

7 Dispersión Cuántica

Este capítulo está dedicado al estudio de la teoría cuántica de la dispersión, una de las herramientas de mayor relevancia en la mecánica cuántica, ya que es a través de las colisiones elásticas e inelásticas entre partículas una de las pocas maneras que disponemos para tener información del micromundo. Igualmente, son las colisiones una ventana que nos permite mirar el mundo atómico y subatómico, constituyéndose de esta manera en una de las formas posibles de comprobar experimentalmente el modelo teórico de la mecánica cuántica.

En la práctica, las colisiones entre partículas ha sido el método experimental por excelencia utilizado por los físicos para obtener información sobre el micromundo. Vale la pena comenzar por mencionar que la visión que tenemos hoy en día de los átomos surgió de un experimento de colisiones entre núcleos de helio (partículas α) y una lámina de oro, en el hoy famoso experimento de Rutherford, llevado a cabo en 1909 en la Universidad de Manchester por Hans Geiger y Ernest Mardsen, en ese entonces estudiantes de Rutherford. De igual manera, es mediante los resultados experimentales obtenidos en los grandes colisionadores de partículas que se ha llegado al estado de conocimiento actual sobre los constituyentes fundamentales de la materia y sus interacciones fundamentales.

Vale la pena mencionar el impacto científico obtenido por los aceleradores lineales y circulares de partículas (ciclotrón, sincrociclotrón, sincrotrón, betatrón, etc.), y los colisionadores circulares de partículas. En la actualidad hay colisionadores circulares de electrones e^- contra positrones e^+ en varios países del mundo (USA, Rusia, China, Italia, Japón, etc.). El más energético de estos colisionadores ha sido el cono-

cido como LEP-I/LEP-II, experimentos que funcionaron hasta el año 2000 en el laboratorio CERN en la frontera entre Francia y Suiza, donde se hacía chocar electrones con positrones hasta energías de 114 GeV (114×10^9 electrón voltios) en el centro de masa. Funciona igualmente en Alemania (DESY) un colisionador de electrones y protones, al igual que en USA el llamado Tevatron en Fermilab (Chicago), el cual estudia las colisiones entre protones p^+ y antiprotones p^- a energías del orden de 1000 GeV. De especial relevancia hoy en día es el llamado LHC (por Large Hadron Collider), aparato ubicado en el CERN y que reemplazó al LEP, el que recién entró en funcionamiento en el 2009 y el cual estudia las colisiones protón-protón, a energías del orden de 5000 GeV (5 TeV) en un anillo circular de unos 27 kilómetros de circunferencia.

En este capítulo haremos dos aproximaciones teóricas al problema de las colisiones en mecánica cuántica: estudiaremos primero la solución a la ecuación integral de Schrödinger del problema de dispersión, lo que nos llevará a la expansión perturbativa de la teoría, dándonos de esta manera la conocida aproximación de Born; estudiaremos luego la llamada expansión en ondas parciales la cual está basada en la fórmula de Bahuer que es la expansión de una onda esférica en sus componentes angulares, o esféricos armónicos. Terminaremos el capítulo con la demostración de algunos teoremas generales. Nos limitaremos en este capítulo al problema de las dispersiones elásticas solamente.

7.1 Quincuagésimo segunda lección

En esta lección introduciremos el concepto de sección eficaz y los demás conceptos físicos necesarios para estudiar el problema físico de las colisiones en mecánica cuántica. Igualmente, convertiremos la ecuación diferencial de autovalores del Hamiltoniano (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) en una ecuación integral y propondremos soluciones perturbativas a este tipo de ecuaciones.

7.1.1 Dispersión por un potencial

Estudiaremos a continuación la dispersión de una partícula de masa m por un potencial $V(\vec{r})$ estático; es decir, independiente del tiempo. El problema directo a resolver es: conocido el potencial, predecir, mediante la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, el comportamiento de la partícula dispersada.

Un problema mucho más interesante en mecánica cuántica es el conocido como el problema inverso de la dispersión, en el cual se desconoce por completo la forma del potencial dispersor y mediante el conocimiento de las partículas incidentes y sus propiedades físicas (energía, momentum lineal, espín, etc.) y las medidas experimentales del comportamiento de las partículas dispersadas, tratar de obtener la máxima información posible sobre el potencial dispersor.

Función de onda

Para comenzar consideremos una partícula de masa m incidente, descrita por una función de onda ψ_i^0 , solución de partícula libre, la cual se mueve desde menos infinito hacia el origen del sistema de coordenadas, donde hay un centro dispersor de masa M y rango finito R_0 ($V(r > R_0) = 0$). Luego de la colisión, la partícula incidente será dispersada en una dirección cualquiera del espacio tridimensional. A una distancia r muy grande del centro dispersor, donde este ya no afecta las partículas presentes, se coloca un detector que cubre un elemento de ángulo sólido $d\Omega$, el cual medirá la probabilidad que la partícula sea dispersada en ese elemento de ángulo sólido, como lo muestra la figura (7.1.1)

Como puede verse de la figura, el vector de propagación de la partícula incidente nos define el eje z del sistema de referencia del problema y el sistema dispersado se debe tomar como una onda en coordenadas esféricas ($r\theta\phi$), con origen de estas coordenadas en el centro dispersor.

La función de ondas del sistema físico descrito por la figura (6.1) la podemos escribir entonces como la superposición de una onda plana

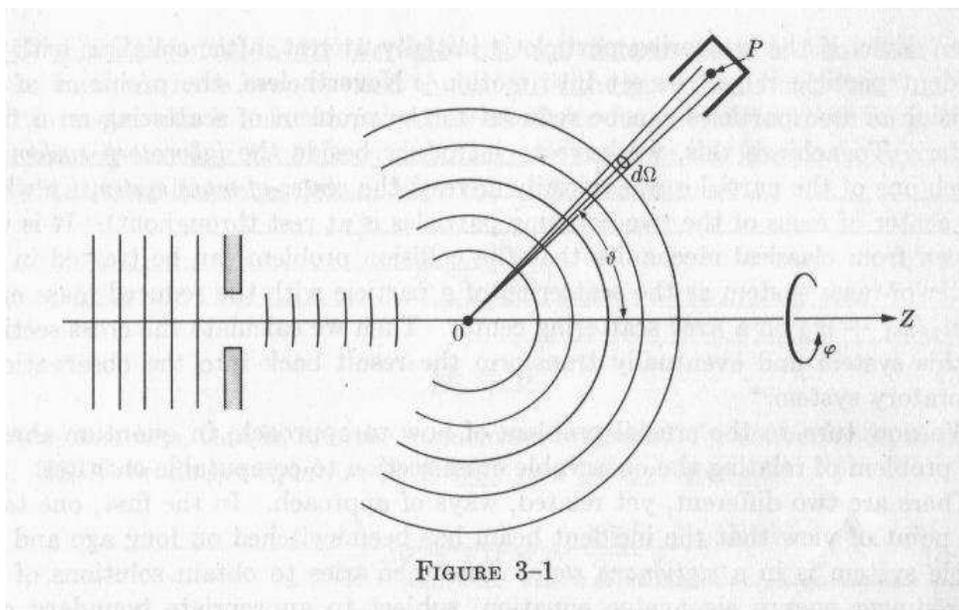


Figura 7.1: Dispersión cuántica en el sistema de laboratorio.

incidente y una onda esférica dispersada, de la forma

$$\psi(r, \theta, \phi) \approx e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (7.1)$$

$$\approx \psi_i^0(z) + \psi(r, \theta, \phi)^f \quad (7.2)$$

donde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ es el número de onda el cual, para $r \gg R_0$ es el mismo para la partícula incidente y para la partícula dispersada (la primera es una onda plana libre y la segunda es una onda esférica igualmente libre), la cual nos sirve para definir los vectores de onda $\vec{k}^i = \vec{u}_z k$ de la partícula incidente y $\vec{k}^f = \vec{u}_r k$ de la partícula dispersada en la dirección radial \vec{u}_r .

Que la función de onda $\psi(r, \theta, \phi)$ solución a la ecuación de Schrödinger para el problema de la dispersión es de la forma dada en la ecuación (7.1), es algo que debemos mostrar con detalle en el desarrollo matemático que nos ocupa en este capítulo.

El problema matemático es ahora el calcular las corrientes de probabilidad producidas por las ondas incidentes y dispersadas respectiva-

mente (la unidades físicas de una corriente de probabilidad son $T^{-1}L^{-2}$, corrientes de probabilidad que podemos interpretar como un flujo de partículas por unidad de tiempo y por unidad de área). La forma general del vector corriente de probabilidad \vec{J} para un sistema descrito por una función de onda $\Psi(\vec{r})$ es

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) - \Psi(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r})]. \quad (7.3)$$

Utilizando para la onda incidente $\psi_i^0(z) = e^{ikz}$ calculemos su corriente de probabilidad, la cual está dada por

$$J_z^i = \frac{\vec{u}_z \hbar}{2mi} [\psi_i^{0*}(z) \frac{d}{dz} \psi_i^0(z) - \psi_i^0(z) \frac{d}{dz} \psi_i^{0*}(z)] = \vec{u}_z \hbar k / m.$$

Haciendo uso ahora del vector gradiente en coordenadas esféricas

$$\vec{\nabla} = \vec{u}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{u}_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\vec{u}_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi},$$

podemos calcular la corriente radial de probabilidad asociada con la onda dispersada $\psi(r, \theta, \phi)^f \approx f(\theta, \phi) e^{ikr} / r$ saliendo en la dirección (θ, ϕ) , la cual estará dada por

$$\begin{aligned} J_r^f &= \frac{\vec{u}_r \hbar}{2mi} [\psi^{f*}(r, \theta, \phi) \frac{\partial}{\partial r} \psi^f(r, \theta, \phi) - \psi^f(r, \theta, \phi) \frac{\partial}{\partial r} \psi^{f*}(r, \theta, \phi)] \\ &= \frac{\vec{u}_r \hbar k}{mr^2} |f(\theta, \phi)|^2, \end{aligned}$$

(las componentes J_θ^f y J_ϕ^f son proporcionales a $1/r^3$ y por lo tanto despreciables en el límite en que r tiende a infinito, no siendo así necesarias en el desarrollo matemático que sigue).

Sección eficaz

Sea dn el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo en el ángulo sólido $d\Omega$ en la dirección polar (θ, ϕ) ; es decir $dn = \vec{J}^f \cdot d\vec{S} = \vec{J}^f \cdot \vec{u}_r r^2 d\Omega(\theta, \phi) = J_r^f r^2 d\Omega(\theta, \phi)$. Este número de partículas es obviamente proporcional al flujo de partículas incidentes por unidad de

área, por unidad de tiempo $|\vec{J}^i|$. A la constante de proporcionalidad entre esas dos cantidades es lo que llamaremos la sección eficaz diferencial $d\sigma(\theta, \phi)$. Es decir:

$$J_r^f r^2 d\Omega(\theta, \phi) = |\vec{J}^i| d\sigma(\theta, \phi) = dn, \quad (7.4)$$

de donde obtenemos que la sección eficaz diferencial está dada por la expresión

$$d\sigma(\theta, \phi) = \frac{r^2 J_r^f}{|\vec{J}^i|} d\Omega(\theta, \phi). \quad (7.5)$$

Nótese que las unidades de una sección eficaz son L^2 , y la sección eficaz total está dada por la integral sobre todo el ángulo sólido de la sección eficaz diferencial; es decir:

$$\sigma = \int d\sigma(\theta, \phi) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\theta d\theta \sin \theta \frac{r^2 J_r^f}{|\vec{J}^i|}. \quad (7.6)$$

Del álgebra anterior tenemos que, la sección eficaz diferencial para un sistema físico descrito por la función de onda $\psi(r, \theta, \phi)$ dada por la ecuación (7.1) será:

$$d\sigma(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2 d\Omega, \quad (7.7)$$

donde para calcularla debemos hallar primero $f(\theta, \phi)$.

Ecuación integral

La ecuación de autovalores del Hamiltoniano, también conocida como la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para el problema de una partícula de masa m que incide sobre un potencial dispersor $V(\vec{r})$ de masa M , es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (7.8)$$

donde μ es la masa reducida entre la partícula incidente y el centro dispersor, es decir

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M},$$

($\mu \approx m$ para el caso de un potencial dispersor fijo muy masivo). Asumiremos ahora que nuestro potencial dispersor tiene un alcance finito y que decrece más rápido que $1/|\vec{r}'|$ en el límite en que $|\vec{r}'| \rightarrow \infty$ (el potencial Coulombiano puro queda excluido de este tratamiento ya que no satisface este límite y por lo tanto requiere de un tratamiento especial en los problemas de dispersión en mecánica cuántica).

Definamos ahora las siguientes cantidades:

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad U(\vec{r}) = \frac{2\mu V(\vec{r})}{\hbar^2}.$$

Con estas definiciones y luego de algunos arreglos, la ecuación (7.8) nos queda de la siguiente manera:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (7.9)$$

Función de Green

Supongamos ahora que existe una función $G(\vec{r} - \vec{r}')$ la cual satisface

$$(\nabla_r^2 + k^2)G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \quad (7.10)$$

$[G(\vec{r} - \vec{r}')$ es llamada la función de Green del operador $(\nabla_r^2 + k^2)$]. Un álgebra simple nos permite ahora mostrar que una solución general a la ecuación (7.9) la podemos escribir como

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r})^0 + \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}'), \quad (7.11)$$

donde la función $\psi(\vec{r})^0$ es solución de partícula libre. Es decir, satisface $(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r})^0 = 0$. La demostración que $\psi(\vec{r})$ en (7.11) satisface (7.9) es muy simple y consiste en aplicar el operador $(\nabla_r^2 + k^2)$ sobre la función de onda $\psi(\vec{r})$, lo cual produce:

$$\begin{aligned} (\nabla_r^2 + k^2)\psi(\vec{r}) &= (\nabla_r^2 + k^2)\psi(\vec{r})^0 + (\nabla_r^2 + k^2) \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \\ &= \int d^3r' [(\nabla_r^2 + k^2)G(\vec{r} - \vec{r}')] U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \\ &= \int d^3r' \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') = U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

donde en el último paso se ha hecho uso de las propiedades de la distribución delta de Dirac. Como puede verse, el desarrollo anterior nos ha mostrado que la función $\psi(\vec{r})$ en (7.11) satisface la ecuación (7.9).

La función $\psi(\vec{r})$ en la igualdad (7.11) no es una solución a la ecuación (7.9) en el sentido estricto de la palabra, ya que la función $\psi(\vec{r})$ está presente en ambos lados de la expresión (7.11). Por el contrario, la ecuación (7.11) es una ecuación integral en la función $\psi(\vec{r})$, equivalente a la ecuación diferencial (7.9).

Una ecuación integral como la que aparece en (7.11) se le conoce en la literatura matemática como una ecuación de Volterra de segunda clase y la manera ordinaria de resolverlas es por el método de expansión perturbativa, como veremos a continuación.

Solución por series.

Para resolver la ecuación integral (7.11) se supone que tanto $\psi(\vec{r})^0$ como la función de Green $G(\vec{r} - \vec{r}')$ son conocidas, ambas funciones dadas por las condiciones de frontera del problema, como veremos en la próxima lección. Conocidas estas dos funciones, la solución en series de la ecuación integral procede por iteraciones repetidas de la función $\psi(\vec{r})$ del lado izquierdo, en el lado derecho, donde se supone que lo que se tiene es una serie en la perturbación $U(\vec{r})$ y se va a guardar términos en la serie hasta el orden que se desee. Utilizando la notación

$G_{\vec{r}\vec{r}'} \equiv G(\vec{r} - \vec{r}')$, tenemos:

$$\begin{aligned}
 \psi(\vec{r}) &= \psi(\vec{r})^0 + \int d^3 r' G_{\vec{r}\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \\
 &= \psi(\vec{r})^0 + \int d^3 r' G_{\vec{r}\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}')^0 \\
 &\quad + \int d^3 r' \int d^3 r'' G_{\vec{r}\vec{r}'} U(\vec{r}') G_{\vec{r}'\vec{r}''} U(\vec{r}'') \psi(\vec{r}'') \\
 &= \psi(\vec{r})^0 + \int d^3 r' G_{\vec{r}\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}')^0 \\
 &\quad + \int d^3 r' \int d^3 r'' G_{\vec{r}\vec{r}'} U(\vec{r}') G_{\vec{r}'\vec{r}''} U(\vec{r}'') \psi(\vec{r}'')^0 \\
 &\quad + \int d^3 r' \int d^3 r'' \int d^3 r''' G_{\vec{r}\vec{r}'} U(\vec{r}') G_{\vec{r}'\vec{r}''} U(\vec{r}'') G_{\vec{r}''\vec{r}'''} U(\vec{r}''') \psi(\vec{r}'''),
 \end{aligned}$$

donde en la última expresión el primer término representa el orden cero en la perturbación $U(\vec{r})$, el segundo es el primer orden en la perturbación, el tercero el segundo orden en la perturbación y así sucesivamente. Por ejemplo, el siguiente orden en la perturbación se obtendría al reemplazar $\psi(\vec{r}''')$ por $\psi(\vec{r}''')^0$ en la triple integral de la expresión anterior.

7.2 Quincuagésimo tercera lección

En esta lección calcularemos las funciones de Green del operador $(\nabla^2 + k^2)$ y hallaremos la función de onda para el sistema físico descrito en la figura (7.1.1), con las condiciones de frontera adecuadas.

7.2.1 Función de Green

Empecemos por suponer que de la función de Green $G_{\vec{x}\vec{y}}$ en tres dimensiones, existe su transformada de Fourier $g_{\vec{\kappa}\vec{y}}$ con respecto a la primera variable \vec{x} ; es decir

$$G_{\vec{x}\vec{y}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} g_{\vec{\kappa}\vec{y}} e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{x}} d^3 \kappa, \quad (7.12)$$

donde $\vec{\kappa} \cdot \vec{x} = \kappa_1 x_1 + \kappa_2 x_2 + \kappa_3 x_3$. Igualmente y como sabemos, la transformada de Fourier de la distribución delta de Dirac es

$$\delta^3(\vec{x} - \vec{y}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{\kappa} \cdot (\vec{x} - \vec{y})} d^3\kappa. \quad (7.13)$$

Reemplazando lo anterior en la ecuación diferencial (7.10) obtenemos

$$\begin{aligned} (\nabla_x^2 + k^2)G_{\vec{x}\vec{y}} &= \frac{(\nabla_x^2 + k^2)}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} g_{\vec{\kappa}\vec{y}} e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{x}} d^3\kappa \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} g_{\vec{\kappa}\vec{y}} [(\nabla_x^2 + k^2) e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{x}}] d^3\kappa \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} g_{\vec{\kappa}\vec{y}} [(-\kappa^2 + k^2) e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{x}}] d^3\kappa \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{\kappa} \cdot (\vec{x} - \vec{y})} d^3\kappa, \end{aligned}$$

expresión de la cual podemos obtener

$$g_{\vec{\kappa}\vec{y}} = \frac{e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{y}}}{(k^2 - \kappa^2)}, \quad (7.14)$$

la cual reemplazada en la ecuación (7.12) nos produce

$$G_{\vec{x}\vec{y}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\vec{\kappa} \cdot (\vec{x} - \vec{y})}}{(k^2 - \kappa^2)} d^3\kappa = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega_{\kappa} \kappa^2 d\kappa \frac{e^{i\vec{\kappa} \cdot (\vec{x} - \vec{y})}}{(k^2 - \kappa^2)}. \quad (7.15)$$

Integrales que debemos evaluar por varios métodos. Para comenzar definamos $\vec{w} = \vec{x} - \vec{y}$ como el eje polar de nuestra sistema coordenado, lo cual implica $\vec{\kappa} \cdot (\vec{x} - \vec{y}) = \vec{\kappa} \cdot \vec{w} = \kappa w \cos \theta_{\kappa}$, con $w = |\vec{x} - \vec{y}|$, obteniendo de esta manera

$$G_{\vec{x}\vec{y}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\kappa^2}{(k^2 - \kappa^2)} \int_0^{2\pi} d\phi_{\kappa} \int_0^{\pi} d\theta_{\kappa} \sin \theta_{\kappa} e^{i\kappa w \cos \theta_{\kappa}}.$$

La integral sobre $d\phi_{\kappa}$ es inmediata y dá 2π . Introduciendo ahora el cambio de variable $\eta = \cos \theta_{\kappa}$ el cual implica $d\eta = -\sin \theta_{\kappa} d\theta_{\kappa}$, la otra integral angular la podemos evaluar también, obteniendo

$$\int_0^{\pi} d\theta_{\kappa} \sin \theta_{\kappa} e^{i\kappa w \cos \theta_{\kappa}} = \int_{-1}^1 d\eta e^{i\kappa w \eta} = \left. \frac{e^{i\kappa w \eta}}{i\kappa w} \right]_{-1}^1 = \frac{e^{i\kappa w} - e^{-i\kappa w}}{i\kappa w},$$

quedando por evaluar la integral sobre κ , es decir, tenemos hasta aquí:

$$\begin{aligned} G_{\vec{x}\vec{y}} &= \frac{1}{iw(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \kappa \frac{e^{i\kappa w} - e^{-i\kappa w}}{(k^2 - \kappa^2)} = \frac{2}{iw(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \kappa \frac{e^{i\kappa w}}{(k^2 - \kappa^2)} \\ &= \frac{2}{iw(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \kappa \frac{e^{i\kappa w}}{(k - \kappa)(k + \kappa)}, \end{aligned} \quad (7.16)$$

donde las dos integrales exponenciales son iguales y se suman, lo cual puede verse luego del cambio de variable $\kappa = -\kappa$ en la integral con el exponencial negativo. La integral remanente no existe en el sentido estricto de la palabra ya que tiene dos polos, uno en $\kappa = k$ y el otro en $\kappa = -k$. Para obviar esta dificultad asumimos que κ es una variable compleja y procederemos a evaluar nuestra integral remanente por el método de polos, para lo cual partimos κ en su parte real y en su parte imaginaria, $\kappa = \kappa_R + i\kappa_I$, que tiene como consecuencia

$$e^{i\kappa w} = e^{i(\kappa_R + i\kappa_I)w} = e^{i\kappa_R w} e^{-\kappa_I w},$$

lo cual implica que debemos tomar $\kappa_I > 0$, es decir, cerrar el contorno en la integración por polos en el plano superior, ya que

$$\lim_{\kappa_I \rightarrow \infty} (e^{-\kappa_I w}) = 0,$$

de tal manera que el semicírculo imaginario de la integral no contribuya a la misma.

Para hacer la integral tenemos cinco maneras posibles de tomar el contorno cerrado en el plano superior complejo, tenemos entonces estrictamente hablando cinco funciones de Green las cuales tienen condiciones de frontera diferentes. En la figura (7.2.1) mostramos esos cinco contornos posibles y el nombre de la función de Green asociada con cada uno de esos contornos.

Utilizaremos enseguida el teorema de Cauchy de la variable compleja para los residuos, el cual afirma que para una variable compleja κ y $f(\kappa)$ una función de dicha variable, analítica en el punto κ_0 se cumple:

$$f(\kappa_0) = \frac{1}{2i\pi} \oint d\kappa \frac{f(\kappa)}{(\kappa - \kappa_0)}.$$

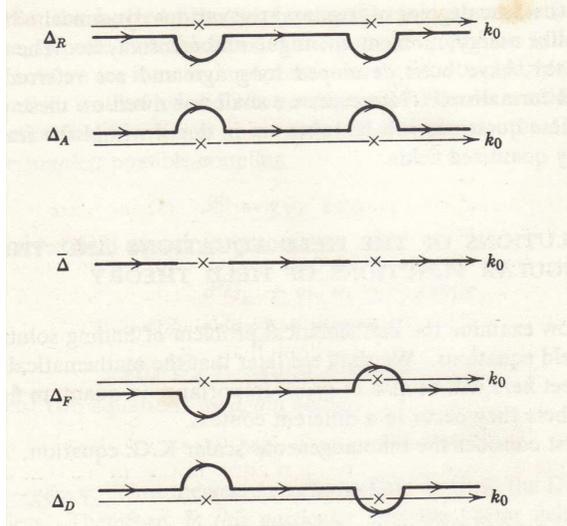


Figura 7.2: Trayectorias para calcular la función de Green.

Funciones de Green

Calculemos ahora la integral (7.16) para cada uno de los cinco contornos mostrados en la figura (7.2.1).

- Δ_D , con polo en $\kappa = k$ como lo muestra la figura.
 Nuestra función analítica en el polo es: $f(\kappa) = \kappa e^{i\kappa w} / (k + \kappa)$.
 El valor de la integral es

$$G_{\bar{x}\bar{y}}^+ = \frac{2}{iw(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \kappa \frac{e^{i\kappa w}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} = \frac{2}{i4w\pi^2} i\pi \frac{e^{ikw}}{2} = \frac{e^{ikw}}{4w\pi}. \quad (7.17)$$

- Δ_F , con polo en $\kappa = -k$ como lo muestra la figura.
 Nuestra función analítica en el polo es: $f(\kappa) = \kappa e^{i\kappa z} / (k - \kappa)$.
 El valor de la integral es

$$G_{\bar{x}\bar{y}}^- = \frac{2}{iw(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \kappa \frac{e^{i\kappa w}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} = \frac{2}{i4w\pi^2} i\pi \frac{e^{-ikw}}{2} = \frac{e^{-ikw}}{4w\pi}. \quad (7.18)$$

- Δ_A , sin inclusión de polos como puede verse de la figura.

$$G_{\vec{x}\vec{y}}^A = 0, \quad (7.19)$$

por el teorema de Cauchy, ya que la trayectoria tomada no incluye ningún polo.

- Δ_R , una trayectoria en la que se incluyen los dos polos. Es simple ver que esta función de Green esta relacionada a Δ_D y Δ_F de la siguiente manera: $\Delta_R = \Delta_D + \Delta_F$; es decir

$$G_{\vec{x}\vec{y}}^R = G_{\vec{x}\vec{y}}^+ + G_{\vec{x}\vec{y}}^- = \frac{e^{ikw} + e^{-ikw}}{4w\pi} = \frac{\cos kw}{2w\pi}. \quad (7.20)$$

- $\bar{\Delta}$, el llamado valor principal de Cauchy que de nuevo incluyen los dos polos. Es simple ver de nuevo que esta función de Green esta relacionada a Δ_D y Δ_F de la siguiente manera: $\bar{\Delta} = (\Delta_D + \Delta_F)/2$; es decir

$$G_{\vec{x}\vec{y}}^P = (G_{\vec{x}\vec{y}}^+ + G_{\vec{x}\vec{y}}^-)/2 = \frac{e^{ikw} + e^{-ikw}}{8w\pi} = \frac{\cos kw}{4w\pi}. \quad (7.21)$$

El significado físico de estas funciones de Green es el siguiente: $G_{\vec{x}\vec{y}}^+$ representa una onda explosiva, es decir, originándose en el origen y propagándose hacia el infinito. $G_{\vec{x}\vec{y}}^-$ representa una onda implosiva, es decir, originándose en el infinito y propagándose hacia el origen. $G_{\vec{x}\vec{y}}^P$ y $G_{\vec{x}\vec{y}}^R$ representan ondas estacionarias. Finalmente $G_{\vec{x}\vec{y}}^A$ es cero y no tiene significado físico.

Amplitud de dispersión $f(\theta\phi)$

Conocidas las funciones de Green, está claro que la función asociada al problema que nos ocupa es $G_{\vec{x}\vec{y}}^+$ la que representa una onda propagándose del origen hacia el infinito. Ahora, soluciones de partícula libre moviéndose en el eje z son: e^{ikz} , e^{-ikz} , $\cos kz$, y $\sin kz$. De nuevo, $\cos kz$, y $\sin kz$ representan ondas estacionarias, e^{ikz} representa una onda viajera plana moviéndose de menos infinito a más infinito y

e^{-ikz} representa igualmente una onda viajera plana, moviéndose desde más infinito hacia menos infinito. Esta claro pues que la función de onda en la ecuación (7.11), que representa el problema de la figura (7.1.1) es:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= \psi(\vec{r})^0 + \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \\ &= e^{ikz} + \int d^3r' G^+(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \\ &= e^{ikz} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}'),\end{aligned}\quad (7.22)$$

donde hemos normalizado $\psi(\vec{r})^0$ a uno, lo cual no es problema siempre y cuando normalicemos $\psi(\vec{r}')^0$ de la misma manera. Debemos ahora mostrar que la forma de la solución (7.22) es de la forma dada en la función (7.1). Lo anterior se puede ver inmediatamente si hacemos la expansión de $|\vec{r} - \vec{r}'|$ en potencias de $r = |\vec{r}'|$. Veamos:

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 - 2(\vec{r} \cdot \vec{r}') + r'^2} = r \left(1 - \frac{r' \cos \theta}{r} + \frac{r'^2}{r^2}\right)^{1/2}, \quad (7.23)$$

donde θ es el ángulo entre la variable de integración y la dirección radial \vec{u}_r del vector $\vec{k}^f = \vec{u}_r k$, dirección que se tomará como el eje azimutal en la integración de la variable d^3r' . Podemos escribir entonces

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - r' \cdot \vec{u}_r + \frac{\vec{u}_r \times r'}{2r} + \dots \quad (7.24)$$

Como el potencial $V(\vec{r})$ tiene rango finito, podemos despreciar los términos de orden $1/r$ en el exponencial; es decir

$$e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx e^{ik(r-r' \cdot \vec{u}_r)} \approx e^{ikr} e^{-ikr' \cdot \vec{u}_r} \approx e^{ikr} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'}$$

De manera similar podemos escribir en el denominador

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \approx (r - r' \cdot \vec{u}_r) \approx r(1 - r' \cdot \vec{u}_r / r) \approx r.$$

De esta manera la función de onda en (7.22) la podemos escribir como

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &\approx e^{ikz} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{ikr} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{r} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \\ &= e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \left[\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \right];\end{aligned}\quad (7.25)$$

de donde podemos leer inmediatamente

$$f(\theta\phi) = \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \langle \psi_k^0 | U | \psi_k^+ \rangle, \quad (7.26)$$

donde $\psi_k^0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ es una onda libre plana moviéndose en la dirección $\vec{k} = \vec{u}_r k$ y $\psi_k^+(\vec{r})$ es la función de onda total correspondiente al propagador G^+ en la ecuación (7.11).

El problema ahora es evaluar la integral en (7.26) ya que $d\sigma = |f(\theta\phi)|^2 d\Omega$.

7.3 Quincuagésimo cuarta lección

En esta lección estudiaremos la llamada aproximación de Born para el problema de la dispersión en mecánica cuántica y la aplicaremos a un problema físico de interes.

7.3.1 Aproximaciones de Born

Se quiere ahora evaluar la integral en (7.26), para lo cual es necesario conocer la función de onda $\psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r}')^+$, función asociada al propagador $G^+(\vec{r}, \vec{r}')$ la que podemos evaluar de manera perturbativa, utilizando parámetros de la energía potencial para hacer la expansión correspondiente.

Así pues, en orden cero en la perturbación nuestra función de onda la podemos tomar como $\psi(\vec{r}')^+ \approx \psi(\vec{r}')^0 = e^{ikz'}$, la cual reemplazamos en (7.22) para obtener la función de onda en primer orden en la perturbación la cual es

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r})^{(1)} &\approx e^{ikz} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') e^{ikz'} \\ &\approx e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \left[\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') e^{ikz'} \right], \end{aligned} \quad (7.27)$$

de donde podemos obtener en primer orden en la perturbación $U(\vec{r})$ la amplitud de dispersión

$$f(\theta\phi)^{(1)} \approx \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') e^{ikz'}. \quad (7.28)$$

Esta es la llamada primera aproximación de Born para la amplitud de dispersión. Conocida la forma del potencial, el problema se reduce a evaluar la integral en (7.28).

Iterar el procedimiento anterior nos daría otras aproximaciones, conocidas en la literatura como aproximaciones de Born de orden superior. Así pues, reemplazando $\psi(\vec{r})^{(1)}$ en (7.22) nos daría $\psi(\vec{r})^{(2)}$ y en general

$$\psi(\vec{r})^{(n)} \approx e^{ikz} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}')^{(n-1)}, \quad (7.29)$$

expresión de la que podemos obtener

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r})^{(2)} &\approx e^{ikz} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}')^{(1)} \\ &\approx e^{ikz} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') e^{ikz'} \\ &\quad + \frac{1}{16\pi^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \int d^3r'' \frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|} U(\vec{r}'') e^{ikz''} \\ &\approx e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta\phi)^{(2)}; \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de $\psi(\vec{r})^{(1)}$ en (7.27). Un álgebra simple nos muestra que

$$\begin{aligned} f(\theta\phi)^{(2)} &\approx \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-ikr'} U(\vec{r}') \left[e^{ikz'} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r'' \frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|} U(\vec{r}'') e^{ikz''} \right] \\ &\approx f(\theta\phi)^{(1)} + \frac{1}{16\pi^2} \int d^3r' \int d^3r'' e^{-ikr'} U(\vec{r}') \frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|} U(\vec{r}'') e^{ikz''} \end{aligned}$$

Hagamos ahora uso del vector número de onda incidente, el cual está dado por $\vec{k}^i = \vec{u}_z k = (0, 0, k)$ de tal manera que podamos escribir

la ecuación (7.28) como

$$f(\theta\phi)^{(1)} \approx \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{i(\vec{k}^i - \vec{k}) \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}'). \quad (7.30)$$

Definiendo ahora $\vec{K} = (\vec{k}^i - \vec{k})$ la ecuación (7.30) toma la forma

$$f(\theta\phi)^{(1)} \approx \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}'), \quad (7.31)$$

ecuación que nos muestra que la primera aproximación de Born no es más que la transformada de Fourier del potencial dispersor $U(\vec{r})$.

La primera aproximación de Born se simplifica considerablemente cuando estamos trabajando con un potencial central, es decir, cuando el potencial depende solo de la coordenada radial r y no de las variables angulares θ, ϕ en la figura (7.1.1); lo cual implica que $V(\vec{r}) = V(r)$. Como la mayoría de los problemas de interés prácticos corresponden a fuerzas centrales, vale la pena estudiar este caso en más detalle. Como para este caso $U(r')$ no depende de la dirección de integración en d^3r' , podemos hacer de manera parcial la integral en (7.31) de la siguiente manera: escogemos la dirección del vector \vec{K} como el eje polar en la integración d^3r' , lo cual implica

$$e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}'} = e^{iKr' \cos \Theta'} \quad \text{y} \quad d^3r' = r'^2 \sin \Theta' d\Theta' d\Phi'.$$

La integración sobre $d\Phi'$ da 2π y de nuevo definiendo una nueva variable de integración $\eta = Kr' \cos \Theta'$ con $d\eta = -Kr' \sin \Theta' d\Theta'$ podemos hacer de inmediato la integral sobre el ángulo azimutal y obtener

$$f(\theta\phi)^{(1)} \approx \frac{1}{K} \int_0^\infty dr' r' \sin(Kr') U(r'), \quad (7.32)$$

que como puede verse es independiente del ángulo ϕ definido en la figura (7.1.1). Igualmente, y para el caso de la dispersión elástica, la figura (7.1.1) nos dice que para el vector $\vec{k}^i = \vec{u}_z k$ y $\vec{k} = \vec{u}_r k$, se cumple que

$$\begin{aligned} K^2 &= \vec{K} \cdot \vec{K} = \vec{k}^i \cdot \vec{k}^i - 2\vec{k}^i \cdot \vec{k} + \vec{k} \cdot \vec{k} = k^2 - \vec{k}^i \cdot \vec{k} + k^2 = 2k^2(1 - \cos \theta) \\ &= 4k^2 \sin^2(\theta/2), \end{aligned} \quad (7.33)$$

de donde podemos obtener $K = 2k \sin(\theta/2)$, lo que nos da la dependencia angular en θ de la amplitud de dispersión $f(\theta)$, la cual para un potencial central es independiente del ángulo ϕ . Nótese que θ es el ángulo del haz saliente respecto al eje z de incidencia en el sistema de laboratorio, como se muestra en la figura (7.1.1).

7.3.2 Aplicación

Como aplicación de la primera aproximación de Born, consideremos la dispersión elástica de un electrón por un átomo neutro. Para este problema la energía potencial la podemos representar como un potencial central Coulombiano apantallado, de la forma

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-r/a},$$

potencial Coulombiano de un núcleo de número atómico Z cuando el radio r es pequeño, pero que decae exponencialmente cuando r es mayor que el radio a del átomo. Reemplazando este potencial en la expresión (7.32) nos da:

$$f(\theta\phi)^{(1)} \approx -\frac{2\mu Ze^2}{K\hbar^2} \int_0^\infty dr' \sin(Kr') e^{-r'/a} = -\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2(K^2 + a^{-2})}. \quad (7.34)$$

Nótese que

$$\begin{aligned} \lim_{a \rightarrow \infty} |f(\theta\phi)^{(1)}|^2 &\approx \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{4\mu^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 (K^2 + a^{-2})^2} \\ &= \frac{4\mu^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 K^4} \approx \frac{m_e^2 Z^2 e^4}{4\hbar^4 k^4 \sin^4(\theta/2)}, \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de la expresión (7.33) y del hecho que $\mu \approx m_e$ es la masa del electrón para este problema. Nótese que en este límite, la sección eficaz diferencial coincide con el resultado clásico de Rutherford.

Para calcular la sección eficaz total para este problema tenemos

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\Omega |f(\theta)^{(1)}|^2 = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |f(\theta)^{(1)}|^2 \\ &= \frac{4\mu^2 Z^2 e^4 \pi}{\hbar^4} \int_0^\pi d\theta \frac{\sin\theta}{(K^2 + a^{-2})^2}, \end{aligned} \quad (7.35)$$

integral que podemos evaluar haciendo el cambio de variable $\eta = 2k \sin(\theta/2)$ en cuyo caso $\sin \theta d\theta$ se reemplaza por $\eta d\eta/k^2$, obteniéndose de esta forma el valor

$$\sigma = \frac{16\pi\mu^2 Z^2 e^4 a^4}{\hbar^4(1 + 4k^2 a^2)}. \quad (7.36)$$

7.3.3 La matriz S

En mecánica cuántica se define la matriz S (o matriz de dispersión) como la proyección de la función de onda $\psi(\vec{r})$ en (7.22), o ecuación integral de Schrödinger, sobre una onda plana libre de número de onda \vec{k} , es decir, sobre $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Tenemos entonces:

$$\begin{aligned} S_{\vec{k}} &= \langle e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi(\vec{r}) \rangle = \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi(\vec{r}) \\ &= \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[e^{ikz} + \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \right], \end{aligned} \quad (7.37)$$

expresión teórica de mucha utilidad.

7.4 Quincuagésimo quinta lección

En las dos siguientes lecciones estudiaremos el método de expansión en ondas parciales y la teoría del corrimiento de fase, aplicados a la teoría de la dispersión cuántica.

7.4.1 Método de Ondas Parciales

Como vimos en la lección anterior, la primera aproximación de Born es una técnica muy conveniente para estudiar el problema de la dispersión cuántica, pero suele tener muchas limitaciones en la mayoría de las aplicaciones. Es entonces deseable mirar otras aproximaciones para manejar el problema, en especial cuando el sistema físico está caracterizado por un potencial central, es decir, depende solo de la distancia radial al origen, en cuyo caso la sección eficaz diferencial no depende del ángulo azimutal ϕ .

Introducción Matemática

Para el problema de un potencial central, la función de ondas, solución a la ecuación de Schrödinger puede escribirse como

$$\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi),$$

donde $Y_{lm}(\theta, \phi)$ son los esféricos armónicos. Si por algún motivo la función de onda no depende del ángulo ϕ (como es el caso del problema que nos ocupa), entonces la forma de la función se simplifica a

$$\psi(\vec{r}) = R(r)P_l(\cos \theta),$$

donde P_l son los polinomios de Legendre de orden l debidamente normalizados. La solución así dada representa una autofunción simultánea de la energía y el momentum angular para un valor de l de esta última magnitud física.

Utilizando el Laplaciano en coordenadas esféricas

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2},$$

y haciendo uso de la propiedad $L^2 P_l(\cos \theta) = l(l+1)\hbar^2 P_l(\cos \theta)$ tenemos que la ecuación radial toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R \right] + V(r)R = ER. \quad (7.38)$$

Definiendo de nuevo $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $U(r) = 2mV(r)/\hbar^2$ tenemos

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left(k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0. \quad (7.39)$$

Haciendo igual que antes $u_{l,k}(r) = rR(r)$ obtenemos que la función $u_{l,k}$ satisface la ecuación diferencial

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{l,k}(r) + \left(k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{l,k}(r) = 0, \quad (7.40)$$

donde los subíndices l y k están relacionados a valores del momentum angular y la energía respectivamente. Las condiciones de frontera para

la función $u_{l,k}(r)$ en el origen son $u_{l,k}(r=0) = 0$, función que podemos asumir real y que debemos normalizar de manera conveniente.

Para la región $r > a$ donde a es el rango del potencial, la ecuación diferencial anterior toma la forma

$$\frac{d^2}{dr^2}u_{l,k}(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_{l,k}(r) = 0, \quad r > a; \quad (7.41)$$

ecuación que está relacionada a la ecuación esférica de Bessel y que tiene por solución más general

$$u_{l,k}(r) = B_l r j_l(kr) + C_l r \eta_l(kr), \quad (7.42)$$

donde $j_l(kr)$ y $\eta_l(kr)$ son las funciones esféricas de Bessel y de Newman respectivamente, las cuales están definidas por

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &= (-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}, \\ \eta_l(\rho) &= -(-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Relacionadas con estas soluciones existen igualmente las funciones esféricas de Haenkel de primera y segunda clase dadas por

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &= j_l(\rho) + i\eta_l(\rho) = i(-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{e^{i\rho}}{\rho}, \\ h_l^{(2)}(\rho) &= j_l(\rho) - i\eta_l(\rho) = -i(-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{e^{-i\rho}}{\rho}. \end{aligned} \quad (7.44)$$

Es fácil ver que en el límite en que $\rho = kr$ tiende a infinito, las funciones esféricas de Bessel y de Newman satisfacen:

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\sim \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{l\pi}{2}), \\ \eta_l(kr) &\sim -\frac{1}{kr} \cos(kr - \frac{l\pi}{2}), \end{aligned} \quad (7.45)$$

las cuales reemplazadas en (7.42) nos producen en el límite $kr \gg 1$

$$\frac{u_{l,k}(r)}{r} \sim B_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - C_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr}, \quad (7.46)$$

la cual podemos escribir de manera conveniente como

$$\begin{aligned} \frac{u_{l,k}(r)}{r} &\sim A_l \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \\ &= \frac{A_l}{kr} [\sin(kr - l\pi/2) \cos \delta_l + \sin \delta_l \cos(kr - l\pi/2)], \end{aligned} \quad (7.47)$$

donde comparando esta expresión con la anterior tenemos que $B_l = A_l \sin \delta_l$ y $C_l = -A_l \cos \delta_l$. La constante de normalización A_l la podemos escoger igual a 1, lo cual implica una normalización de las funciones de onda $u_{l,k}(r)$ de la forma

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^2 dr |R_l(r)|^2 &= \int_0^\infty dr u_{l,k}(r) u_{l,k'}(r) \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dr \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \sin(k'r - l\pi/2 + \delta_l) \\ &= \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k'). \end{aligned}$$

Podemos entonces escribir la solución radial para el problema de la dispersión cuántica, en el límite $ka \gg 1$ como

$$R_{l,k}(r) \equiv \frac{u_{l,k}(r)}{r} \sim \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{r}, \quad (7.48)$$

donde la constante de integración δ_l es llamada el corrimiento de fase de la dispersión, nomenclatura que aclararemos en la siguiente sección.

Relación entre $U(r)$ y δ_l .

Necesitamos escribir a continuación una expresión matemática que nos relacione el potencial de dispersion $U(r)$ con el corrimiento de fase δ_l . Para ello comencemos por notar que de acuerdo con las ecuaciones (7.41) y (7.42), la función $rj_l(kr)$ satisface la ecuación diferencial

$$[rj_l(kr)]'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] [rj_l(kr)] = 0.$$

Multiplicando a izquierda esta ecuación por $u_{l,k}$ y restándola de la ecuación (7.40) multiplicada previamente a izquierda por $rj_l(kr)$, nos produce la relación

$$\begin{aligned} u_{l,k}[rj_l(kr)]'' - rj_l(kr)u_{l,k}'' &= \frac{d}{dr} \{u_{l,k}[rj_l(kr)]' - rj_l(kr)u_{l,k}'\} \\ &= -j_l U(r) r u_{l,k}. \end{aligned} \quad (7.49)$$

Integrando ahora esta expresión entre cero e infinito y haciendo uso del hecho que tanto $u_{l,k}$ como $j_l(kr)$ se anulan en $r = 0$, obtenemos la expresión

$$\begin{aligned} (rj_l(kr))' u_{l,k} - rj_l(kr) u_{l,k}' \Big|_0^\infty &= (rj_l(kr))' u_{l,k} - rj_l(kr) u_{l,k}' \Big|_0^\infty \\ &= \frac{k}{k^2} [\cos(kr - l\pi/2) \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \\ &\quad - \sin(kr - l\pi/2) \cos(kr - l\pi/2 + \delta_l)] \\ &= \frac{\sin \delta_l}{k} = - \int_0^\infty dr j_l U(r) r u_{l,k}, \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de las formas asintóticas de $rj_l(kr)$ en la primera de las ecuaciones en (7.45) y de $u_{l,k}(r)$ en (7.48). De la expresión anterior podemos concluir que

$$\sin \delta_l = -k \int_0^\infty dr r j_l(kr) U(r) u_{l,k}(r), \quad (7.50)$$

donde se puede notar que la dependencia de δ_l en el potencial proviene en parte del valor de $U(r)$ en la integral, pero también de la dependencia en el potencial que pueda tener la función $u_{l,k}(r)$.

7.5 Quincuagésimo sexta lección

Para proceder a la expansión en ondas parciales de nuestra función de onda $\psi(r)^+$ del electrón dispersado, haremos uso de dos fórmulas de expansión: la expansión en valores del momentum angular de la función de Green $G^+(\vec{r} - \vec{r}')$, y de la fórmula de Bauer la cual fué derivada en la primera parte de estas notas.

La fórmula de Bauer no es más que la expansión en ondas esféricas de partícula libre de la solución de onda plana de partícula libre en coordenadas cartesianas, la cual es:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta). \quad (7.51)$$

7.5.1 Expansión de $G^+(\vec{r} - \vec{r}')$

Similar a la fórmula de Bauer, podemos derivar la siguiente expansión para la función de Green $G^+(\vec{r} - \vec{r}')$:

$$\begin{aligned} G^+(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \\ &= \begin{cases} \frac{ik}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \Theta) j_l(kr') h_l^{(1)}(kr) & r > r' \\ \frac{ik}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \Theta) j_l(kr) h_l^{(1)}(kr') & r < r', \end{cases} \end{aligned} \quad (7.52)$$

donde $h_l^{(1)}$ son las funciones esféricas de Haenkel de primera clase, orden l definidas en la lección anterior y Θ es el ángulo entre los vectores \vec{r} y \vec{r}' .

7.5.2 Expansión de $\psi^+(\vec{r})$

Propongamos ahora para la función de ondas $\psi^+(\vec{r})$ solución al problema de la dispersión, la siguiente expansión en valores del momentum angular l :

$$\psi^+(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{u_{l,k}}{r}, \quad (7.53)$$

donde los a_l son coeficientes de expansión que vamos a determinar a continuación, para lo cual, en lugar de la expansión exacta en (7.53) tomaremos la forma asintótica de la función radial $u_{l,k}(r)$ dada en (7.48); es decir usaremos $u_{l,k}(r) \sim \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$, con lo cual tenemos

$$\psi^+(\vec{r}) \approx \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}. \quad (7.54)$$

De igual manera, usaremos la siguiente forma asintótica para la expansión de Bauer:

$$e^{ikz} \approx e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr}. \quad (7.55)$$

Reemplazando ahora las expansiones (7.55), (7.52) y (7.54) en (7.22), es decir en la expresión

$$\psi(\vec{r})^+ = e^{ikz} + \int d^3r' G^+(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}'),$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \psi^+(\vec{r}) &\approx \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \\ &\approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta), \end{aligned}$$

donde la amplitud de dispersión está dada por la expresión (7.26). De esta manera podemos escribir

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \int dr' d\Omega' e^{-ikr' \cos \Theta} U(r') a_l P_l(\cos \theta') u_{l,k}(r') r'.$$

Para hacer la integración angular utilicemos la fórmula de Bauer para el exponencial de la siguiente manera

$$e^{-ikr' \cos \Theta} = \sum_{l'=0}^{\infty} \frac{1}{i^{l'}} (2l'+1) j_{l'}(kr') P_{l'}(\cos \Theta).$$

La integración que debemos hacer ahora es

$$I = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta' d\theta' d\phi' P_{l'}(\cos \Theta) P_l(\cos \theta'),$$

integral que podemos evaluar haciendo uso del teorema de adición de los momentos angulares

$$P_l(\cos \Theta) = \frac{4\pi}{(2l' + 1)} \sum_{m=-l'}^{+l'} Y_{l'm}^*(\theta' \phi') Y_{l'm}(\theta \phi),$$

donde el significado de los ángulos es el siguiente: Θ es el ángulo entre las direcciones \vec{r} y \vec{r}' , θ y θ' son los ángulos polares de \vec{r} y \vec{r}' respectivamente y ϕ y ϕ' son los ángulos polares de \vec{r} y \vec{r}' respectivamente. Utilizando ahora el hecho que

$$P_l(\cos \theta') = \sqrt{\frac{4\pi}{2l + 1}} Y_{l0}(\theta', \phi'),$$

y haciendo uso de la ortonormalidad de los esféricos armónicos, obtenemos finalmente

$$I = \frac{4\pi}{(2l' + 1)} \sqrt{\frac{4\pi}{2l + 1}} Y_{l',0}(\theta, \phi) \delta_{ll'} = \frac{4\pi}{2l' + 1} P_{l'}(\cos \theta) \delta_{ll'}, \quad (7.56)$$

expresión que nos produce

$$f(\theta) = - \sum_{l=0}^{\infty} a_l \frac{1}{i^l} P_l(\cos \theta) \int_0^{\infty} r' dr' j_l(kr') U(r') u_{l,k}(r'), \quad (7.57)$$

lo cual, haciendo uso de la expresión (7.50) nos conduce finalmente a la expresión

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \frac{1}{i^l} P_l(\cos \theta) \frac{\sin \delta_l}{k}. \quad (7.58)$$

Colocando todo esto en la expresión para $\psi^+(\vec{r})$, escribiendo las funciones seno en términos de funciones exponenciales complejas y comparando los coeficientes de la expresión $[e^{ikr}/(r)] P_l(\cos \theta)$, obtenemos finalmente

$$a_l \frac{1}{2i^{l+1}} e^{i\delta_l} = \frac{2l + 1}{2i} + a_l \frac{1}{i^l} \sin \delta_l,$$

expresión esta última que tiene por solución

$$a_l = i^l (2l + 1) e^{i\delta_l}. \quad (7.59)$$

Haciendo uso de este resultado podemos escribir nuestra expansión de la función de ondas en (7.54) como

$$\psi^+(\vec{r}) \approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) e^{i\delta_l} P_l(\cos\theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}. \quad (7.60)$$

Este mismo valor para a_l reemplazado en la ecuación (7.58) nos permite obtener la amplitud de dispersión en su forma final como

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} P_l(\cos\theta) \sin\delta_l. \quad (7.61)$$

Esta última expresión es la fórmula central del método de expansión en ondas parciales ya que ella nos permite calcular la sección eficaz diferencial (y de ella la sección eficaz total) una vez que conozcamos el corrimiento de fase δ_l el cual está relacionado a la forma del potencial mediante la expresión (7.50).

7.5.3 Cálculo de la sección eficaz

La idea ahora es suponer que la sumatoria en (7.61) converge, para lo cual es necesario que los primeros términos dominen sobre los restantes. Comencemos por considerar que solamente la dispersión de las ondas S ($l = 0$) es importante. En este caso solo es necesario tener en cuenta el primer término con $l = 0$ en la sumatoria en (7.61). Debido a que $P_0(\cos\theta) = 1$, entonces tenemos que

$$f^s(\theta) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin\delta_0, \quad (7.62)$$

lo que nos permite hallar la sección eficaz diferencial

$$\sigma^s(\theta) = |f^s(\theta)|^2 = \frac{\sin^2\delta_0}{k^2}, \quad (7.63)$$

la cual es independiente del ángulo θ . En otras palabras, la dispersión de las ondas S se caracteriza por ser isotrópica.

Para el caso en que tanto las ondas S como las P ($l = 1$) contribuyan de manera apreciable se tiene de acuerdo con (7.61) que

$$f^{s+p}(\theta) = \frac{1}{k} [e^{i\delta_0} \sin \delta_0 + 3e^{i\delta_1} \sin \delta_1 \cos \theta,] \quad (7.64)$$

de la cual podemos obtener

$$\sigma^{s+p}(\theta) = \frac{1}{k^2} (A + B \cos \theta + C \cos^2 \theta), \quad (7.65)$$

donde $A = \sin^2 \delta_0$, $B = 6 \cos(\delta_0 - \delta_1) \sin \delta_0 \sin \delta_1$ y $C = 9 \sin^2 \delta_1$. Como la convergencia de la sumatoria en (7.61) requiere que $\delta_1 \ll \delta_0$, entonces la distribución angular anterior está dominada por los dos primeros términos A y B .

7.5.4 Sección eficaz total

De la expresión (7.61) podemos obtener la sección eficaz diferencial la cual está dada por

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} P_l(\cos \theta) \sin \delta_l \right|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta). \end{aligned}$$

Ahora, para hallar la sección eficaz total $\sigma = 2\pi \int d\theta \sigma(\theta) \sin \theta$ usamos la propiedad de ortogonalidad de los polinomios de Legendre la cual nos dice que

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{2}{(2l+1)} \delta_{ll'},$$

lo cual combinado con la expresión anterior nos da como resultado final que

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma^l. \quad (7.66)$$

De esta expresión podemos ver que cada onda parcial contribuye de manera incoherente con un valor máximo dado por

$$\sigma_{max}^l = \frac{4\pi}{k^2}(2l + 1) \quad (7.67)$$

7.5.5 Teorema Óptico

Se conoce con este nombre a la relación que hay entre la sección eficaz total y la amplitud de dispersión en la dirección de incidencia. Para hallar la relación comencemos por tomar el valor $\theta = 0$ en la expresión (7.61) y hacer uso del hecho que $P_l(0) = 1$. Tenemos entonces que

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

Tomando la parte imaginaria de esta expresión se obtiene

$$\text{Im}.f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \sin^2 \delta_l,$$

lo cual comparado con la expresión (7.66) nos permite escribir el resultado simple pero importantísimo

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k} \text{Im}.f(0), \quad (7.68)$$

conocido en la literatura como el teorema óptico para la sección eficaz total, llamado así debido a la similitud que tiene con la relación que hay en óptica entre la parte imaginaria del índice de refracción y el coeficiente de absorción.

