equação de LS para um potencial que pode ser escrito como uma distribuição singular arbitrária com suporte em um ponto sobre uma circunferência de raio R,

$$V(\mathbf{r}') = R \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\delta(\theta' - \theta(s))}{r'} \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n \delta^{(n)}(r' - r(s)) \, ds.$$
(3.146)



Figura 3.11: Gráfico de cores da densidade de probabilidade cuja função de onda possui número de onda $k = 11.6198 \approx z_{2,3}$.

Substituindo esse potencial na equação de LS e efetuando o mesmo procedimento da subseção 3.6.1,

$$\psi_l(r) = i^l J_l(kr) + 2\pi R\sigma J_l(kr) \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n (-1)^n \left[H\psi\right]^{(n)}, \qquad (3.147)$$

dentro da circunferência, enquanto que para o lado de fora,

$$\psi_l(r) = i^l J_l(kr) + 2\pi R\sigma H_l^{(1)}(kr) \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n (-1)^n \left[J\psi \right]^{(n)}.$$
 (3.148)

Para resolver a equação (3.147), foi multiplicado cada termo por $H_l^{(1)}(kr)\gamma_m(-1)^m$,

depois efetuada a derivada m vezes e por fim somada sobre todos os m,

$$\sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m (-1)^m [H\psi]^{(m)} = i^l \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m (-1)^m [JH]^{(m)} +2\pi R\sigma \left(\sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m (-1)^m [JH]^{(m)}\right) \quad (3.149)$$
$$\times \left(\sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n (-1)^n [H\psi]^{(n)}\right),$$

resolvendo para a somatório que contém $[H\psi]^{(n)}$ e substituindo na equação (3.147) tem-se,

$$\psi_l(r) = i^l J_l(kr) + J_l(kr) \frac{2\pi R\sigma \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n (-1)^n \left[JH\right]^{(n)}}{1 - 2\pi R\sigma \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n (-1)^n \left[JH\right]^{(n)}}.$$
 (3.150)

A solução para a região externa a circunferência segue um calculo similar,

$$\psi_l(r) = i^l J_l(kr) + H_l^{(1)}(kr) \frac{2\pi R\sigma \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n(-1)^n \left[J^2\right]^{(n)}}{1 - 2\pi R\sigma \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n(-1)^n \left[JH\right]^{(n)}}, \qquad (3.151)$$

para obter a solução acima, foi multiplicada a equação (3.148) pela função de Bessel.

Neste capítulo foram calculadas as soluções exatas para potenciais modelados como paredes de contorno circulares. Foi ilustrada a técnica para uma barreira e foi generalizado para *N*-barreiras. Por fim, foi estudado o caso de uma distribuição arbitrária singular com suporte num ponto. No próximo capítulo vamos aplicar esta metodologia a potenciais singulares construídos ao longo de uma elipse.

Capítulo 4

Espalhamento por barreiras elípticas

A geometria elíptica possui interessantes aplicações, atualmente diversos estudos são desenvolvidos, dentre eles os bilhares elípticos [38, 39, 40, 41] e pontos quânticos e fios quânticos elípticos [42]. No presente capítulo, será apresentado. o espalhamento por barreiras elípticas que é baseado no artigo [43]. A técnica para resolver a equação de LS para elipses é exatamente a mesma efetuada no caso circular contida no capítulo 3. A estrutura desse capítulo é a seguinte: na seção 4.1 são introduzidas noções básicas sobre as coordenadas elípticas e sobre as autofunções da equação de Helmholtz, enquanto que na seção 4.2 é onde se encontra a solução. Também é importante esclarecer que, nesse capítulo, serão utilizadas unidades atômicas, $\hbar = 2m^* = 1$, onde \hbar é constante de Planck reduzida e m^* é a massa da partícula.

4.1 Noções básicas

Nessa seção são encontradas algumas noções básicas sobre as coordenadas elípticas. Esse sistema de coordenadas foi escolhido justamente para lidar com a barreira elíptica. Essa escolha facilita alguns cálculos de modo que permite facilmente a obtenção das autofunções do operador integral.

4.1.1 Coordenadas elípticas

As coordenadas elípticas são representadas por duas variáveis $\mu \in \theta$. A primeira será denominada, nessa tese, variável radial e a outra angular. Suas relações com as variáveis cartesianas são:

$$x = \frac{a}{2}\cosh\mu\cos\theta,\tag{4.1}$$

$$y = \frac{a}{2}\sinh\mu\sin\theta,\tag{4.2}$$

onde o parâmetro a/2 determina a posição dos focos que ocorrem em $x = \pm a/2$. A coordenada μ varia de $[0, \infty]$, enquanto que a coordenada angular varia entre $[0, 2\pi]$. Para desenhar uma elipse deve-se manter μ fixo e variar θ entre todos os valores possíveis. Isso pode ser observado através da seguinte equação,

$$\frac{y^2}{(a^2/4)\sinh^2\mu} + \frac{x^2}{(a^2/4)\cosh^2\mu} = \sin^2\theta + \cos^2\theta = 1,$$
 (4.3)

enquanto que se for mantido θ fixo e variar μ é possível descrever hipérboles,

$$-\frac{y^2}{(a^2/4)\sin^2\theta} + \frac{x^2}{(a^2/4)\cos^2\theta} = -\sinh^2\mu + \cosh^2\mu = 1.$$
(4.4)

4.1.2 Autofunções da equação de Hemholtz

Utilizando o sistema de coordenadas elípticas pode-se escrever a equação de Helmholtz,

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + k^2 \phi(\mathbf{r}) = 0, \qquad (4.5)$$

e usar o método de separação de variáveis assumindo a função $\phi(\mathbf{r}) = R(\mu)\Theta(\theta)$ onde R é função radial e Θ é a angular. O operador Laplaciano em coordenadas elípticas é,

$$\nabla^2 = \frac{4}{a} \frac{1}{\sqrt{\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta}} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta} \right).$$
(4.6)

Por fim pode-se separar em duas equações diferenciais,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \frac{h^2}{2}\cos 2\theta\right]\Theta(\theta) = -\lambda\Theta(\theta), \qquad (4.7)$$

е

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\mu^2} + \frac{h^2}{2}\cosh 2\mu\right]R(\mu) = \lambda R(\mu), \qquad (4.8)$$

que são denominadas de equações de Mathieu (4.7) e equação de Mathieu modificada (4.8), suas soluções são dadas pelas funções de Mathieu, as quais serão utilizadas por todo esse capítulo. O parâmetro h = ak/2 e λ é o autovalor da equação. As soluções angulares são,

$$\operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right), \qquad \operatorname{se}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right),$$
(4.9)

onde ce_m é uma função par, enquanto que se_m é uma função impar. Os índices $m \in n$ são inteiros não-negativos, para a função se_m o índice não pode

ser zero. As soluções radiais são,

$$\operatorname{Mc}_{m}^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right), \qquad \operatorname{Mc}_{m}^{(2)}\left(\frac{h}{2},\mu\right),$$

$$(4.10)$$

e com essas soluções pode-se escrever outras duas que são combinações lineares:

$$\operatorname{Mc}_{m}^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu\right) = \operatorname{Mc}_{m}^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right) + i\operatorname{Mc}_{m}^{(2)}\left(\frac{h}{2},\mu\right), \qquad (4.11)$$

e,

$$\operatorname{Mc}_{m}^{(4)}\left(\frac{h}{2},\mu\right) = \operatorname{Mc}_{m}^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right) - i\operatorname{Mc}_{m}^{(2)}\left(\frac{h}{2},\mu\right).$$
(4.12)

A nomenclatura usada para essas funções é função par de Mathieu radial de primeira (segunda, terceira ou quarta) espécie, existem também as ímpares que são as $Mc_m^{(i)}(\frac{h}{2},\mu)$, onde i = 1, 2, 3, 4. Ao procurar na literatura [44, 45, 46, 47, 48, 49], pode-se observar que diversas notações são usadas para representar essas funções. Isso se deve ao fato de que foram utilizadas diferentes normalizações e valores iniciais (avaliadas em zero) das funções. Na subseção 4.1.3 será mostrada a correspondência entre a notação usada nessa tese, que é mais atual, com a notação utilizada por Morse e Feshbach [44]. Entretanto, vale a pena salientar algumas propriedades dessas funções. Para um valor específico de λ , as funções angulares são periódicas. Outra propriedade é a ortogonalidade,

$$\langle \operatorname{ce}_m(q,\theta), \operatorname{ce}_n(q,\theta) \rangle = \pi \delta_{m,n}, \quad \langle \operatorname{se}_m(q,\theta), \operatorname{se}_n(q,\theta) \rangle = \pi \delta_{m,n}, \quad (4.13)$$

onde o produto interno \langle,\rangle é a integração na variável θ entre o intervalo $[0, 2\pi[$, as funções formam um conjunto completo [51, 45].

4.1.3 Correspondências

A nomenclatura e a notação das funções de Mathieu não eram padrão, e por isso existem diversas maneiras de escrever essas funções [44, 45, 46, 47, 48, 49]. Em vários livros estão presentes algumas tabelas de conversão entre as diferentes notações utilizadas. Para facilitar a leitura e a comparação com as referências, é apresentado na tabela 4.1 a correspondência entre a notação utilizada nessa tese e àquela presente em [44]. Não só as notações

Morse-Feshbach [44]	Esta tese (notação moderna)
h	h
$\operatorname{Se}_m(h,\cos heta)$	$A \operatorname{ce}_m(\frac{h^2}{4}, \theta)$
$\operatorname{So}_m(h,\cos\theta)$	$B \operatorname{se}_m(\frac{h^2}{4}, \theta)$
$\operatorname{Je}_m(h,\cosh\mu)$	$\sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right)$
$\operatorname{Jo}_m(h, \cosh \mu)$	$\sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{Ms}_m^{(1)}(\frac{h}{2},\mu)$
$\operatorname{Ne}_m(h,\cosh\mu)$	$\sqrt{rac{\pi}{2}}~\mathrm{Mc}_m^{(2)}(rac{h}{2},\mu)$
$\operatorname{No}_m(h, \cosh \mu)$	$\sqrt{rac{\pi}{2}}~\mathrm{Ms}_m^{(2)}(rac{h}{2},\mu)$
$\operatorname{He}_m(h,\cosh\mu)$	$\sqrt{rac{\pi}{2}} \operatorname{Mc}_m^{(3)}(rac{h}{2},\mu)$
$\operatorname{Ho}_m(h,\cosh\mu)$	$\sqrt{\frac{\pi}{2}} { m Ms}_m^{(3)}(rac{h}{2},\mu)$

Tabela 4.1: Relação entre as definições antiga e atual das funções de Mathieu. As duas primeiras são as funções angulares de Mathieu, e as outras seis são as funções radiais de Mathieu.

são diferentes, mas também as definições são diferentes. Morse e Feshbach usam a definição $\operatorname{Se}_m(h, \cos 0) = 1$ e constante de normalização denotada por $M_m^e(h)$,

$$M_m^e(h) = \int_0^{2\pi} \left[\operatorname{Se}_m(h, \cos \theta) \right]^2 d\theta, \qquad (4.14)$$

e para as funções ímpares a condição é,

$$\left. \frac{d\mathrm{So}_m\left(h,\cos\theta\right)}{d\theta} \right|_{\theta=0} = 1,\tag{4.15}$$

e as constantes de normalizam são,

$$M_m^o(h) = \int_0^{2\pi} \left[\operatorname{So}_m(h, \cos \theta) \right]^2 d\theta.$$
(4.16)

Entretanto nessa tese é usada a normalização de Goldstein-Ince, que define todas as constantes de normalização iguais à π , ou seja,

$$\int_{0}^{2\pi} \left[\operatorname{ce}_{m} \left(\frac{h^{2}}{4}, \theta \right) \right]^{2} d\theta = \int_{0}^{2\pi} \left[\operatorname{se}_{m} \left(\frac{h^{2}}{4}, \theta \right) \right]^{2} d\theta = \pi.$$
(4.17)

Na tabela 4.1 as constantes $A \in B$ são responsáveis por efetuar a correspondência entre as duas funções, e seus valores são dados por,

$$A = \sqrt{\frac{\pi}{M_m^e}}, \qquad B = \sqrt{\frac{\pi}{M_m^o}}.$$
(4.18)

É interessante notar que essas funções formam um conjunto completo, ou seja, pode-se utilizar essas funções como base para expandir funções arbitrárias. Alguns exemplos dessas expansões são mostradas na subseção 4.1.4, em conjunto com algumas relações integrais necessárias para o cálculo das funções de onda.

4.1.4 Expansões

Importantes relações são utilizadas diversas vezes nesse trabalho, como por exemplo a expansão da onda plana em série de Mathieu. Seja o vetor posição $\mathbf{r} = \frac{a}{2}(\cosh \mu \cos \theta, \sinh \mu \sin \theta)$, e o vetor número de onda $\mathbf{k} = (k \cos \alpha, k \sin \alpha)$ onde α é o ângulo de incidência. Considere a onda plana

expandida em série de Fourier-Mathieu,

$$\Phi(\mu,\theta) = \exp(ihw) = \sum_{m=0}^{\infty} \phi_m(\mu) \operatorname{ce}_n\left(\frac{h^2}{4},\theta\right) + \sum_{m=1}^{\infty} \phi'_m(\mu) \operatorname{se}_n\left(\frac{h^2}{4},\theta\right),$$
(4.19)

onde $w = \cosh \mu \cos \theta \cos \alpha + \sinh \mu \sin \theta \sin \alpha$ e ambos ϕ_m e ϕ'_m dependem de μ .

Usando as fórmulas 28.28.2 e 28.28.3 do livro de Olver e colaboradores [47], e lembrando que nessa tese o parâmetro h/2 equivale ao h do Olver, a integral da onda plana com as funções pares de Mathieu fornece,

$$\phi_n(\mu) = \int_0^{2\pi} e^{ihw} \operatorname{ce}_n\left(\frac{h^2}{4}, \theta\right) \ d\theta = 2\pi i^n \operatorname{ce}_n\left(\frac{h^2}{4}, \alpha\right) \operatorname{Mc}_n^{(1)}\left(\frac{h}{2}, \mu\right), \quad (4.20)$$

e com as funções ímpares,

$$\phi_n'(\mu) = \int_0^{2\pi} e^{ihw} \operatorname{se}_n\left(\frac{h^2}{4}, \theta\right) \ d\theta = 2\pi i^n \operatorname{se}_n\left(\frac{h^2}{4}, \alpha\right) \operatorname{Ms}_n^{(1)}\left(\frac{h}{2}, \mu\right), \quad (4.21)$$

substituindo (4.20) e (4.21) em (4.19),

$$\Phi(\mu,\theta) = 2\pi \sum_{m=0}^{\infty} i^m \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},\alpha\right) \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right) \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right) + 2\pi \sum_{m=1}^{\infty} i^m \operatorname{se}_m\left(\frac{h^2}{4},\alpha\right) \operatorname{se}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right) \operatorname{Ms}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right), (4.22)$$

quando a onda plana incidente possui um vetor de onda paralelo ao semi-eixo maior da elipse, ou seja, quando $\alpha = 0$, a expressão é reduzida para,

$$\exp(ih\cosh\mu\cos\theta) = 2\pi \sum_{m=0}^{\infty} i^m \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},0\right) \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right) \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right),$$
(4.23)

pois $\operatorname{se}_m(q,0) = 0.$

Função de Green

No livro de Morse e Feshbach [44] está contida a função de Green relacionada à equação de Helmholtz expandida em série de Mathieu, após efetuadas as devidas conversões entre as notações pode-se escrever a função de Green,

$$H_0^{(1)}(kR) = 2 \left[\sum_{m=0}^{\infty} \operatorname{ce}_m \left(\frac{h^2}{4}, s \right) \operatorname{ce}_m \left(\frac{h^2}{4}, \theta \right) \right]$$

$$\times \operatorname{Mc}_m^{(1)} \left(\frac{h}{2}, \mu_{<} \right) \operatorname{Mc}_m^{(3)} \left(\frac{h}{2}, \mu_{>} \right)$$

$$+ \sum_{m=1}^{\infty} \operatorname{se}_m \left(\frac{h^2}{4}, s \right) \operatorname{se}_m \left(\frac{h^2}{4}, \theta \right)$$

$$\times \operatorname{Ms}_m^{(1)} \left(\frac{h}{2}, \mu_{<} \right) \operatorname{Ms}_m^{(3)} \left(\frac{h}{2}, \mu_{>} \right)$$

$$(4.24)$$

onde $\mu_{<} = \min(\mu_0, \mu) \in \mu_{>} = \max(\mu_0, \mu).$

4.2 Parede de contorno elíptica

Nessa seção será calculada a função de onda que resulta do espalhamento por uma elipse. O potencial a ser utilizado é,

$$V(\vec{r}) = 4 \int_C \gamma(t)\delta\left(\vec{r} - \vec{r}(t)\right) dt, \qquad (4.25)$$

onde o fator 4 foi introduzido por conveniência, a curva C que representa a elipse é parametrizada por t. Usando a parametrização de uma elipse pode-se reescrever a integral de linha como uma integral de Riemann,

$$\Psi(\mu,\theta) = \Phi(\mu,\theta) - \frac{ia}{2} \int_0^{2\pi} \gamma(s) H_0^{(1)}(kR) \Psi(\mu_0,s) \sqrt{\cosh^2 \mu_0 - \cos^2 s} \, ds$$
(4.26)

onde a raiz quadrada vem do elemento de linha (módulo da derivada do vetor de parametrização), i.e., $dt = \sqrt{\mathbf{r'} \cdot \mathbf{r'}} \, ds$. Usando a função de Green expandida (4.24) em conjunto com a equação acima temos,

$$\Psi(\mu,\theta) = \Phi(\mu,\theta) - ia \int_0^{2\pi} \gamma(s) \\ \times \left\{ \left[\sum_{m=0}^\infty \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right) R_m^e(h,\mu_<,\mu_>) \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},s\right) \right. (4.27) \\ \left. + \sum_{m=1}^\infty \operatorname{se}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right) R_m^o(h,\mu_<,\mu_>) \operatorname{se}_m\left(\frac{h^2}{4},s\right) \right] \right\} \\ \times \Psi(\mu_0,s) \sqrt{\cosh^2 \mu_0 - \cos^2 s} \, ds,$$

essa equação é uma equação integral para a função de onda. Define-se o produto das funções pares radiais de Mathieu de primeira e terceira espécie como,

$$R_m^e(h,\mu_0,\mu) = \mathrm{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_{<}\right)\mathrm{Mc}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu_{>}\right),\qquad(4.28)$$

e o produto das ímpares como,

$$R_m^o(h,\mu_0,\mu) = \operatorname{Ms}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_{<}\right) \operatorname{Ms}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu_{>}\right).$$
(4.29)

Para prosseguir os cálculos, é necessário explicitar o termo $\gamma(s)$ dentro do potencial. Na subseção 4.2.1 é apresentada a forma do potencial.

4.2.1 O potencial variável

O caso mais simples para resolver a equação (4.27), não é assumir $\gamma(s)$ como constante, pois isso deixaria a raiz quadrada dentro da integral, o que dificulta a diagonalização do operador integral. Para resolver essa dificuldade introduzida pela raiz quadrada, é escolhido um potencial na forma,

$$\gamma(s) = \frac{\gamma_0}{\sqrt{\cosh^2 \mu_0 - \cos^2 s}},\tag{4.30}$$

onde γ_0 é uma constante. Essa raiz no denominador da equação (4.30) elimina a raiz presente na integral da equação (4.27), facilitando assim a obtenção das autofunções desse operador integral que irá envolver apenas as funções angulares. Apesar desse potencial parecer estranho, pode-se justificar sua expressão ao comparar com a curvatura da elipse. Essa forma do potencial compensa as regiões com diferentes curvaturas, de modo que o potencial possui valor menor quando a região possui maior curvatura, e *vice-versa*. Por exemplo, os pontos de maior curvatura da elipse são aqueles que se encontram sobre o semi-eixo maior da elipse ($\mu_0, 0$) e (μ_o, π), e são exatamente nesses pontos, onde o $\gamma(s)$ possui seu menor valor. Assim, pode-se prosseguir para a solução do problema.

4.3 Solução da equação de Lippmann-Schwinger

Para facilitar ainda mais a leitura será utilizada a notação de produto interno, ou seja, para duas funções $f \in g$, seu produto interno é definido,

$$\langle f,g\rangle = \int_0^{2\pi} f(x)g(x) \, dx. \tag{4.31}$$

Observe que a equação (4.27) pode ser novamente reescrita,

$$\Psi(\mu,\theta) = \Phi(\mu,\theta) - i\gamma_0 a \left[\sum_{m=0}^{\infty} \operatorname{ce}_m \left(\frac{h^2}{4}, \theta \right) R_m^e(h,\mu_<,\mu_>) c_m(\mu_0) \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^{\infty} \operatorname{se}_m \left(\frac{h^2}{4}, \theta \right) R_m^o(h,\mu_<,\mu_>) d_m(\mu_0) \right],$$
(4.32)

onde foram definidos os coeficientes $c_m(\mu_0)$
e $d_m(\mu_0),$ de modo que,

$$c_m(\mu_0) = \left\langle ce_m(h^2/4, s), \Psi(\mu_0, s) \right\rangle,$$
 (4.33)

$$d_m(\mu_0) = \left\langle \operatorname{se}_m(h^2/4, s), \Psi(\mu_0, s) \right\rangle, \qquad (4.34)$$

como os coeficientes a serem determinados. Vale salientar que, ao determinar esses coeficientes imediatamente $\Psi(\mu, \theta)$ será conhecido. Tomando o produto interno da equação acima com a função par de Mathieu ce_n($h^2/4, \theta$), onde n é um inteiro, e usando a relação de ortogonalidade da equação (4.13), é obtido,

$$c_n(\mu) = \phi_n^e(\mu) - i\pi\gamma_0 a c_n(\mu_0) R_n^e(h, \mu_{<}, \mu_{>}), \qquad (4.35)$$

onde $\phi_n(\mu) = \langle ce_m(h^2/4, s), \Phi(\mu, s) \rangle$ são os coeficiente pares da série de Fourier-Mathieu da onda plana que são mostradas em [47] e listadas na equação (4.20). Avaliando esses coeficientes em $\mu = \mu_0$ e resolvendo para c_n tem-se,

$$c_n(\mu_0) = \frac{\phi_n(\mu_0)}{1 + i\pi\gamma_0 a R_n^e(h, \mu_0, \mu_0)}.$$
(4.36)

Pode-se calcular o coeficiente d_m tomando o produto interno de (4.32) com as funções ímpares de Mathieu se_n $(h^2/4, \theta)$, onde n é um inteiro,

$$d_m(\mu_0) = \frac{\phi'_n(\mu_0)}{1 + i\pi\gamma_0 a R_n^o(h, \mu_0, \mu_0)},$$
(4.37)

agora $\phi'_n(\mu_0) = \langle \operatorname{se}_n(h^2/4, s), \Phi(\mu_0, s) \rangle$ são os coeficientes ímpares da série de Fourier-Mathieu da onda plana (equação 4.21).

Finalmente, substituindo (4.36) e (4.37) na equação (4.32) escreve-se a

função de onda exata que satisfaz a equação de LS,

$$\Psi(\mu, \theta) = \Phi(\mu, \theta) - i\gamma_0 a \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{\phi_m(\mu_0) ce_m\left(\frac{h^2}{4}, \theta\right)}{1 + i\pi\gamma_0 a R_m^e(h, \mu_0, \mu_0)} \right] \\ \times Mc_m^{(1)}\left(\frac{h}{2}, \mu_{<}\right) Mc_m^{(3)}\left(\frac{h}{2}, \mu_{>}\right) \\ + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\phi_m'(\mu_0) se_m\left(\frac{h^2}{4}, \theta\right)}{1 + i\pi\gamma_0 a R_m^o(h, \mu_0, \mu_0)} \\ \times Ms_m^{(1)}\left(\frac{h}{2}, \mu_{<}\right) Ms_m^{(3)}\left(\frac{h}{2}, \mu_{>}\right) \right].$$
(4.38)

Dentro da região elíptica $\mu < \mu_0$, ou $\mu_< = \mu$ e $\mu_> = \mu_0$, é possível notar que as funções de primeira espécie, $\operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right)$ e $\operatorname{Ms}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right)$ podem produzir ondas estacionárias enquanto que as de terceira espécie contribuem apenas como constantes multiplicativas, $\operatorname{Mc}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)$ e $\operatorname{Ms}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)$ pois μ_0 é constante. Por outro lado, ,a região exterior $\mu > \mu_0$, ou $\mu_< = \mu_0$ e $\mu_> = \mu$, então ambas as funções de primeira espécie são apenas constantes — $\operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)$ e $\operatorname{Ms}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)$ — e as de terceira espécie, $\operatorname{Mc}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu\right)$ E $\operatorname{Ms}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu\right)$, propagam as ondas espalhadas.

Os resultados podem ser escritos de forma mais amigável utilizando as equações (4.20), (4.21) e (4.22), então pode ser escrito,

$$\Psi(\mu,\theta) = 2\pi \sum_{m=0}^{\infty} i^m \operatorname{ce}_m \left(\frac{h^2}{4},\alpha\right) \operatorname{ce}_m \left(\frac{h^2}{4},\theta\right) \\ \times \left[\operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right) - F_m^e(\mu,\theta)\right] \\ + 2\pi \sum_{m=1}^{\infty} i^m \operatorname{se}_m \left(\frac{h^2}{4},\alpha\right) \operatorname{se}_m \left(\frac{h^2}{4},\theta\right) \\ \times \left[\operatorname{Ms}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right) - F_m^o(\mu,\theta)\right],$$
(4.39)

onde

$$F_m^e(\mu,\theta) = \frac{i\pi\gamma_0 a \ R_m^e(h,\mu_<,\mu_>)}{1 + i\pi\gamma_0 a \ \mathrm{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right) \mathrm{Mc}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)},$$

e a parte ímpar $F_m^o(\mu, \theta)$ r obtida através da substituição de todas as pares pelas ímpares, i.e, $R_m^e(\cdot)$ por $R_m^o(\cdot)$, para as funções angulares $ce_m(\cdot)$ por $se_m(\cdot)$ e para as radiais $Mc_m^{(1,3)}(\cdot)$ por $Ms_m^{(1,3)}(\cdot)$.

No caso especial da onda plana incidindo na direção positiva do eixo x, ou seja, $\alpha = 0$ a solução interior se torna,

$$\Psi_{int}(\mu,\theta) = 2\pi \sum_{m=0}^{\infty} i^m \psi_m \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},0\right) \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right) \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right), \quad (4.40)$$

onde os coeficientes são,

$$\psi_m = 1 - \frac{i\pi\gamma_0 a \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right) \operatorname{Mc}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)}{1 + i\pi\gamma_0 a \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right) \operatorname{Mc}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)}.$$
(4.41)

4.3.1 Ressonância

Na equação (4.40), pode-se observar que quando μ_0 é um zero da função radial de Mathieu de ordem m,

$$\operatorname{Mc}_{m}^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_{0}\right) = 0,$$
(4.42)

o coeficiente $\psi_m = 1$ enquanto que os outros termos $n \neq m$ contribuirão menos para a função de onda. Para investigar o caso da barreira impenetrável é necessário tomar o limite $\gamma_0 \to \infty$. Ao efetuar o limite, pode-se observar que todos os termos ψ_n com $n \neq m$ serão nulos. A equação transcendental (4.42) pode ser simplificada se forem usados os resultados presentes em [49],

$$\operatorname{Mc}_{2m}^{(1)}\left(\frac{h}{2}, z\right) = K_m \operatorname{Ce}_{2m}\left(\frac{h^2}{4}, z\right), \qquad \operatorname{Mc}_{2m+1}^{(1)}\left(\frac{h}{2}, z\right) = L_m \operatorname{Ce}_{2m+1}\left(\frac{h^2}{4}, z\right)$$
(4.43)

onde os fatores não-nulos K_m e L_m podem ser obtidos em [48]. As funções de Mathieu modificadas $\operatorname{Ce}_m(q, z)$ são relacionadas através das angulares via $\operatorname{Ce}_m(q, z) = \operatorname{ce}_m(q, iz)$. Portanto, são procurados os zeros da função de Mathieu $\operatorname{ce}_m(h^2/4, i\mu_0)$ para um dado μ_0 e um inteiro não-negativo m. Lembrando que h = (ka)/2 e é resolvido numericamente essa equação para obter k, que é o número de onda que produz a ressonância dentro da barreira elíptica. Na figura 4.1 são apresentados os primeiros quatro modos de ressonância. Portanto, se for considerado o parâmetro h de modo que a equação (4.42) seja satisfeita e o limite $\gamma_0 \to \infty$ for tomado, então apenas um coeficiente é não nulo ψ_m . E nesse caso a ressonância dentro da barreira é representada por uma única autofunção $\operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4}, \theta\right) \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2}, \mu\right)$ sem interferência com outros termos. Pode-se notar a densidade de probabilidade dentro da elipse, enquanto que na região externa é desprezível (na figura 4.1 apenas cor roxa).

Considerando um caso extremamente oposto, um γ_0 finito e a onda incidente possuindo um numero de onda que não satisfaz (4.42), então é esperado que a função de onda é espalhada tanto para o interior quanto para o exterior. Um exemplo para ilustrar esse fato está na figura 4.2.

m	h	k_{0x}	
0	3.56526	7.13053	
1	4.64055	9.28111	
2	5.79645	11.59291	
3	7.00609	14.01218	

Tabela 4.2: Tabela com as soluções numéricas da equação transcendental $ce_m(h^2/4, i\mu_0) = 0$ considerando o parâmetro h como uma variável desconhecida para m = 0, 1, 2 e 3 respectivamente. O número de onda é $\mathbf{k} = (k_{0x}, 0)$, e o parâmetro $\mu_0 = 1/2$. A ressonância ocorre quando a onda plana incidente possui um desses valores de número de onda.

A solução na região exterior, por outro lado, é,

$$\Psi_{ext}(\mu,\theta) = 2\pi \sum_{m=0}^{\infty} i^m \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},0\right) \operatorname{ce}_m\left(\frac{h^2}{4},\theta\right) \\ \times \left[\operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu\right) - f_m^{ext}\operatorname{Mc}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu\right)\right], \quad (4.44)$$

onde a primeira contribuição, dentro dos colchetes, existe devido a onda plana incidente, e a segunda representa a onda espalhada modulada pelo fator,

$$f_m^{ext} = \frac{i\pi\gamma_0 a \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)}{1 + i\pi\gamma_0 a \operatorname{Mc}_m^{(1)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right) \operatorname{Mc}_m^{(3)}\left(\frac{h}{2},\mu_0\right)},\tag{4.45}$$

observa-se novamente que, quando a condição (4.42) é satisfeita para um certo m = n, esse modo em particular não será espalhado para a região exterior pois $f_n^{ext} = 0$. Entretanto, os outros modos serão espalhados.

Procedimento numérico

Para fazer os gráficos desse presente capítulo foi utilizado o *software* Mathematica. Ele lida muito bem com as funções angulares de Mathieu, ou seja, são funções pré-definidas que não necessitam de nenhum pacote adicional. Entretanto as funções radiais não estão presentes nas bibliotecas, portanto foram construídos programas que determinassem uma expressão aproximada. Elas foram calculadas utilizando uma série de funções de Bessel definidas na seção 28.23 no livro do Olver [47], de modo que a série infinita foi truncada quando o coeficiente possuía um valor menor que 10^{-6} .



Figura 4.1: Gráfico de cores da densidade de probabilidade $|\Psi(\mu, \theta)|^2$ nas regiões interna e externa da barreira elíptica, que é representada por uma linha vermelha. A função que representa a intensidade do potencial $\gamma(s)$ é dada pela equação (4.30), onde $\gamma_0 = 100$. Pode-se observar, no quadro superior esquerdo, o espalhamento da onda plana incidente, com número de onda $\mathbf{k} = (k_{0x}, 0)$, onde k_{0x} e h são relacionados com o zero da equação transcendental ce_m($h^2/4, i\mu_0$). Ambos são mostrados na primeira linha da tabela 4.3.1 para um dado μ_0 e um inteiro não negativo m. Nos gráficos, superior direito, inferior esquerdo e inferior direito são apresentadas as segunda, terceira e quarta ressonâncias, respectivamente, onde $h e k_{0x}$ também são apresentados na tabela 4.3.1. Foram utilizados os valores $\mu_0 = 1/2$ e $\hbar = 2m_0 = 1$.



Figura 4.2: Gráfico de cores da densidade de probabilidade $|\Psi(\mu, \theta)|^2$ nas regiões interna e externa da barreira elíptica que é desenhada como uma linha vermelha. A função de intensidade do potencial $\gamma(s)$ é dada pela equação (4.30), onde $\gamma_0 = 7$. No gráfico de cima, é mostrada a onda plana incidente com número de onda $k_{0x} = 6.4$ e o parâmetro h = 3.2 que não é um zero da equação transcendental (4.42). No gráfico de baixo, o parâmetro é h = 4.03e o número de onda $k_{0x} = 8.06$, portanto é observado que a onda plana incidente é espalhada em múltiplas direções e penetra a barreira. Foi usado o parâmetro $\mu_0 = 1/2$.

Capítulo 5

Potencial duplo

Nesse capítulo será apresentado o formalismo de potencial duplo. Utilizando o formalismo foi calculado analiticamente o espalhamento por um potencial linear e utilizando do método numérico de paredes de contorno foram adicionadas barreiras arbitrárias. E por fim são comparadas com o espalhamento devido a presença apenas da barreira. Todos os resultados apresentados nesse capítulo foram baseados no artigo [50].

5.1 Formalismo

Considere o hamiltoniano,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2, \tag{5.1}$$

onde \hat{H}_0 é a parte cinética, \hat{V}_1 e \hat{V}_2 são dois tipos de interação. A equação de LS possui a forma,

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \int_{R^2} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left[V_1(\mathbf{r}') + V_2(\mathbf{r}') \right] \psi(\mathbf{r}') \ d^2\mathbf{r}', \tag{5.2}$$

onde $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de Green dada pela equação (3.3). Essa equação é difícil de ser resolvida, portanto o formalismo de potencial duplo é empregado numa tentativa de facilitar os cálculos. Ele consiste em resolver o problema para um único potencial, por exemplo $V_1(\mathbf{r}')$,

$$\varphi^{+}(\mathbf{r}) = \phi^{+}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbb{R}^{2}} G_{0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_{1}(\mathbf{r}') \varphi^{+}(\mathbf{r}') \ d^{2}\mathbf{r}', \qquad (5.3)$$

ou

$$\varphi^{+}(\mathbf{r}) = \phi^{+}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbb{R}^{2}} G_{+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_{1}(\mathbf{r}') \phi^{+}(\mathbf{r}') \ d^{2}\mathbf{r}', \qquad (5.4)$$

onde $\phi^+(\mathbf{r})$ é a onda plana incidente, $\varphi^+(\mathbf{r})$ é a solução para o espalhamento por um único potencial e $G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de Green envolvendo o potencial $V_1(\mathbf{r}')$. Após obtida a solução $\varphi^+(\mathbf{r})$, ela é usada para obter a onda espalhada pelos dois potenciais. A função de onda espalhada $\psi(\mathbf{r})$ e é obtida através da equação [35, 63, 62],

$$\psi^{+}(\mathbf{r}) = \varphi^{+}(\mathbf{r}) + \int_{R^{2}} G_{+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V_{2}(\mathbf{r}') \psi^{+}(\mathbf{r}') \ d^{2}\mathbf{r}'.$$
(5.5)

Na seção 5.2 será mostrado a maneira como a função de Green foi obtida ao considerar o potencial $V_1(\mathbf{r})$ como linear, e na seção 5.3 foi calculada a onda espalhada pelo potencial linear $\varphi^+(\mathbf{r})$.

5.2 Função de Green

Nessa seção será obtida a função de Green para o caso onde o potencial $V_1(\mathbf{r})$ é linear, ou seja, um análogo ao potencial gravitacional $V_1(y) = mg_0 y$ e possui dependência apenas da coordenada y, onde g_0 é constante e m é a massa da partícula. Outra maneira de interpretar esse potencial é considerar uma partícula carregada interagindo com um campo elétrico uniforme \mathcal{E} , de

modo que é possível escrever o potencial como $V_1(y) = q\mathcal{E}y$ onde q é a carga. Note que pode-se definir esse potencial somente para y > 0, quando y < 0 o potencial é infinito. Foi feita essa escolha pois a autofunção do Hamiltoniano, (função de Airy), $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + V_1$ é quadrado integrável somente no domínio $[0, \infty)$. Portanto a equação de Schrödinger é,

$$\left(\nabla^2 - \frac{2m^2 g_0 y}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}\hat{V}_2\psi(\mathbf{r}).$$
(5.6)

Define-se o domínio $\Omega = \{x \in \mathbb{R} \text{ and } y > 0\}$, e a condição de contorno $\psi(x, y) = 0$ quando y = 0. É investigada a função de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ com a mesma condição de contorno da função de onda,

$$(\nabla^2 - by + k_0^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{2m}{\hbar^2}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \qquad (5.7)$$

onde $b = 2m^2 g_0/\hbar^2$ (ou $b = 2mq \mathcal{E}/\hbar^2$ se for escolhido o potencial $V_1(\mathbf{y}) = q\mathcal{E}y$) e $k_0 = \sqrt{2mE}/\hbar$. Então é suposto que a função de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ possa ser descrita na forma de uma série de funções de Airy, que é a autofunção da parte y da equação de Schrödinger após ser feita a separação de variáveis,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{n=1}^{\infty} g(x, x', y') Ai\left(b^{1/3}(y - k_n^2/b)\right), \qquad (5.8)$$

onde $k_n^2 = -a_n b^{2/3}$ e a_n é o n-ésimo zero da função de Airy [51]. Inserindo a equação (5.8) em 5.7 tem-se que,

$$\sum_{n=1}^{\infty} Ai \left(b^{1/3} (y - k_n^2/b) \right) \left[g \left(k0^2 - k_n^2 \right) + \frac{d^2g}{dx^2} \right] = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(x - x') \delta(y - y').$$
(5.9)

Introduzindo a variável adimensional $z_n = b^{1/3}(y - k_n^2/b) = yb^{1/3} + a_n$, multiplicando ambos os lados por $Ai(z_n)$, integrando em y no intervalo de $[0,\infty)$ e usando a relação de ortogonalidade da equação (B.3) é obtido,

$$g(k0^{2} - k_{n}^{2}) + \frac{d^{2}g}{dx^{2}} = \frac{2mb^{1/3}}{\hbar^{2}} \frac{Ai(z_{n}')}{Ai'^{2}(a_{n})} \delta(x - x'),$$
(5.10)

que é similar a bem conhecida função de Green livre unidimensional, que resulta em,

$$g = \mp \frac{i \ mb^{1/3}}{\hbar^2} \frac{e^{\pm i\sqrt{k_0^2 - k_n^2}|x - x'|}}{\sqrt{k_0^2 - k_n^2}} \frac{Ai(z'_n)}{Ai'^2(a_n)},$$
(5.11)

Inserindo esse resultado na equação (5.8) é alcançada a função de Green

$$G_{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \mp \frac{imb^{1/3}}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp\left(\pm i\sqrt{k_0^2 - k_n^2}|x - x'|\right)}{\sqrt{k_0^2 - k_n^2}} \frac{Ai(z_n')Ai(z_n)}{Ai'^2(a_n)}, \quad (5.12)$$

onde os sinais de $G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ correspondem a função de Green retardada e avançada, respectivamente.

5.3 Onda espalhada pelo potencial linear

Primeiramente, será estudado o espalhamento de uma onda plana ϕ por um potencial linear. O mesmo satisfaz a equação (5.4). Portanto, é substituída a equação (5.12) e $\phi(\mathbf{r})$ como uma onda plana,

$$\phi(\mathbf{r}) = \exp\left\{ik_0\left(x\cos\theta + y\sin\theta\right)\right\},\tag{5.13}$$

na equação (5.4), onde θ é o angulo entre o vetor de onda \mathbf{k}_0 e o eixo x. É escrita a equação integral para a função de onda como,

$$\varphi^{+}(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \left(\frac{-im^{2}g_{0}b^{1/3}}{\hbar^{2}}\right) \int_{0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} y' \frac{Ai(z_{n})Ai(z'_{n})}{Ai'^{2}(a_{n})} \quad (5.14)$$
$$\times \frac{\exp\left(i\sqrt{k_{0}^{2}-k_{n}^{2}} \mid x-x'\mid\right)}{\sqrt{k_{0}^{2}-k_{n}^{2}}} \phi(\mathbf{r}')dx'dy'.$$

Para resolver a equação acima é necessário calcular as duas integrais,

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(i\sqrt{k_0^2 - k_n^2} |x - x'|\right) \exp\left(ik_0 x' \cos\theta\right) dx',$$
 (5.15)

е

$$I_2 = \int_0^\infty Ai(z'_n)y' \exp\left(ik_0y'\sin\theta\right) \, dy',\tag{5.16}$$

onde $z'_n = b^{1/3}(y' - k_n^2/b)$ e o k_n é associado com o zero da função de Airy a_n , na forma $k_n = b^{1/3}\sqrt{-a_n}$. A integral I_1 é transformada de Fourier e possui um resultado bem conhecido,

$$I_1 = \frac{2i \exp\left(ik_0 x \cos\theta\right) \sqrt{k_0^2 - k_n^2}}{k_0^2 \sin^2\theta - k_n^2}.$$
 (5.17)

A segunda integral, I_2 , é mais complicada. No apêndice B.2 é demonstrado o cálculo detalhado,

$$I_{2} = \frac{Ai'(a_{n})}{b^{2/3}} \left\{ (c_{0}^{2} + a_{n})e^{-i(c_{0} + c_{0}^{3}/3)} \times \left[\pi Gi(a_{n}) + i \int_{0}^{c_{0}} \exp(ic'a_{n} + c'^{3}/3) dc' \right] - 1 \right\},$$
(5.18)

onde $c_0 = b^{1/3} k_0 \sin \theta$ e Gi(z) é a função de Scorer [47]. Note que a região de integração é $[0, c_0]$, então é mais fácil integrar numericamente essa integral

do que a da equação (5.16), pois a função de Airy tem um comportamento oscilatório quando sua variável tende ao infinito. Finalmente, é encontrada a função de onda devido ao espalhamento pelo potencial linear,

$$\varphi^{+}(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + e^{ik_{0}x\cos\theta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Ai(z_{n})}{Ai'(a_{n})} \times$$

$$\left\{ \frac{-b^{2/3}}{(k_{0}^{2}\sin^{2}\theta - k_{n}^{2})} + \exp\left[-ik_{0}\sin\theta(k_{0}^{2}\sin^{2}\theta - k_{n}^{2})/b\right] \times \left[\pi Gi(a_{n}) + i\int_{0}^{c_{0}}\exp\left(ic'a_{n} + \frac{c'^{3}}{3}\right)dc'\right] \right\},$$
(5.19)
(5.19)

que é a solução exata da equação de LS, equação (5.4).

5.4 Comparação com a solução do potencial duplo

Nessa seção, são aplicados os resultados obtidos nas seções anteriores: o resultado exato, equação (5.20), e formalismo de potencial duplo, equação (5.5), para o espalhamento de uma onda plana espalhada pelo potencial linear e por uma parede de contorno. Além disso, também será comparado de maneira visual com o espalhamento da onda plana apenas pela parede de contorno, ou seja, na ausência do potencial linear. O objetivo dessa comparação é observar a diferença entre os dois espalhamentos. Para que a comparação seja feita de maneira fiel, o caso sem o potencial linear deve ter a mesma condição de contorno que o caso com o potencial linear, ou seja, $\psi(x,0) = 0$. Para efetuar essa condição de contorno foram feitas duas abordagens: modelar uma parede impenetrável localizada em y = 0 introduzida através do método de paredes de contorno com $\gamma \to \infty$, ou trabalhar com uma outra função de Green (diferente da equação (3.3)). Essa outra função de Green pode ser obtida através do bem conhecido método das imagens,

$$G_{0}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{im}{2\hbar^{2}} \left[H_{0}^{(1)} \left(k_{0} \sqrt{(x-x')^{2} + (y-y')^{2}} \right) - (5.21) \right] \\ H_{0}^{(1)} \left(k_{0} \sqrt{(x-x')^{2} + (y+y')^{2}} \right) \right].$$

Primeiramente, é implementado o método de paredes de contorno para determinar o espalhamento da onda plana usando a equação (A.7) onde M_{ij} é,

$$M_{ij} \approx \begin{cases} G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Delta_j & i \neq j, \\ \int_{s_-}^{s_j} ds \ G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}(s)) + \int_{s_j}^{s_+} ds \ G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}(s)) & i = j, \end{cases}$$

e a função de Green é dada pelas equações (3.3) e (5.21). Nesses cálculos numéricos foram considerados $\hbar = m = g_0 = 1$, então b = 2 e $k_0 = \sqrt{2E}$ e todos os valores de $|\psi|^2$ foram normalizados. Para o caso do potencial duplo a função de Green, dada pela equação (5.12), foi truncada no termo de número 200.

Em cada uma das figuras 5.1, 5.2 e 5.3 foram feitos gráficos de cores representando: (a) o espalhamento da onda plana por uma barreira pequena (obstáculo) e por uma barreira maior representando a condição de contorno de Dirichlet em y = 0 e isso é feito usando a função de Green usual, equação (3.3); (b) o espalhamento da onda plana apenas pela barreira menor com a função de Green calculada através do método das imagens (5.21); e (c) o espalhamento pela barreira pequena e o potencial linear usando o formalismo de potencial duplo (equação 5.5) e a solução exata (equação 5.20).

O primeiro espalhamento analisado é representado na figura 5.1. A onda plana incidente é $\exp(ik_0x)$, com energia E = 2. Em (a) pode-se observar que a função de onda é nula na região abaixo da barreira vertical, entretanto em (b) ela possui valores não nulos. Isso ocorre por causa da grande barreira horizontal que também serve como fonte de espalhamento, onde a onda toca primeiramente o ponto da barreira em x = -6. Em (c) a função de onda se "espreme" por baixo da barreira vertical devido à presença do potencial linear, como é esperado devido à atração gravitacional. A mesma onda incidente é usada na figura 5.2 e o mesmo comportamento surge na grande barreira horizontal. Entretanto, em (a) e (b) da figura 5.3 — onde o alvo é modelado por uma barreira semi-circular — pode-se observar que dentro da barreira a onda não se anula em ambos os casos. Fora da barreira o padrão de interferência é completamente diferente. Nesse exemplo a onda plana incidente é $\phi(x) = \exp(-ik_0y)$, ou seja se propaga de cima para baixo. Em (c) existe o potencial linear (figura 5.3 a função de onda aparece somente fora da barreira.

Nas figuras 5.1 (a), 5.2 (a) e 5.3 (a) pode-se observar que a grande barreira horizontal não representa bem a condição de contorno de Dirichlet em y = 0 porque possui um comprimento finito. Isso introduz um padrão de interferência diferente daquelas das figuras 5.1 (b), 5.2 (b) e 5.3 (b) que possuem condição de contorno embutida na função de Green (equação 5.21). As figuras 5.1, 5.2 e 5.3 (c) são os casos onde existe o potencial linear. É possível observar que a função de onda se concentra perto de y = 0 e desaparece para y grande devido à força vertical para baixo.



Figura 5.1: Gráfico de cores da densidade de probabilidade $|\psi(x, y)|^2$ para o espalhamento de uma onda plana, que colide com uma barreira vertical (de comprimento L = 3), da esquerda para direita com energia E = 2. Em (a) tanto o alvo quanto o chão é modelado pela parede de contorno. Em (b) possui o mesmo alvo que em (a), porém o chão (y = 0) é embutido na condição de contorno da função de Green, equação (5.21). Em (c) a função de Green é a 5.12.



Figura 5.2: Gráfico de cores da densidade de probabilidade $|\psi(x, y)|^2$ para o espalhamento de uma onda plana, que colide com uma barreira horizontal de comprimento L = 2, da esquerda para direita com energia E = 2. Em (a) o chão é modelado com a parede de contorno. Em (b) a condição de contorno está contida na função de Green (5.21). Em (c) está presente o potencial linear que atrai a função de onda para o chão.



Figura 5.3: Gráfico de cores da densidade de probabilidade $|\psi(x, y)|^2$ para o espalhamento de uma onda plana, que colide com uma barreira semi-circular, de cima para baixo com energia E = 2. Em (a) o chão é modelado com a parede de contorno. Em (b) a condição de contorno está contida na função de Green (5.21). Em (c) está presente o potencial linear que atrai a função de onda para o chão.
Capítulo 6

Barreira esferoidal

O presente capítulo trata de um espalhamento, em três dimensões espaciais, de uma onda plana que incide em um esferoide oblato. A solução para a equação de LS é encontrada. Todos os resultados presente nesse capítulo estão em um artigo que está submetido para a revista Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer cujo título é Exact Solution to the Lippmann-Schwinger Equation for a Spheroidal Barrier.

6.1 Conceitos introdutórios

Nessa seção, serão apresentados conceitos introdutórios à cerca do sistema de coordenadas, que será utilizado nesse capítulo. Existem dois sistemas de coordenadas esferoidais: o oblato e o prolato. Devido à forma do potencial escolhido, será utilizado o sistema de coordenadas esferoidal oblato.

6.1.1 Sistema de coordenadas

As coordenadas desse sistema são (ξ, η, ϕ) que são relacionados com as coordenadas cartesianas como,

$$\begin{cases} x = \frac{a}{2}\sqrt{(1-\eta^2)(1+\xi^2)}\cos\phi \\ y = \frac{a}{2}\sqrt{(1-\eta^2)(1+\xi^2)}\sin\phi \\ z = \frac{a}{2}\eta\xi \end{cases}$$
(6.1)

A escolha de um valor constante $\xi = \xi_0$ produz uma família de elipses confocais rotacionadas em torno do eixo menor, i.e., o eixo z. As curvas que possuem $\eta = \eta_0$, constante, são hipérboles confocais também rotacionadas com relação ao eixo z. Existem duas maneiras possíveis de representar o espaço R^3 . Nesse trabalho será escolhido aquele que possui as seguintes relações: $0 \le \xi < \infty, -1 \le \eta \le 1$ e $0 \le \phi < 2\pi$. O parâmetro a é igual à distância entre os focos das elipses.

6.1.2 A equação de Helmholtz

A equação de Helmholtz é separável tanto no sistema de coordenadas elipsoidal oblato quanto no prolato, e suas autofunções angulares e radiais de primeira espécie são escritas como $ps_n^m(-ic;\eta) \in S_n^{m(1)}(-ic;i\xi)$, respectivamente. Essas funções satisfazem equações diferenciais ordinárias semelhantes como pode ser observado,

$$\frac{d}{d\eta} \left[(1-\eta^2) \frac{d \operatorname{ps}_n^m(-ic;\eta)}{d\eta} \right] + \left[\lambda_{mn} - c^2 (1-\eta^2) - \frac{m^2}{1-\eta^2} \right] \operatorname{ps}_n^m(-ic;\eta) = 0,$$
(6.2)

е

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1+\xi^2) \frac{dS_n^{m(1)}(-ic;i\xi)}{d\xi} \right] - \left[\lambda_{mn} - c^2 (1+\xi^2) - \frac{m^2}{1+\xi^2} \right] S_n^{m(1)}(-ic;i\xi) = 0.$$
(6.3)

onde m é um inteiro e c é um parâmetro que é relacionado com a distância entre os focos e o número de onda através de c = ka/2. A versão prolata dessas equações e as funções podem ser facilmente obtidas efetuando a substituição $c \to ic$ e $\xi \to -i\xi$. A constante de separação λ_{mn} é denominada de autovalor e é a mesma para ambas equações diferenciais. A segunda solução de (6.2) é representada por qs^m_n($-ic; \eta$) e é chamada de função esferoidal angular de segundo tipo, enquanto que a segunda solução de (6.3) é denominada de $S_n^{m(2)}(-ic; i\xi)$. Ambas são irregulares: a primeira em $\eta = \pm 1$ e a segunda em $\xi = 0$.

Uma referência importante é [52], nela pode ser encontrada uma grande quantidade de propriedades dessas funções e também é levado em consideração o ponto de vista computacional.

6.2 Equação de Lippmann-Schwinger

A equação de LS na representação de posição $\langle \mathbf{r} |$ é,

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + A \int G(\mathbf{r}|\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r', \qquad (6.4)$$

onde $\mathbf{r} = (\xi, \eta, \phi)$ e $\mathbf{r}' = (\xi', \eta', \phi')$ representam um ponto no espaço e outro na fonte respectivamente. A constante $A = 2m^*/\hbar^2$, onde m^* é a massa da partícula e \hbar é a constante de Planck reduzida. $G(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ é a função de Green tridimensional para a partícula livre,

$$G(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \frac{\exp(ikR)}{R},\tag{6.5}$$

onde foi definido $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ e k é o número de onda.

O potencial $V(\mathbf{r}')$, usado para modelar a barreira esferoidal, é uma parede de contorno esferoidal,

$$V(\xi',\eta',\phi') = \int \int_{S} \gamma(u,v) \frac{\delta(\xi'-\xi_0)\delta(\eta'-u)\delta(\phi'-v)}{|J|} \, dS, \tag{6.6}$$

onde S é uma casca esferoidal definida por $\xi = \xi_0$, J é o Jacobiano, a função de intensidade do potencial é escrita como $\gamma(u, v)$ que pode variar ao longo da superfície. O elemento de superfície é escrito como,

$$dS = \frac{a^2}{4}\sqrt{(1+\xi_0^2)(\xi_0^2+u^2)} \, du \, dv.$$
(6.7)

Essa é a maneira usual para representar uma distribuição ao longo da superfície S, como pode ser visto na seção 2.5.

Substituindo (6.6) em (6.4) e integrando sobre as coordenadas ξ' , η' , ϕ' , é obtida a equação integral para a função de onda,

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = \varphi(\xi,\eta,\phi) + \beta \int_{-1}^{1} du \int_{0}^{2\pi} dv \,\gamma(u,v) \\ \times G(\xi,\eta,\phi|\xi_{0},u,v) \sqrt{\xi_{0}^{2} + u^{2}} \,\Psi(\xi_{0},u,v), \quad (6.8)$$

onde $\beta = (Aa^2/4)\sqrt{1+\xi_0^2}$.

Para resolver essa equação integral, é usada a expansão da função de

Green em termos das funções esferoidais [44, 48, 53, 54],

$$G(\xi,\eta,\phi|\xi',u,v) = i \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} (2n+1)(-1)^m \mathrm{ps}_n^m(-ic;\eta) \mathrm{ps}_n^{-m}(-ic;u) \\ \times S_n^{m(1)}(-ic;i\xi_<) S_n^{m(3)}(-ic;i\xi_>) e^{im(\phi-v)},$$
(6.9)

onde $S_n^{m(3)}(-ic; i\xi) = S_n^{m(1)}(-ic; i\xi) + iS_n^{m(2)}(-ic; i\xi)$ é a função esferoidal radial de terceira espécie, e $\xi_{<} = \min(\xi, \xi')$ e $\xi_{>} = \max(\xi, \xi')$. O parâmetro -ic indica com qual casca esferoidal que se deseja trabalhar: caso a escolha seja um esferoide oblato o parâmetro será puramente imaginário, enquanto que no prolato o parâmetro é real.

Substituindo (6.9) em (6.8) pode-se obter,

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = \varphi(\xi,\eta,\phi) + i\beta \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} (-1)^m (2n+1) \mathrm{ps}_n^m(-ic;\eta) \\ \times S_n^{m(1)}(-ic;i\xi_{<}) S_n^{m(3)}(-ic;i\xi_{>}) e^{im\phi} \\ \times \int_{-1}^1 du \int_0^{2\pi} dv \,\gamma(u,v) \sqrt{s^2 + u^2} \\ \times \mathrm{ps}_n^{-m}(-ic;u) e^{-imv} \,\Psi(\xi_0,u,v), \qquad (6.10)$$

essa equação é a principal para esse trabalho, pois a partir da mesma pode determinar a solução dado um $\gamma(u, v)$. Existem poucas integrais definidas envolvendo funções esferoidais — ao procurar nas seguintes referências [47, 48, 55, 56] pode-se encontrar menos que dez integrais — então para obter uma solução exata, foi escolhida a função $\gamma(u, v)$ de modo que seja possível integrar analiticamente essas funções.

É definido $a_{nm}(\xi_0)$ como sendo a integral que deseja-se encontrar a solução,

$$a_{nm}(\xi_0) = \int_{-1}^1 du \int_0^{2\pi} dv \ \gamma(u, v) \sqrt{\xi_0^2 + u^2} \ \mathrm{ps}_n^{-m}(-ic; u) e^{-imv} \Psi(\xi_0, u, v),$$
(6.11)

dessa forma, caso esse termo seja calculado então imediatamente é obtida a solução exata da equação (6.10), que pode ser escrita como,

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = \varphi(\xi,\eta,\phi) + \Psi_{sc}(\xi,\eta,\phi), \qquad (6.12)$$

onde

$$\Psi_{sc}(\xi,\eta,\phi) = i\beta \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} (-1)^m (2n+1) a_{nm}(\xi_0) \mathrm{ps}_n^m(-ic;\eta) \\ \times S_n^{m(1)}(-ic;i\xi_{<}) S_n^{m(3)}(-ic;i\xi_{>}) e^{im\phi}.$$
(6.13)

Qualquer solução possível da equação(6.10) deve possuir a forma da (6.12).

6.3 Solução para a função de intensidade do potencial variável

Nessa seção foi escolhido $\gamma = \gamma(\eta, \phi)$ de modo que a intensidade do potencial compense a curvatura do elemento de superfície, de maneira análoga ao caso da elipse no capítulo 4.

Ao observar a equação (6.10) e (6.11), é possível notar que função mais simples a ser escolhida não é a constante, e sim aquela que varia da forma,

$$\gamma(\eta,\phi) = \frac{\gamma_0}{\sqrt{\xi_0^2 + \eta^2}},\tag{6.14}$$

onde γ_0 é uma constante real. Em outras palavras, essa escolha de função de intensidade de potencial repara as variações de curvatura do elemento de superfície (6.7).

Usando as relações de ortogonalidade das funções esferoidais angulares,

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{ps}_{n}^{-m}(-ic; u) \, \mathrm{ps}_{n'}^{m}(-ic; u) \, du = \frac{2\delta_{n,n'}}{2n+1}, \tag{6.15}$$

assim como as relações de ortogonalidade bem conhecidas para as exponenciais $\{\exp(-imv)\}$ no intervalo $[0, 2\pi]$, e também multiplicando a equação (6.10) por $e^{-il\phi} ps_{n'}^{-l}(-ic; \eta)$, onde *l* é um inteiro, e integrando em relação à ϕ e η ,

$$a_{n'l}(\xi) = \int_{-1}^{1} d\eta \int_{0}^{2\pi} d\phi \ e^{-il\phi} \ \mathrm{ps}_{n'}^{-l}(-ic;\eta)\varphi(\xi,\eta,\phi) + 2\pi i\beta\gamma_{0}(-1)^{l} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)a_{ln}(\xi_{0})S_{n}^{l(1)}(-ic;i\xi_{<})S_{n}^{l(3)}(-ic;i\xi_{>}) \times \int_{-1}^{1} \mathrm{ps}_{n'}^{-l}(-ic;\eta) \ \mathrm{ps}_{n}^{l}(-ic;\eta) \ d\eta,$$
(6.16)

nessa equação foi substituída a contribuição da integral azimutal no lado direito da equação, que é $2\pi\delta_{lm}$. Foi considerada a onda incidente $\varphi(\xi, \eta, \phi)$ como uma onda plana se propagando na direção do eixo z e no sentido positivo. A mesma foi expandida em termos das funções esferoidais — a função e^{ikz} é dada por $e^{ic\eta\xi}$ em coordenadas esferoidais oblata, como pode ser visto na referência [48] na equação (35) da página 315 com $\vartheta = 0$ ou equação (97) da [53] — para obter

$$\varphi(\xi,\eta,\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)i^n \operatorname{ps}_n^0(-ic;1) \operatorname{ps}_n^0(-ic;\eta) S_n^{0(1)}(-ic;i\xi).$$
(6.17)

Observe que não depende do ângulo azimutal, então a contribuição de ϕ na integral em (6.16) é simplesmente $2\pi\delta_{l0}$. Portanto, os coeficientes nãonulos são $a_{nl}(\xi) = a_{n0}(\xi)$, os quais serão escritos como $a_n(\xi)$, para abreviar a notação. Usando (6.15) foi obtido o relevante $a_n(\xi_0)$ avaliado na casca esferoidal,

$$a_n(\xi_0) = \frac{c_n(\xi_0)}{1 - 4\pi i \beta \gamma_0 \ S_n^{0(1)}(-ic; i\xi_0) \ S_n^{0(3)}(-ic; i\xi_0)},$$
(6.18)

onde $c_n(\xi)$ são os coeficientes de Fourier da onda plana na base de funções esferoidais,

$$c_n(\xi_0) = 4\pi i^n \operatorname{ps}_n^0(-ic; 1) S_n^{0(1)}(-ic; i\xi_0).$$
(6.19)

Finalmente, a solução exata para a equação de LS, quando a onda plana incide na barreira esferoidal é,

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = e^{ic\eta\xi} + i\beta\gamma_0 \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)a_n(\xi_0) \operatorname{ps}_n^0(-ic;\eta) \qquad (6.20)$$
$$\times S_n^{0(1)}(-ic;i\xi_{<}) S_n^{0(3)}(-ic;i\xi_{>}),$$

onde a função de intensidade $\gamma(u, v)$ é dada pela equação (6.14). No interior da região $\xi_{<} = \xi$ que varia de 0 à ξ_{0} ; e, na região exterior $\xi_{>} = \xi$, que, por sua vez, varia de ξ_{0} até ∞ . A solução pode ser simplificada ainda mais, de modo que pode ser escrita como,

$$\Psi_{INT}(\xi,\eta,\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1)\psi_n(\xi_0) \operatorname{ps}_n^0(-ic;1) \operatorname{ps}_n^0(-ic;\eta) S_n^{0(1)}(-ic;i\xi),$$
(6.21)

onde

$$\psi_n(\xi_0) = \frac{1}{1 - 4\pi i \beta \gamma_0 \ S_n^{0(1)}(-ic; i\xi_0) \ S_n^{0(3)}(-ic; i\xi_0)}.$$
 (6.22)

6.3.1 Ressonância

A partir dessa solução exata é possível investigar as condições de ressonância e a amplitude de espalhamento. Na solução interior (6.21) aparece o efeito de ressonância quando a onda plana incidente é preparada de uma maneira

Zeros da função $S_n^{0(1)}(-ic;i\xi_0)$	1°	2°	3^{o}	4°
n = 0	3.3388	7.7257	12.236	16.759
n = 1	5.4872	9.9781	14.497	23.551
n=2	5.5533	9.6543	14.097	23.010
n = 3	7.4811	11.865	16.340	20.844

Tabela 6.1: Soluções da equação (6.23) para o parâmetro c quando $\xi_0 = 0.693147 = \operatorname{arccosh}(1.25)$.

específica de modo a produzir um padrão de interferência construtiva dentro da barreira. Em outras palavras, pode-se dizer que escolhendo valores específicos para o número de onda e para a constante γ_0 , consegue-se escolher o modo de ressonância. Primeiramente, foi notado que é possível controlar os coeficientes em (6.21), chamados de $\psi_n(\xi_0)$. Se considerar valores grandes para γ_0 todos os coeficientes $\psi_n(\xi_0)$ se tornam pequenos. Entretanto, uma dessas contribuições pode ter valor igual à um quando for obtido um zero da equação transcendental,

$$S_n^{0(1)}(-ic;i\xi_0) = 0, (6.23)$$

para o parâmetro c, que é relacionado com o número de onda via c = ka/2. Um fato importante a ser observado é que para um dado n, essa equação possui infinitas soluções, algumas delas estão listadas na tabela 6.1.

Portanto, todos os $\psi_n(\xi_0)$ exceto um, como por exemplo n = p, serão pequenos pois γ_0 será grande. O termo de exceção $ps_p^0(-ic;\eta) S_p^{0(1)}(-ic;i\xi)$ será multiplicado por um, pois $S_p^{0(1)}(-ic;i\xi_0) = 0$. Na figura 6.1 foram feitos quatro gráficos de cores das seguintes densidades de probabilidades: os gráficos superiores estão os modos de ressonância relacionados ao primeiro zero de $S_0^{0(1)}(-ic;i\xi_0)$ e de $S_1^{0(1)}(-ic;i\xi_0)$, esquerda e direita respectivamente. Nos gráficos inferiores estão os modos de ressonância obtidos quando o número de onda é igual ao segundo zero de $S_0^{0(1)}(-ic;i\xi_0)$ e de $S_2^{0(1)}(-ic;i\xi_0)$, respectivamente. A barreira é representada por uma linha preta em forma de elipse, que é a interseção entre o esferoide e o plano yz. Vale a pena notar que a densidade de probabilidade em todo o espaço pode ser imaginada como aquelas presentes na figura 6.1 rotacionadas em torno do eixo z. Para poder fazer os gráficos foi truncada a série (6.21) em $n_{max} = 17$ pois a convergência ocorre rapidamente [56] quando |c| < 1000. Em cada gráfico foi fixada a coordenada ξ — começando em 0.0025 e terminando em $\xi_0 - 0.019$ para acomodar a linha que representa a barreira — e foram feitas 90 elipses dentro da barreira e outras 90 do lado de fora — começando em $\xi_0 + 0.015$ e finalizando em 1. A densidade de probabilidade é representada pela cor, sendo que o valor mais baixo (zero) é representado pela cor azul enquanto que os valores mais altos são representados pela cor vermelha.

Superfícies nodais

As superfícies nodais são superfície sob as quais a função de onda é nula. Nessa etapa do trabalho são apresentadas essas superfícies para o exemplo da figura 6.1. No gráfico superior esquerdo não possui superfície nodal pois a função esferoidal angular $ps_0^0(-3.3388i;\eta)$ não possui zeros. Para a segunda ressonância (gráfico superior direito) é observado que a densidade de probabilidade é nula quando $\eta = 0$ pois a função $ps_1^0(-5.4872i;\eta)$ se anula nesse ponto, portanto a superfície nodal é o plano $\eta = 0$, que coincide com o plano xy. A terceira ressonância (inferior esquerdo) possui uma superfície nodal em forma de um esferoide oblato caracterizado por $\xi = 0.2357$ — que é um zero da função radial $S_0^{0(1)}(-7.7257i;i\xi)$. A função de onda se anula somente nesse esferoide — que envelopa a região vermelha central. No ultimo exemplo (inferior esquerdo) apresentado na figura 6.1 é possível observar um hiperboloide de uma folha localizados no zero de $ps_2^0(-9.6543i;\eta)$, que ocorrem em $\eta = \pm 0.9432$. Além disso, a função de onda também se anula no esferoide caracterizado em $\xi = 0.2477$ que é um zero de $S_2^{0(1)}(-9.6543i; i\xi)$.

6.3.2 Amplitude de espalhamento

Ambas as funções esferoidais, angular e radial, foram construídas de maneira aproximada utilizando séries de Legendre associadas e de funções esféricas de Bessel, como pode ser visto nas referências [48, 57, 58]. Portanto, na região assintótica, quando $c\xi \to \infty$ as funções esferoidais radiais de terceira espécie tendem à função esférica de Bessel, que por sua vez se comportam como ondas planas. Como pode ser visto no livro do Flammer [57] é possível escrever,

$$S_n^{0(3)}(-ic;i\xi) \xrightarrow[c\xi\to\infty]{} \frac{1}{c\xi} \exp\left[ic\xi - \frac{i\pi}{2}(n+1)\right], \qquad (6.24)$$

enquanto que o mesmo limite $S_n^{0(1)}(-ic; i\xi) \to j_n(kr)$, onde $j_n(kr)$ é a função esférica de Bessel de ordem n. Então, apenas deve-se tomar o limite assintótico para a solução exata da função de onda (6.20) — nesse limite a coordenada $\eta \to \cos \theta$ sendo θ o usual angulo polar esférico — e é comparado com a expressão bem conhecida,

$$\Psi_{EXT}(r,\theta,\phi) \xrightarrow[c\xi\to\infty]{} \varphi(r,\theta,\phi) + f(\theta,\phi) \frac{e^{ikr}}{r},$$

onde f depende somente de θ devido à simetria azimutal do problema estudado. A amplitude de espalhamento é escrita como,

$$f(\theta) = \frac{4\pi i\beta\gamma_0}{k} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)i^n \ \psi_n(\xi_0) \ \mathrm{ps}_n^0(-ic;1) \left[S_n^{0(1)}(-ic;i\xi_0)\right]^2 \ \mathrm{ps}_n^0(-ic;\cos\theta)$$
(6.25)

6.4 Generalização para múltiplas barreiras esferoidais

Usando a metodologia aplicada na seção anterior e no capítulo 3, não é difícil estudar o problema de espalhamento da onda plana por N cascas esferoidais oblatas caracterizadas por $\xi_1, \xi_2, ..., \xi_N$, onde a distância entre os focos a é a mesma para todos eles. Considere o potencial,

$$V(\xi',\eta',\phi') = \sum_{j=1}^{N} \int \int_{S_j} \gamma_j(u,v) \frac{\delta(\xi'-\xi_j)\delta(\eta'-u)\delta(\phi'-v)}{|J|} \, dS_j, \quad (6.26)$$

onde S_j é o j-ésimo esferoide caracterizado por $\xi = \xi_j$, e cada um deles possui uma função de intensidade de acoplamento $\gamma_j = \gamma_j(u, v)$. Os esferoides possuem elementos de superfície $dS_j = (a^2/4)\sqrt{(1+\xi_j^2)(\xi_j^2+u^2)} du dv$. A equação de LS na representação de posição é escrita,

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = \varphi(\xi,\eta,\phi) + i \sum_{j=1}^{N} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \beta_j(-1)^m (2n+1)$$

$$\times ps_n^m(-ic;\eta) e^{im\phi} S_n^{m(1)}(-ic;i\xi_{j<}) S_n^{m(3)}(-ic;\xi_{j>})$$

$$\times \int_{-1}^{1} du \int_{0}^{2\pi} dv \,\gamma_j(u,v) \sqrt{\xi_j^2 + u^2}$$

$$\times ps_n^{-m}(-ic;u) e^{-imv} \,\Psi(\xi_j,u,v),$$
(6.27)

onde $\beta_j = (Aa^2/4)\sqrt{1+\xi_j^2}$ e é definido $\xi_{j>} = \max(\xi,\xi_j)$ e $\xi_{j<} = \min(\xi,\xi_j)$. Seguindo a metodologia da seção anterior, foram escolhidas as funções mais simples, que são,

$$\gamma_j(u,v) = \frac{\gamma_{0j}}{\sqrt{\xi_j^2 + u^2}},$$
(6.28)

com γ_{0j} sendo constantes reais, portanto,

$$\Psi(\xi,\eta,\phi) = \varphi(\xi,\eta,\phi) + i \sum_{j=1}^{N} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \beta_{j} \gamma_{0j} (2n+1) A_{nm}(\xi_{j}) \\ \times \mathrm{ps}_{n}^{m}(-ic;\eta) S_{n}^{m(1)}(-ic;i\xi_{j<}) S_{n}^{m(3)}(-ic;i\xi_{j>}), \quad (6.29)$$

onde

$$A_{nm}(\xi_j) = \int_{-1}^1 du \ \int_0^{2\pi} dv \ \mathrm{ps}_n^{-m}(-ic; u) e^{-imv} \ \Psi(\xi_j, u, v).$$
(6.30)

Multiplicando (6.29) por $ps_{n'}^{-m'}(-ic;\eta)e^{-im'\phi}$, e integrando com relação a $\eta \in \phi$ e usando as propriedades de ortogonalidade, é obtido,

$$A_{nm}(\xi) = c_n(\xi) + 4\pi i (-1)^m \sum_{j=1}^N \beta_j \gamma_{0j} S_n^{m(1)}(-ic; i\xi_{j<}) S_n^{m(3)}(-ic; i\xi_{j>}) A_{nm}(\xi_j),$$
(6.31)

onde novamente $c_{n0}(\xi)$ é representado por $c_n(\xi)$ que é dado por (6.19). É avaliado (6.31) em cada casca esferoidal. Os coeficientes irão satisfazer um sistema linear de equações, $(\mathbf{1} - \mathbf{M})\mathbf{A} = \mathbf{c}$ para cada par (n, m), onde \mathbf{M} é a matriz quadrada dada por,

$$M = 4\pi i (-1)^m \begin{pmatrix} \beta_1 \gamma_{01} S_{11} & \beta_2 \gamma_{02} S_{12} & \beta_3 \gamma_{03} S_{13} & \dots \\ \beta_1 \gamma_{01} S_{12} & \beta_2 \gamma_{02} S_{22} & \beta_3 \gamma_{03} S_{23} & \dots \\ \beta_1 \gamma_{01} S_{13} & \beta_2 \gamma_{02} S_{23} & \beta_3 \gamma_{03} S_{33} & \dots \end{pmatrix},$$
(6.32)

e é definido o produto entre as funções esferoidais radiais avaliados nos pontos $\xi_a ~ {\rm e} ~ \xi_b ~ {\rm como},$

$$S_{ab} = S_n^{m(1)}(-ic; i\xi_a) S_n^{m(3)}(-ic; i\xi_b),$$

e **c** e **A** são vetores coluna **c** = $(c_n(\xi_1) \ c_n(\xi_2) \ c_n(\xi_3) \ c_n(\xi_4) \ \cdot \cdot \cdot)^T$ e

 $\mathbf{A} = (A_{nm}(\xi_1) \ A_{nm}(\xi_2) \ A_{nm}(\xi_3) \ A_{nm}(\xi_4) \ \cdots)^T$. Ao resolver esse sistema se torna possível escrever as soluções para cada região: interior, entre as cascas 1 e 2, entre as cascas 2 e 3 e *etc...* . Será aplicado esse procedimento para o caso de uma onda plana que se propaga no sentido positivo do eixo z, e incide em duas barreiras esferoidais. Devido a simetria azimutal do problema, os termos que contribuirão são aqueles que possuem m = 0, portanto será escrito $A_{n0}(\xi)$ como $A_n(\xi)$. Os dois esferoides estão localizados em $\xi = \xi_1$ e $\xi = \xi_2$, onde $\xi_2 > \xi_1$ os coeficientes são,

$$A_n(\xi_1) = \frac{c_n(\xi_1)}{D},$$
(6.33)

е

$$A_{n}(\xi_{2}) = \frac{4\pi i^{n+1} \mathrm{ps}_{n}^{0}(-ic;1)}{D} \left[4\pi \beta_{1} \gamma_{01} S_{n}^{0(1)}(-ic;i\xi_{1}) (S_{12} - S_{21}) -iS_{n}^{0(1)}(-ic;i\xi_{2}) \right], \qquad (6.34)$$

onde $D = 1 - 4\pi i (\beta_1 \gamma_{01} S_{11} + \beta_2 \gamma_{02} S_{22}) - 16\pi^2 \beta_1 \beta_2 \gamma_{01} \gamma_{02} (S_{11} S_{22} - S_{12}^2)$. Portanto, na região interior $\xi < \xi_1$ a função de onda exata é,

$$\Psi_{1}(\xi,\eta,\phi) = \varphi(\xi,\eta,\phi) + i \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \mathrm{ps}_{n}^{0}(-ic;\eta) S_{n}^{0(1)}(-ic;i\xi) \qquad (6.35)$$
$$\times \left[\beta_{1}\gamma_{01}A_{n}(\xi_{1})S_{n}^{0(3)}(-ic;i\xi_{1}) + \beta_{2}\gamma_{02}A_{n}(\xi_{2})S_{n}^{0(3)}(-ic;i\xi_{2})\right],$$

e na região entre as duas cascas, $\xi_1 < \xi < \xi_2,$ tem-se,

$$\Psi_{2}(\xi,\eta,\phi) = \varphi(\xi,\eta,\phi) + i\beta_{1}\gamma_{01}\sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)A_{n}(\xi_{1})\mathrm{ps}_{n}^{0}(-ic;\eta)$$
$$\times S_{n}^{0(1)}(-ic;i\xi_{1})S_{n}^{0(3)}(-ic;i\xi) + i\beta_{2}\gamma_{02}\sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)A_{n}(\xi_{2})$$
$$\times \mathrm{ps}_{n}^{0}(-ic;\eta)S_{n}^{0(1)}(-ic;i\xi)S_{n}^{0(3)}(-ic;i\xi_{2}), \qquad (6.36)$$

e fora da casca externa $\xi>\xi_2$ a função de onda é escrita como,

$$\Psi_{3}(\xi,\eta,\phi) = \varphi(\xi,\eta,\phi) + i \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \mathrm{ps}_{n}^{0}(-ic;\eta) S_{n}^{0(3)}(-ic;i\xi) \\ \times \left[\beta_{1}\gamma_{01}A_{n}(\xi_{1})S_{n}^{0(1)}(-ic;i\xi_{1}) + \beta_{2}\gamma_{02}A_{n}(\xi_{2})S_{n}^{0(1)}(-ic;i\xi_{2})\right].$$
(6.37)

A condição de ressonância para as duas barreiras esferoidais requerem que $S_n^{0(1)}(-ic; i\xi_1) = 0$, $S_n^{0(1)}(-ic; i\xi_2) = 0$ e γ_{02} seja grande, de modo que a função de onda no interior é reescrita como,

$$\Psi_1(\xi,\eta,\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n (2n+1) \mathrm{ps}_n^0(-ic;1) \mathrm{ps}_n^0(-ic;\eta) S_n^{0(1)}(-ic;i\xi)}{1 - 4\pi i \beta_2 \gamma_{02} S_n^{0(1)}(-ic;i\xi_2) S_n^{0(3)}(-ic;i\xi_2)}.$$
 (6.38)

Se γ_{02} for grande os modos fornecerão contribuições muito pequenas para a função de onda, entretanto, caso seja escolhido um zero de $S_n^{0(1)}(-ic; i\xi_2)$, o n-ésimo modo será amplificado e o efeito de ressonância aparece.

Nesse capítulo, foram apresentadas as soluções para o espalhamento de uma onda plana por potenciais esferoidais modelados por uma parede de contorno. Foram encontradas as condições de ressonância para uma e para duas barreiras esferoidais.



Figura 6.1: Gráfico de cores da densidade de probabilidade não normalizados $|\Psi(\xi,\eta,\phi)|^2$, equação (6.20), para $\phi = 0$ e $\phi = \pi$, onde x > 0 e x < 0, respectivamente. A barreira esferoidal oblata é representada pela linha preta e o padrão de espalhamento pode ser gerado efetuando a rotação em torno do eixo z. Os valores do número de onda foram escolhidos de tal forma que são associados aos zeros da função esferoidal radial de primeira espécie. Nos gráficos superiores: k = 3.3388 (esquerda) e k = 5.4872 (direita) são os primeiro zeros de $S_0^{0(1)}(-ik; i\xi_0)$ e de $S_1^{0(1)}(-ik; i\xi_0)$, respectivamente. Nos gráficos inferiores: k = 7.7257 (esquerda) e k = 9.6543 (direita), são os segundo zeros de $S_0^{0(1)}(-ik; i\xi_0)$ e de $S_2^{0(1)}(-ik; i\xi_0)$, respectivamente. Os parâmetros são: $\gamma_0 = 1000, \ \xi_0 = 0.693147, \ a = 2, \ n_{max} = 17$, e foram usadas as unidades $\hbar = m^* = 1$, i.e. A = 2.

Capítulo 7

Conclusões e projetos futuros

No presente estudo, foram encontradas soluções analíticas para a equação de LS para diversos potenciais modelados pela parede de contorno. No capítulo 3 foi mostrado o procedimento para obter soluções exatas, que consiste em encontrar as autofunções do operador integral. Tais autofunções formam uma base, de modo que as funções de onda podem ser expandidas. Para esses casos circulares as autofunções são as exponenciais complexas, ou seja, as funções foram expandidas em série de Fourier. Tendo efetuado a expansão o problema deixa de ser uma equação integral e passa a ser uma equação algébrica, ou sistemas de equações lineares nos casos de múltiplas circunferências concêntricas e para as distribuições. O método de paredes de contorno foi utilizado para verificar a confiabilidade da solução analítica, e foi encontrado um bom acordo entre a solução numérica e a analítica. No capítulo 4, foi feito um procedimento semelhante ao do capítulo 3, e foram obtidas soluções analíticas para o espalhamento por elipses. No capítulo 5, foi utilizado o formalismo de potencial duplo para estudar o espalhamento devido a presença de dois potenciais, um deles linear e outro uma barreira. Foi encontrada a solução analítica para o espalhamento apenas pelo potencial linear, e para isso ser feito foi obtida a função de Green para o problema envolvendo o potencial linear. Depois com o método de paredes de contorno foi adicionada uma barreira (obstáculo). Para tentar comparar o espalhamento entre os casos com e sem o potencial linear foi utilizada a mesma condição de contorno em ambos os casos. No capítulo 6, foi mostrada a solução da equação de LS para um espalhamento tridimensional devido à presença de uma barreira esferoidal. Também foi generalizada para o espalhamento com N cascas esferoidais confocais. As condições para a ressonância também foram obtidas. Vale ressaltar que os resultados encontrados nessa Tese são originais. Foram devidamente publicados em periódicos, os resultados sobre o espalhamento por um bilhar circular [22], pela elipse [43] e espalhamento utilizando o potencial duplo [50]. Os resultados envolvendo as distribuições e as múltiplas barreiras circulares concêntricas estão submetidos.

Como projeto futuro, serão investigadas outras curvas com diferentes geometrias para o espalhamento, como por exemplo: hipérboles, em duas dimensões; circunferência, elipse, e a curva de Viviani; em três dimensões. Vale citar, o espalhamento em três dimensões devido a outros tipos de superfícies, como discos circulares, discos elípticos e o toroide. Também desejase investigar outros potenciais que não são barreiras, mas que possuem uma semelhança com distribuições, como os potenciais não-locais. Do ponto de vista experimental, é desejado estabelecer uma conexão entre o espalhamento quântico e o espalhamento de luz.

Apêndice A

O método de paredes de contorno

O método de paredes de contorno é um método numérico que fornece um resultado confiável para a função de onda espalhada por uma barreira arbitrária [33]. Ele é um método rápido e de fácil implementação e serve para resolver equações integrais. Esse método foi empregado em outros trabalhos por Zanetti e colaboradores [59, 60]. Nessa tese foi utilizado esse método para comparar com os resultados exatos, equações (3.57) e (3.58), ele foi implementado no *software* Mathematica a fim de obter os resultados numéricos. Nesse apêndice será brevemente descrito o método e em conjunto alguns detalhes devido à implementação. Primeiramente é dividida a curva C em N partes,

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^{N} \int_{C_j} ds \ \gamma \ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s)) \ \psi(\mathbf{r}(s)), \tag{A.1}$$

e a função de onda é aproximada pelo seu valor no ponto médio entre os extremos do segmento C_j ,

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \phi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^{N} \psi(\mathbf{r}(s_j)) \int_{C_j} ds \ \gamma \ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s)), \tag{A.2}$$

Nessa tese, o elemento ds depende da curva. Como se trata de uma integral de linha, o elemento ds irá depender da parametrização da curca C. Então, assumindo um vetor de parametrização $\mathbf{P} = (P_x(t), P_y(t))$, o elemento de comprimento é descrito,

$$ds = \left| \frac{d\mathbf{P}}{dt} \right| dt. \tag{A.3}$$

Definindo os elementos de matriz,

$$M_{ij} = \int_{C_j} ds \ G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}(s)), \tag{A.4}$$

pode-se escrever,

$$\psi(\mathbf{r}_i) = \phi(\mathbf{r}_i) + \sum_{j=1}^N \gamma M_{ij} \psi(\mathbf{r}_j).$$
(A.5)

Para efetuar os cálculos numéricos de maneira mais apropriada é definido o vetor, $\Psi = [\psi(\mathbf{r}_1), ..., \psi(\mathbf{r}_N)]^T$ onde as componentes da função de onda são avaliadas no contorno $[\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N]$, e $\Phi = [\phi(\mathbf{r}_1), ..., \phi(\mathbf{r}_N)]^T$ é o vetor cujas componentes são compostas pela onda incidente. Então a equação (A.5) pode ser reescrita na forma matricial $\Psi = \Phi + \gamma \mathbf{M} \Psi$. E pode ser resolvida para a função de onda no contorno,

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \phi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^{N} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \Delta_j(\mathbf{T}\Phi)_j,$$
 (A.6)

onde $\mathbf{T} = \gamma [\mathbf{1} - \gamma \mathbf{M}]^{-1}$ e Δ_j é o comprimento do segmento C_j . Tomando o

limite de barreira impenetrável, $\gamma \to \infty$, e

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \phi(\mathbf{r}) - \sum_{j=1}^{N} \Delta_j \ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) (\mathbf{M}^{-1} \Phi)_j.$$
 (A.7)

Essas equações são as soluções numéricas obtidas pelo método de paredes de contorno. Cabe aqui salientar alguns detalhes a respeito da implementação. Note que a matriz **M** possui N^2 elementos, portanto torna-se muito custoso computacionalmente efetuar N^2 integrações numéricas. Para diminuir o tempo necessário para calcular os elementos de matriz M_{ij} foi usado uma outra aproximação, que é a integração em banda (*band-intagrated* no artigo [33]). Essa aproximação consiste em efetuar a integração numérica em A.4 somente para pontos \mathbf{r}_i próximos do ponto médio do segmento C_j , ou seja, somente quando |i - j| < d, onde d é uma escolha arbitrária. Nesse trabalho foi escolhido d = 1, então a integração numérica é efetuada somente quando i = j, ou seja nos elementos da diagonal da matriz M. Para todos os outros valores com $i \neq j$ é feita a aproximação,

$$M_{ij} \approx G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Delta_j.$$
 (A.8)

O método numérico usado para efetuar a integração é o chamado de método de exponencial duplo (*Double exponential method* que pode ser encontrado em [61]). Ele consiste em uma troca de variável seguida pelo método dos trapézios. É um método útil para calcular a integral de funções que possuem uma singularidade em um dos limites do intervalo de integração. Então a integral da equação (A.4) é separada em uma soma de duas integrais, deixando a singularidade exatamente no limite de integração,

$$M_{ij} = \int_{s_{-}}^{s_j} ds \ G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}(s)) + \int_{s_j}^{s_{+}} ds \ G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}(s))$$
(A.9)

onde s_{-} é o menor valor de C_j , e s_{+} é o maior valor e s_j é onde ocorre a singularidade, que é $\mathbf{r}(s_j) = \mathbf{r}_j = \mathbf{r}_i$.

A razão pelo qual foi usado esse procedimento é por causa da função de Green,

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{im}{2\hbar^2} H_0^{(1)} \left(k_0 \left| \mathbf{r} - \mathbf{r}' \right| \right), \qquad (A.10)$$

que possui um polo quando $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$.

Apêndice B

Funções de Airy

As funções de Airy são as soluções da equação diferencial,

$$\frac{d^2y(z)}{dz^2} - zy(z) = 0,$$
(B.1)

por ser uma equação diferencial de segunda ordem existem duas funções de Airy Ai(z) e Bi(z) de modo que a solução geral é

$$y(x) = c_1 A i(z) + c_2 B i(z).$$
 (B.2)

Ambas as funções são mostradas na figura B, a função Bi(z) não é normalizável, enquanto que Ai(z) é normalizável entre $[0, \infty]$.

B.1 Relação de Ortogonalidade

Nesse apêndice serão listadas algumas propriedades das funções de Airy [51] que foram usadas nessa tese. As funções de Airy formam uma base ortogonal



no intervalo $[0,\infty)$,

$$\int_{0}^{\infty} Ai(x+a_{n})Ai(x+a_{n'})dx = Ai'^{2}(a_{n})\delta_{nn'},$$
 (B.3)

onde δ_{nm} é a delta de Kroenecker, a_n são os zeros da função de Airy e a linha Ai'() representa a primeira derivada. Então qualquer função integrável f(x) pode ser expandida em termos de funções de Airy,

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \frac{Ai(x+a_n)}{Ai'(a_n)}.$$
 (B.4)

Os coeficientes c_n são obtidos através,

$$c_n = \frac{1}{Ai'(a_n)} \int_0^\infty f(x)Ai(x+a_n) \, dx. \tag{B.5}$$

B.2 Cálculo da Integral (5.16)

Aqui será calculada a integral da equação (5.16),

$$I_2 = \int_0^\infty Ai(z'_n)y' \exp(ik_0y'\sin\theta) \, dy'. \tag{B.6}$$

É efetuada a mudança da variável de integração para z_n^\prime ,

$$I_2 = \frac{1}{b^{2/3}} \int_{a_n}^{\infty} Ai(z'_n) \exp\left[i\left(\frac{k_0 \sin\theta}{b^{1/3}}\right)(z'_n - a_n)\right] (z'_n - a_n) \, dz'_n, \qquad (B.7)$$

e é reescrita como suas integrais,

$$I_2 = \frac{e^{-ic_0 a_n}}{b^{2/3}} \left[\int_{a_n}^{\infty} z'_n Ai(z'_n) e^{ic_0 z'_n} dz'_n - a_n \int_{a_n}^{\infty} Ai(z'_n) e^{ic_0 z'_n} dz'_n \right], \quad (B.8)$$

onde $c_0 = (k_0 \sin \theta) / b^{1/3}$. Definindo a segunda integral como função de c_0 ,

$$M(c_0) = \int_{a_n}^{\infty} Ai(z'_n) e^{ic_0 z'_n} dz'_n,$$
 (B.9)

e observe que a primeira integral da equação (B.8) é proporcional a derivada de $M(c_0)$,

$$I_2 = \frac{e^{-ic_0 a_n}}{b^{2/3}} \left[\frac{1}{i} \frac{dM(c_0)}{dc_0} - a_n M(c_0) \right],$$
(B.10)

então é necessário calcular a função $M(c_0)$. Integra-se por partes a equação (B.9),

$$M(c_0) = -\frac{1}{ic_0} \int_{a_n}^{\infty} e^{ic_0 z'_n} Ai'(z'_n) dz'_n.$$
 (B.11)

Integrando por partes de novo e usando a equação diferencial $Ai''(z'_n) = z_n Ai(z_n)$ tem-se,

$$M(c_0) = \frac{1}{c_0^2} \left[-e^{ic_0 a_n} Ai'(a_n) - \int_{a_n}^{\infty} z'_n e^{ic_0 z'_n} Ai'(z'_n) \, dz'_n \right],$$
(B.12)

então pode-se observar que a segunda integral é a derivada de M, e atingimos a equação diferencial,

$$\frac{dM(c_0)}{dc_0} + ic_0^2 M(c_0) = -iAi'(a_n)e^{ic_0a_n}.$$
(B.13)

Como é sabido o valor de M(0) pode-se determinar a solução usando condição de contorno,

$$M(0) = -\pi Ai'(a_n)Gi(a_n), \qquad (B.14)$$

onde Gi() é a função de Scorer [51, 47]. É obtido,

$$M(c_0) = -\exp(-ic_0^3/3)Ai'(a_n) \left[\pi Gi(a_n) + i \int_0^{c_0} \exp\left(ic'a_n + \frac{c'^3}{3}\right) dc'\right],$$
(B.15)

com esse resultado, finalmente é possível escrever a integral I_2 ,

$$I_{2} = \frac{Ai'(a_{n})}{b^{2/3}} \left\{ (c_{0}^{2} + a_{n})e^{-i(c_{0} + c_{0}^{3}/3)} \left[\pi Gi(a_{n}) + i \int_{0}^{c_{0}} \exp\left(ic'a_{n} + \frac{c'^{3}}{3}\right)dc' \right] - 1 \right\}.$$
 (B.16)

Apêndice C

Sistema de unidades

Nessa tese foi utilizado o sistema de unidades atômicas, que consiste em definir como uma unidade o valor de grandezas específicas. As grandezas são a massa do elétron m_e , a carga do elétron e, a constante de Planck reduzida \hbar e a permissividade elétrica do vácuo ϵ_0 multiplicada por 4π , ou seja,

$$m_e = e = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1. \tag{C.1}$$

Para efetuar a conversão para o sistema internacional de unidades (S.I.) basta multiplicar pelo seu valor correspondente no S.I., como por exemplo a massa utilizada no capítulo 4, $2m^* = 1$. Nesse caso, a massa possui a seguinte relação,

$$m* = \frac{1}{2} = \frac{1}{2}m_e \approx \frac{1}{2} \times 9.1 \times 10^{-22}\mu g = 4.6 \times 10^{-22}\mu g.$$
(C.2)

O mesmo procedimento é valido para todas as outras unidades, como por exemplo o comprimento. O raio de uma circunferência R = 1 presente no capítulo 3, pode ser convertido de forma semelhante $R = 1 = 1a_0 \approx 5.3 \times 10^{-11} m$, onde a_0 é o raio de Bohr.

Apêndice D

Lista de Publicações

Nesse apêndice se encontram todas as publicações do autor da presente tese. Trabalhos publicados que foram obtidos devido ao desenvolvimento dessa tese.

- A. C. Maioli, A. G. M. Schmidt, Exact solution to LS equation for a circular billiard, Journal of Mathematical Physics 59 (2018) 122102,
- A. C. Maioli, A. G. M. Schmidt, Exact solution to the LS equation for an elliptical billiard, Physica E 111 (2019) 51,
- A. C. Maioli, A. G. M. Schmidt, Two-dimensional scattering by boundarywall and linear potentials, Physica Scripta 95, (2019) 035227.

Trabalhos submetidos relacionados com o desenvolvimento da tese.

- A. C. Maioli, A. G. M. Schmidt, Exact Solutions for the Lippmann-Schwinger Equation in Two Dimensions and Invisibility Conditions, submetido na revista it Journal of Mathematical Physics,
- 2. A. C. Maioli, A. G. M. Schmidt, Exact Solution to the Lippmann-Schwinger Equation for a Spheroidal Barrier, submetido em Journal of

Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.

Trabalhos publicados não relacionados com a tese.

A. C. Maioli, M. H. M. Passos, W. F. Balthazar, C. E. R. Souza, J. A. O. Huguenin, A. G. M. Schmidt, *Quantization and experimental realization of the Colonel Blotto game*, Quantum Information Processing 18 (2019) 10.

Referências Bibliográficas

- E. Rutherford, J. Chadwick, C. D. Ellis, *Radiations from radioactive substances*, Cambridge University Press (2010).
- [2] M. P. Valderrama, E. R. Arriola, Two-potential formula and its application to proton-proton scattering, Physical Review C 80, (2009) 024001.
- [3] C. M. G. Lattes, H. Muirhead, G. P. S. Occhialini, C. F. Powell, Processes involving charged mesons, Nature 159 (1947) 694.
- [4] C. M. G. Lattes, G. P. Occhialini, C. F. Powell, Observations on the tracks of slow mesons in photographic emulsions, Nature 160 (1947) 486.
- [5] H. Yukawa, On the interaction of elementary particles. I, Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 17 (1935) 48.
- [6] M. Reed, B. Simon, Methods in Mathematical Physics, Vol. IV: Analysis of Operators, Academic Press (1978).
- [7] D. Belkic, A quantum theory of ionisation in fast collisions between ions and atomic systems, Journal of Physics B 11, (1978) 3529.

- [8] Z. Yuan, A. Boström, Y. Cai, Z. Cao, Analytical solution for calculating vibrations from twin circular tunnels, Soil Dynamics and Earthquake Engineering 117 (2019) 312.
- [9] I. K. Chatjigeorgiou, Three dimensional wave scattering by arrays of elliptical and circular cylinders, Ocean Engineering 38 (2011) 1480.
- [10] V. Twersky, Multiple scattering of radiation by an arbitrary planar configuration of parallel cylinders and by two parallel cylinders, Journal of Applied Physics 23 (1952) 407.
- [11] B. Liu, L. Fu, G. Yu, G. Chen, Quantitative Analysis of Near-Surface Seismological Complexity Based on the Generalized Lippmann– Schwinger Matrix Equation, Bulletin of the Seismological Society of America 108 (2017) 278.
- [12] Z. Yuan, A. Boström, Y. Cai, X. Pan, Z. Cao, L. Shi, The wave function method for calculation of vibrations from a twin tunnel in a multi-layered half-space, Soil Dynamics and Earthquake Engineering 125 (2019) 105716.
- [13] C. Li, L. Xu, L. Zhu, S. Zou, Q. Liu, Z. Wang, H. Chen, Concentrators for Water Waves, Phisical Review Letters 121, (2018) 104501.
- [14] B. A. Lippmann, J. Schwinger, Variational principles for scattering processes, Physical Review 79, (1950) 469.
- [15] G. W. Stewart, Fredholm, Hilbert, Schmidt: Three Fundamental Papers on Integral Equations Translated with commentary, (2011), http://www.umiacs.umd.edu/~stewart/FHS.pdf
- [16] S. G. Mikhlin, *Integral Equations*, Pergamon Press (1957).

- [17] D. Belkic, *Principles of quantum scattering theory*, CRC Press (2019).
- [18] T. R. Yang, M. M. Dvoynenko, A. V. Goncharenko, V. Z. Lozovski, An exact solution of the Lippmann–Schwinger equation in one dimension American Journal of Physics 71 (2003) 64.
- [19] P. A. M. Dirac, The principles of quantum mechanics, Oxford university press (1981).
- [20] L. Schwartz, *Théorie des distributions*, Hermann Paris (1966).
- [21] G. B. Folland, Fourier analysis and its applications, American Mathematical Soc. (2009).
- [22] A. C. Maioli, A. G. M. Schmidt, Exact solution to LS equation for a circular billiard, Journal of Mathematical Physics 59 (2018) 122102.
- [23] E. de Prunelé, Quantum circular billiards: further analytical results, Physica E 53, (2013) 59.
- [24] E. de Prunelé, Two-dimensional quantum scattering by non-isotropic interactions localized on a circle, applications to open billiards., Journal of Mathematical Physics 59, (2018) 102102.
- [25] E. de Prunelé, Solvable quantum mechanical model in two-dimensional space, Journal of Physics A: Mathematical and General 39, (2006) 12469.
- [26] A. Sommerfeld, Partial Differential Equations in Physics, Academic Press (1964).
- [27] G. N. Watson, A Treatise on the Theory of Bessel Functions, Cambridge Univ. Press (1995).

- [28] I. R. Lapidus, Quantum-mechanical scattering in two dimensions, American Journal of Physics 50 (1982) 45.
- [29] P. A. Maurone, T. K. Lim, More on two-dimensional scattering, American Journal of Physics 51 (1983) 856.
- [30] S. K. Adhikari, Quantum scattering in two dimensions, American Journal of Physics 54 (1986) 362.
- [31] A. Jeffrey, D. Zwillinger, Table of Integrals, Series, and Products, Elsevier Science (2007).
- [32] A. P. Prudnikov, Yu. A. Brychkov, O. I. Marichev, *Integrals and Series*, Vol.1, Gordon and Breach (1986).
- [33] M. G. E. da Luz, A. Lupu-Sax, E. J. Heller, Quantum scattering from arbitrary boundaries, Physical Review E 56 (1997) 2496.
- [34] E. N. Economou, Green's Functions in Quantum Physics, 2nd edition, Springer-Verglar (1983).
- [35] R. G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles, 2nd edition, Springer-Verlag (1982).
- [36] P. Roman, Advanced Quantum Theory, Addison-Wesley (1965).
- [37] A. S. Davydov, D. ter Haar, *Quantum Mechanics*, Ann Arbor: NEO Press (1973).
- [38] H. Waalkens, J. Wiersig, H. R. Dullin, R. Holger, *Elliptic quantum billiard*, Annals of Physics 260 (1997) 50.

- [39] A. J. S. Traiber, A. J. Fendrik, M. Bernath, Level crossings and commuting observables for the quantum elliptic billiard, Journal of Physics A 22 (1989) 365.
- [40] J. C. Gutiérrez-Vega, S. Chávez-Cerda, Sabino, R. M. Rodríguez-Dagnino, Probability distributions in classical and quantum elliptic billiards, Revista Mexicana de Física 47 (2001) 480.
- [41] H. Garcia-Gracia, J. C. Gutiérrez-Vega, Tunneling phenomena in the open elliptic quantum billiard Physical Review E 86 (2012) 016210-1.
- [42] M. van den Broek, F. M. Peeters, Confined states in two-dimensional flat elliptic quantum dots and elliptic quantum wires, Physica E 11, (2001) 345.
- [43] A. C. Maioli, A. G. M. Schmidt, Exact solution to the LS equation for an elliptical billiard, Physica E 111 (2019) 51.
- [44] P. M. Morse, H. Feshbach, Methods of Mathematical Physics, Vol. 2, McGraw-Hill (1953).
- [45] N. W. McLachlan, Theory and Application of Mathieu Functions, Oxford Clarendon Press (1947).
- [46] M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with formulas, graphs, and mathematical tables, National Bureau of Standards (1964).
- [47] F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, C. W. Clark, NIST Handbook of Mathematical Functions, Cambridge Univ. Press (2010).
- [48] J. Meixner, F. W. Schäfke, Mathieusche Funktionen und Sphaeroidfunctionen, Springer-Verlag (1954).

- [49] F. M. Arscott, *Periodic Differential Equations*, Pergamon Press (1964).
- [50] A. C. Maioli, A. G. M. Schmidt, Two-dimensional scattering by boundary-wall and linear potentials, Physica Scripta 95, (2019) 035227.
- [51] O. Vallée, M. Soares, Airy Functions and Application to Physics. Imperial College Press, (2004).
- [52] P. E. Falloon, P. C. Abbott, J. B. Wang, Theory and computation of spheroidal wavefunctions, Journal of Physics A 36, (2003) 5477.
- [53] J. Meixner, Klassifikation, Bezeichnung und Eigenschaften der Sphäroidfunktionen, Mathematische Nachrichten. 5, (1951) 1.
- [54] M. C. Li, Scattering by a Nonspherical Potential Journal of Mathematical Physics 12, (1971) 936.
- [55] S. Zhang, J. Jin, Computation of Special Functions, John Wiley & Sons (1996).
- [56] L.-W. Li, X.-K. Kang, M.-S. Leong, Spheroidal Wave Functions in Electromagnetic Theory, John Wiley & Sons (2002).
- [57] C. Flammer, Spheroidal Wave Functions, Stanford University Press (1957).
- [58] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi, *Higher Trans*cendental Functions, Vol. III, McGraw-Hill (1955).
- [59] F. M. Zanetti, E. Vicentini, M. G. E. da Luz, Eigenstates and scattering solutions for billiard problems: a boundary wall approach., Annals of Physics 323 (2008) 1644.

- [60] F. M. Zanetti, M. L. Lyra, F. B. F. de Moura, M. G. E. da Luz, Resonant scattering states in 2D nanostructured waveguides: a boundary wall approach. Journal of Physics B 42 (2009) 025402.
- [61] P. J. Davis, P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration, Academic Press, (1984).
- [62] T. Y. Wu, T. Ohmura, Quantum theory of scattering, Courier Corporation (2014).
- [63] B. H. Bransden, C. J. Joachain, Introduction to quantum mechanics, John Wiley & Sons (1989)