Física de Partículas

FISI-3152 (Andrés Reyes) - Tarea 1 - 22.01.2020

El objetivo de esta tarea es desarrollar, de la forma más rápida posible, ciertas herramientas que nos permitan entender cómo se calcula una sección transversal, en el contexto cuántico no relativista. A lo largo del documento usted encontrará ejercicios numerados, que deben ser resueltos. Estas notas, así como sus respectivos ejercicios, hacen uso del enfoque (y de la notación) del capítulo *Scattering of Particles by Potentials* del libro *Quantum Physics* de Scheck.

Referencias:

- Scheck, F. *Quantum Physics*. Springer Verlag (2007, 2013).
- Arfken, G.B. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press (2005).
- Téllez, G. *Métodos Matemáticos*. Ediciones Uniandes (2005).

1 Expansión de una onda plana en ondas esféricas.

Comenzaremos por estudiar algunas de las propiedades básicas de las ondas esféricas. Consideremos una onda plana de la forma $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$, donde $\boldsymbol{x}$ denota un vector de posición con componentes x_1, x_2 y x_3. Nos interesa obtener una descomposición de esta onda plana en lo que se conoce bajo el nombre de "ondas parciales". Esta descomposición se obtiene al expresar la onda plana como una combinación lineal de funciones con "simetría esférica". Es de esperarse entonces que, al expresar el vector $\boldsymbol{x}$ en coordenadas esféricas, esta descomposición esté dada en términos de armónicos esféricos (para la parte angular: (θ, φ)) y de las funciones de Bessel esféricas (para la parte radial: r).

Para justificar la afirmación anterior, comenzaremos por estudiar la siguiente ecuación diferencial (en 3 dimensiones espaciales):

$$\Delta\psi + \psi = 0, \tag{1}$$

donde Δ denota el Laplaciano:

$$\Delta = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial x_3}\right)^2.$$

Usando el método de separación de variables, propondremos una solución de la forma $\psi(r,\theta,\varphi) = Y(\theta,\varphi)f(r)$. Para esto es conveniente recordar que el Laplaciano en coordenadas esféricas toma la forma

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \Delta_{S^2}\right], \tag{2}$$

con Δ_{S^2} el Laplaciano sobre la esfera unitaria. Insertando el ansatz $\psi(r,\theta,\varphi) = f(r)Y(\theta,\varphi)$ en (1) obtenemos, tras agrupar los términos radiales a un lado y los angulares al otro,

$$\frac{(r^2 f')'}{f} + r^2 = -\frac{\Delta_{S^2}Y}{Y}. \tag{3}$$

Como el término de la izquierda es independiente de θ y φ, mientras que el de la derecha es independiente de r, ambos términos tienen que ser iguales a una constante, digamos λ.

Una base para el conjunto de aquellas funciones sobre la esfera que son vectores propios del operador $-\Delta_{S^2}$ está dada por los armónicos esféricos $Y_{\ell m}$ $(-\ell \le m \le \ell)$, de tal manera que la constante λ necesariamente tendrá que ser de la forma $\lambda = \ell(\ell+1)$. Esto nos lleva a las siguientes dos ecuaciones:

$$-\Delta_{S^2}Y = \ell(\ell+1)Y, \tag{4}$$

$$(r^2 f')' + (r^2 - \ell(\ell+1))f = 0. \tag{5}$$

Observaciones:

- Si adoptamos la convención de que a una solución de la ecuación (4) con valor propio igual a $n(n+1)$ la llamamos *función esférica de grado n* entonces, escribiendo Y_n para una tal función, vemos que $Y_{\ell m}$ es una función esférica de grado $n = \ell$ y a la vez de grado $n = -(\ell+1)$, ya que $Y_{\ell m}$ es solución de (4) con valor propio

  $$\ell(\ell+1) \equiv (-(\ell+1))\cdot(-(\ell+1)+1).$$

  Concluimos, por lo tanto, que toda función esférica de grado n es una combinación lineal de armónicos esféricos $Y_{l,m}$, donde sólo entran valores de l tales que $l(l+1) = n(n+1)$.

- La ecuación (5) toma una forma más familiar al considerar la transformación $w(r) \equiv \sqrt{r}f(r)$:

  $$w'' + \frac{1}{r}w' + \left(1 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}\right)w = 0. \tag{6}$$

  Esta es la ecuación diferencial de Bessel, con índice *semi-entero* $\nu = l + 1/2$. Es posible mostrar que, para ν no entero, las funciones J_ν y $J_{-\nu}$ son soluciones linealmente independientes de (6) y que, de hecho, estas forman un sistema fundamental para dicha ecuación. Recordemos la definición general de la función de Bessel $J_\nu(z)$:

$$J_\nu(z) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (z/2)^{2k+\nu}}{k!\Gamma(\nu+k+1)}. \tag{7}$$

Pasando de w a f, y en vista de la definición de las funciones de Bessel esféricas,

$$j_n(x) := \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x), \tag{8}$$

llegamos a la conclusión de que $j_l(r)$ y $j_{-(l+1)}(r)$ forman un sistema fundamental de soluciones para la ecuación (5). De la solución de la ecuación para la parte esférica sabemos que ℓ toma valores enteros no negativos: $\ell = 0, 1, 2, \ldots$

Lo anterior nos permite afirmar que, si n es un *entero*, Y_n una función esférica de grado n y j_n la función de Bessel esférica correspondiente, entonces la función $\psi(r, \theta, \varphi) := j_n(r) Y_n(\theta, \varphi)$ es una solución (en $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$) de la ecuación $\triangle\psi + \psi = 0$. Dejando de lado el asunto de la convergencia, podemos afirmar también que una serie de la forma $\sum_n j_n(r) Y_n(\theta, \varphi)$ es solución de la misma ecuación. Más aún, en el sentido opuesto:

> Si ψ es una solución de la ec. (1) en todo $\mathbb{R}^3$, entonces ψ puede desarrollarse en una serie de la forma:
>
> $$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} j_n(r) Y_n(\theta, \varphi). \tag{9}$$

La razón por la cual en (9) solo aparecen valores positivos de n es porque, para n negativo, las funciones de Bessel $j_n(r)$ son singulares en el origen. Con la discusión que hemos dado hasta el momento, el resultado contenido en (9) debe parecer al menos plausible, y lo asumiremos como cierto de ahora en adelante.

Retornemos ahora al problema de las ondas planas. En primer lugar, notemos que la función $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ es solución de la siguiente ecuación (conocida como la ecuación Helmoltz),

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0, \tag{10}$$

si tomamos la constante k como $\|\boldsymbol{k}\|$. Esto nos lleva a la idea de que debe ser posible expresar la función $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ en la forma (9), si reemplazamos ahí $j_n(r)$ por $j_n(kr)$. A continuación detallamos los pasos a seguir para encontrar la forma explícita de dicha expansión.

Comencemos por considerar la situación particular $\boldsymbol{k} = (0, 0, k)$, de tal forma que $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = e^{ikx_3}$ ($k \in \mathbb{R}$). En coordenadas esféricas tenemos $x_3 = r\cos\theta$ así que, haciendo uso de lo discutido hasta ahora, sabemos que debe existir una expansión de la forma

$$e^{ikx_3} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{n=0}^{\infty} j_n(r) Y_n(\theta, \varphi). \tag{11}$$

Las funciones esféricas que aparecen en esta expansión deben ser múltiplos de los armónicos esféricos y, dado que solo aparecen valores no negativos de n, este índice puede ser tomado como el número cuántico orbital ℓ asociado a los armónicos esféricos $Y_{\ell m}$. Además, dado que el lado izquierdo no depende del ángulo azimutal, el número cuántico m debe ser cero para todos los armónicos. Debemos, por lo tanto, tener una expansión de la forma

$$e^{ikx_3} = \sum_{l=0}^{\infty} c_\ell j_\ell(kr) Y_{\ell,0}(\theta, \varphi), \tag{12}$$

donde los c_ℓ son coeficientes a ser determinados.

Ejercicio 1. *Definiendo $C_\ell(r) := c_\ell j_\ell(kr)$, muestre que $C_\ell(r)$ se puede expresar de la siguiente forma:*

$$C_l(r) = 2\pi\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int_{-1}^{1} P_\ell(x) e^{ikrx} dx, \tag{13}$$

con $P_\ell(x)$ el polinomio de Legendre de grado ℓ.

Ejercicio 2. *Multiplique y divida la expresión para $C_\ell(r)$ obtenida en el ejercicio anterior por el factor ikr, e integre por partes. Repita este procedimiento con la integral que obtuvo al integrar por partes. De esta forma, usted se dará cuenta que es posible obtener una fórmula para el comportamiento asintótico de $C_\ell(r)$ para $r \gg 1$. Muestre que*

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(x) e^{ikrx} dx = \frac{i^\ell}{ikr}\left(e^{i(kr-\pi\ell/2)} - e^{-i(kr-\pi\ell/2)}\right) P_\ell(1) + o((kr)^{-2}) \tag{14}$$

y haga uso de este resultado para obtener una fórmula explícita para los coeficientes c_ℓ.

Ejercicio 3. *Asumiendo la validez de la expansión (12), muestre que*

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell j_\ell(kr) \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y^*_{\ell,m}(\theta_k, \varphi_k) Y_{\ell,m}(\theta_x, \varphi_x). \tag{15}$$

- *Notación: (k, θ_k, φ_k) = coordenadas polares de $\boldsymbol{k}$, (r, θ_x, φ_x) = coordenadas polares de $\boldsymbol{x}$.*
- *Ayuda: eje z a lo largo de $\boldsymbol{k}$ y usar el teorema de adición.*

Los cálculos anteriores son, en principio, suficientes para establecer la validez de la fórmula (12) (y por lo tanto de la (15)), si se usa un argumento de unicidad. Otra forma de obtener (15) es usando funciones de Green (ver Arfken). Para convencernos de que la fórmula es en realidad válida, consideremos la siguiente derivación alternativa.

Ejercicio 4. *Usando la fórmula de Rodrigues e integración por partes, muestre que*

$$\int_{-1}^{1} x^{\ell} P_{\ell}(x) dx = \frac{2^{\ell+1}(\ell!)^2}{(2\ell+1)!}. \tag{16}$$

Ejercicio 5. *Considere ahora una expansión de la forma*

$$e^{ikr\cos\gamma} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos\gamma), \tag{17}$$

donde γ es el ángulo formado por $\boldsymbol{k}$ y $\boldsymbol{x}$, de tal forma que se tiene

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} = kr\cos\gamma.$$

Usando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre, muestre que ($\alpha \equiv kr$):

$$a_{\ell} j_{\ell}(\alpha) = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^{1} e^{i\alpha x} P_{\ell}(x) dx. \tag{18}$$

Derive la expresión anterior ℓ-veces y evalúe el resultado en $\alpha = 0$. Usted debe obtener la siguiente relación:

$$a_{\ell} j_{\ell}^{(\ell)}(0) = \frac{2\ell+1}{2} (i)^{\ell} \frac{2^{\ell+1}(\ell!)^2}{(2\ell+1)!}.$$

Obtenga, haciendo uso de la forma asintótica para j_{ℓ}, una fórmula explícita para a_{ℓ}. Muestre además que el resultado es consistente con el obtenido previamente para c_{ℓ}.

2 Scattering en potenciales centrales

Recordemos que, asociada a la función de onda $\psi(t, \boldsymbol{x})$ de una partícula cuántica *no relativista*, tenemos lo que se conoce como corriente de probabilidad:

$$\boldsymbol{j}(t, \boldsymbol{x}) := \frac{\hbar}{2mi}(\psi^{*}\boldsymbol{\nabla}\psi - (\boldsymbol{\nabla}\psi^{*})\psi).$$

Si S es una superfice (orientada), entonces la probabilidad, por unidad de tiempo, de que la partícula atraviese la superfice S está dada por

$$\int_S \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{n}\, dS.$$

(El signo de la integral determina el sentido en que la superficie es atravesada, de acuerdo a la orientación). Supongamos ahora que tenemos un flujo homogéneo de partículas incidiendo sobre una región en la que actúa un potencial (que asumiremos central). El flujo incidente se verá afectado por la presencia del potencial y será dispersado. Lo que se mide en los experimentos es justamente la razón entre el flujo dispersado en un ángulo determinado y el flujo incidente. Suponiendo que el potencial está centrado en el origen, el flujo de partículas dispersadas en la dirección radial que atraviesan la región determinada por un cono (centrado en el orígen) con ángulo (sólido) de apertura $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ es:

$$\boldsymbol{j}_{\text{out}} \cdot \boldsymbol{e_r} r^2 d\Omega.$$

Ejercicio 6. *Asuma que la función de onda de la partícula incidente es una onda plana, de la forma $\psi_{\text{in}} = e^{ikx_3}$ y que la función de onda dispersada es de la forma $\psi_{\text{out}} = f(k,\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$.*

- *Muestre que $\boldsymbol{j}_{\text{in}} = \frac{\hbar k}{m}\boldsymbol{e_3}$ y que, para valores suficientemente grandes de r, se tiene: $\boldsymbol{j}_{\text{out}} \sim \frac{\hbar k}{m}\frac{|f(k,\theta)|^2}{r^2}\boldsymbol{e_r}$ (solo la componente radial).*
- *Muestre que la sección eficaz diferencial ($d\sigma$) está dada por:*

$$d\sigma \overset{\text{def}}{=} \frac{\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{e_r} r^2 d\Omega}{\|\boldsymbol{j}_{\text{in}}\|} = |f(k,\theta)|^2 d\Omega. \tag{19}$$

Debido a que la función f no depende del ángulo azimutal, podemos entonces proponer una expansión de la forma

$$f(k,\theta) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)a_\ell(k)P_\ell(\cos\theta). \tag{20}$$

Los coeficientes $a_\ell(k)$ se denominan *amplitudes de onda parcial*. Recordemos que la sección eficaz total se define como

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega. \tag{21}$$

Partiendo de (19) y haciendo uso de (20), así como de la ortogonalidad de los armónicos esféricos (recordemos que $Y_{\ell,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{(2\ell+1)/(4\pi)}P_\ell(\cos\theta)$), es fácil mostrar que la sección eficaz total se puede expresar completamente en términos de las amplitudes de onda parcial, de la siguiente forma:

$$\sigma \equiv \sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)|a_\ell(k)|^2. \tag{22}$$

Vemos entonces que para obtener la sección eficaz usando análisis de ondas parciales es necesario calcular las amplitudes $a_\ell(k)$. Estas dependerán, por supesto, del potencial $U(r)$. Para encontrar las amplitudes parciales es necesario considerar la solución de la ecuación de Schrödinger que corresponde a este potencial:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(r)\psi = E\psi. \tag{23}$$

Usando el método de separación de variables, con

$$\psi(r,\theta,\varphi) = (u(r)/r)Y(\theta,\varphi),$$

se obtienen dos ecuaciones. La ecuación angular nos lleva a los armónicos esféricos (de tal forma que $Y = Y_{\ell m}$), mientras que la ecuación radial (la que satisface $u \equiv u_\ell$) toma la siguiente forma:

$$u_\ell''(r) - \left(\frac{2m}{\hbar^2}U_{\text{ef}}(r) - k^2\right)u_\ell(r) = 0, \tag{24}$$

donde U_{ef}, el potencial efectivo, está definido como

$$U_{\text{ef}}(r) := \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + U(r). \tag{25}$$

El primer término -potencial centrífugo- sale de la parte angular del Laplaciano. Por otro lado, para la energía tomaremos el valor $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$, ya que estamos buscamos soluciones con energía positiva y estamos considerando solamente el caso de dispersión elástica.

Para potenciales de rango finito, caracterizados por la condición

$$\lim_{r\to\infty} rU(r) = 0, \tag{26}$$

la ecuación radial toma la siguiente forma, para r suficientemente grande (forma asintótica):

$$u_\ell''(r) + k^2u_\ell(r) \sim 0.$$

El comportamiento asintótico de las soluciones es, por lo tanto, de la forma

$$u_\ell(r) \sim \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell(k)\right). \tag{27}$$

Adoptaremos la convención de que la fase de u_ℓ se escoge de tal forma que el término δ_ℓ, definido a través de la ecuación anterior, sea cero cuando $U(r)$ es cero.

Ejercicio 7. *Haciendo uso de la ecuación radial, muestre que las fases de scattering (δ_ℓ) se pueden escribir en términos del potencial, de la siguiente forma:*

$$\sin\delta_\ell = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty rU(r)u_\ell(r)j_\ell(kr)dr. \tag{28}$$

El ejercicio anterior nos muestre que para calcular la sección eficaz correspondiente a un potencial dado $U(r)$, todo lo que nos falta es saber cómo expresar a_ℓ en términos de δ_ℓ. A continuación indicamos cómo hacer esto.

Para comenzar, recordemos que estamos buscando soluciones de la ecuación de Schrödinger de la forma

$$\psi_{\text{Somm}}(\boldsymbol{x}) \sim e^{ikx_3} + f(k,\theta)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{29}$$

Proponer una solución de esta forma tiene una razón que es justificable intuitivamente: la onda que describe al electrón se compone de una onda plana -que describe el flujo de partículas incidente- y una onda esférica que se aleja del centro de scattering -esta describe el efecto del potencial sobre las partículas-. Sin embargo, ψ debe estar dada por la solución de la ecuación de Schrödinger, ec. (23). Lo que haremos entonces será proponer una solución para (23), de la forma

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{r}\sum_{\ell=0}^{\infty} b_\ell u_\ell(r) Y_{\ell,0}(\theta), \tag{30}$$

y escoger los factores b_ℓ de tal forma que las ondas esféricas que están contenidas de forma implícita en las ecs. (29) y (30) (en el límite $r \to \infty$) coincidan.

Ejercicio 8. *Inserte la expansión (12) en el primer término de ψ_{Somm} y muestre que para r grande se tiene:*

$$\begin{aligned}\psi_{\text{Somm}}(\boldsymbol{x}) \quad \sim \quad & -\frac{e^{-ikr}}{2ikr}\left(\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}e^{i\ell\pi/2}Y_{\ell,0}\right) + \\ & \frac{e^{ikr}}{2ikr}\left(\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}e^{-i\ell\pi/2}Y_{\ell,0} + 2ikf(k,\theta)\right).\end{aligned}$$

Ejercicio 9. *Usando la forma asintótica para u_ℓ, ec. (27), muestre que para r grande la ecuación (30) toma la siguiente forma:*

$$\psi(\boldsymbol{x}) \sim -\frac{e^{-ikr}}{2ir}\left(\sum_{\ell=0}^{\infty} b_\ell e^{-i\delta_\ell}e^{i\ell\pi/2}Y_{\ell,0}\right) + \frac{e^{ikr}}{2ir}\left(\sum_{\ell=0}^{\infty} b_\ell e^{i\delta_\ell}e^{-i\ell\pi/2}Y_{\ell,0}\right).$$

Ejercicio 10. *Comparando las expresiones de los dos ejercicios anteriores, obtenga una fórmula explícita para b_ℓ en términos de ℓ, k y δ_ℓ. Muestre también que se cumple la siguiente identidad:*

$$a_\ell(k) = e^{i\delta_\ell(k)}\sin\delta_\ell(k). \tag{31}$$

La fórmula (28) permite obtener δ_ℓ si se conoce el potencial $U(r)$. Por otro lado, el resultado anterior nos permite calcular, usando la ec. (20), la función $f(k, \theta)$ y, por lo tanto, la sección eficaz correspondiente a $U(r)$.

Esta tarea debe ser desarrollada (y entregada) en parejas. Fecha de entrega: Miércoles 5 de febrero, en clase.