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 no relativista. A lo largo del documento ustedes encontrarán preguntas concretas (numerales entre paréntesis). Estas son las preguntas que deben responder para la tarea.

Referencias:

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

Expansión de una onda plana en ondas esféricas.
Consideremos una onda plana de la forma $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$, donde $\vec{x}$ denota un vector de posición con componentes x_1, x_2 y x_3. Lo que pretendemos hacer es 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 $\vec{x}$ 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, consideremos la siguiente ecuación diferencial (en 3 dimensiones espaciales):

$$\triangle\psi + \psi = 0. \tag{1}$$

Usando el método de separación de variables, propongamos una solución de la forma $\psi(r, \theta, \varphi) = Y(\theta, \varphi)f(r)$. Insertando esta función en (1), obtenemos las siguientes dos ecuaciones:

$$\triangle_{S^2}Y + l(l+1)Y = 0 \tag{2}$$

$$(r^2 f')' + (r^2 - l(l+1))f = 0. \tag{3}$$

En estas, l es un entero no negativo, obtenido -de la forma usual- como consecuancia del ansatz de separación de variables que se ha hecho. Como es bien sabido, los armónicos esféricos Y_{lm} ($-l \leq m \leq l$) forman una base para el espacio de soluciones de la ecuación (2) (compare las ecs. VI-3.2, VI-4.86d y VI-4.87 de Téllez). La ecuación (3) toma una forma más familiar al considerar la transformación $w(r) \equiv \sqrt{r}f(r)$:

$$w'' + \frac{1}{r}w' + \left(1 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}\right) = 0. \tag{4}$$

Esta es la ecuación diferencial de Bessel (ec. VI-5.7 en Téllez), 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 (4) y que, de hecho, estas forman un sistema fundamental para dicha ecuación. Pasando de w a f, y en vista de la definición de las funciones de Bessel esféricas (cf. Arfken), llegamos a la conclusión de que ($l \geq 0$) $j_l(r)$ y $j_{-(l+1)}(r)$ forman un sistema fundamental para la ec. (3). Adoptemos la convención de que a una solución de la ecuación (2) con valor propio igual a $n(n+1)$ la llamaremos función esférica de grado n: Y_n. Es decir Y_n es la notación genérica para cualquier solución de la ecuación $\triangle_{S^2}Y_n + n(n+1)Y_n = 0$. Por ejemplo, $Y_{l,m}$ es una función esférica de grado l y *también* de grado $-(l+1)$, ya que Y_{lm} es solución de la ec. (2) con

valor propio $(-(l+1))\cdot(-(l+1)+1) = l(l+1)$[1]. Por lo tanto, con esta convención, Y_{lm} es una función esférica de grado l, pero también de grado $-(l+1)$.
Lo anterior nos permite afirmar que, si n es un *entero*, Y_n es una función esférica de grado n y j_n la función de Bessel esférica correspondiente, entonces la función $\psi(r,\theta,\phi) := j_n(r)Y_n(\theta,\varphi)$ 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 la región $0 < r < R$, entonces ψ puede desarrollarse en una serie de la forma:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} j_n(r)Y_n(\theta,\varphi) \tag{5}$$

Esta serie posee una singularidad en el orígen que, sin embargo, es evitable si $\psi(0)$ se define adecuadamente. Retornando al problema de la onda plana, notemos que $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ es solución de la ec. (1), si $|\vec{k}| = 1$, y de una ecuación muy similar, si $|\vec{k}| \neq 1$. Para encontrar la forma explícita de la expansión (5) en el caso de una onda plana, procederemos de la siguiente manera:

10. Ondas parciales.
Para $\vec{x} = (0,0,x_3)$ se tiene que $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = e^{ikx_3}$ $(k \in \mathbb{R})$ y por lo tanto en la expansión en ondas parciales no habrá dependencia del ángulo azimutal φ. Propongamos, por lo tanto, una expansión de la forma

$$e^{ikx_3} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l(r)Y_{l,0}(\theta,\varphi). \tag{6}$$

(10.1) Muestre que $C_l(r)$ se puede expresar de la siguiente forma:

$$C_l(r) = 2\pi\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\int_{-1}^{1} P_l(x)e^{ikrx}dx. \tag{7}$$

(10.2) Multiplique y divida la expresión para $C_l(r)$ obtenida en el punto 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 $C_l(r)$ cuando $r \to \infty$. Muestre que

$$\int_{-1}^{1} P_l(x)e^{ikrx}dx = \frac{i^l}{ikr}\left(e^{i(kr-\pi l/2)} - e^{-i(kr-\pi l/2)}\right)P_l(1) + o((kr)^{-2}). \tag{8}$$

Concluya que, para $r \to \infty$, se tiene:

$$e^{ikx_3} \sim \sum_{l=0}^{\infty} i^l\sqrt{4\pi(2l+1)}j_l(kr)Y_{l,0}(\theta,\varphi) \tag{9}$$

(Por supuesto aquí r, θ y φ son las coordenadas polares de $\vec{x}$).
(10.3) Asumiendo que la expansión (9) es válida en general, muestre que:

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

$$\boxed{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(kr) \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{l,m}(\theta_k,\varphi_k) Y_{l,m}(\theta_x,\varphi_x). \qquad (10)}$$

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

Los cálculos anteriores son, en principio, suficientes para establecer la validez de la fórmula (9) (y por lo tanto de la (10)), si se usa un argumento de unicidad. Otra forma de obtener (10) es usando funciones de Green (ver Arfken). Para convencernos de que la fórmula es en realidad válida procedamos de la siguiente forma:

(10.4) Usando la fórmula de Rodrigues e integración por partes, muestre que:

$$\int_{-1}^{1} x^l P_l(x)dx = \frac{2^{l+1}(l!)^2}{(2l+1)!}. \tag{11}$$

(10.5) Considere una expansión de la forma

$$e^{ikr\cos\gamma} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l j_l(kr) P_l(\cos\gamma), \tag{12}$$

donde γ es el ángulo formado por $\vec{k}$ y $\vec{x}$: $\vec{k}\cdot\vec{x} = kr\cos\gamma$. Usando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre, muestre que ($\alpha \equiv kr$):

$$a_l j_l(\alpha) = \frac{2l+1}{2}\int_{-1}^{1} e^{i\alpha x} P_l(x)dx. \tag{13}$$

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

$$a_l j_l^{(l)}(0) = \frac{2l+1}{2}(i)^l \frac{2^{l+1}(l!)^2}{(2l+1)!}.$$

Concluya, haciendo uso de la forma asintótica para j_l, que $a_l = (i)^l(2l+1)$.

Scattering en potenciales centrales

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

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

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

$$\int_S \vec{\jmath}\cdot\hat{n}dS.$$

(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 $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ es:

$$\vec{\jmath}_{out} \cdot \hat{e}_r r^2 d\Omega.$$

11. Amplitud de scattering.
Asuma que la función de onda de la partícula incidente es una onda plana, de la forma $\psi_{in} = e^{ikx_3}$ y que la función de onda de la partícula, luego de haber sido dispersada, es de la forma $\psi_{out} = f(k,\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$.

(11.1) Muestre que $\vec{\jmath}_{in} = \frac{\hbar k}{m}\hat{e}_3$ y que, para valores suficientemente grandes de r, se tiene: $\vec{\jmath}_{out} \sim \frac{\hbar k}{m}\frac{|f(k,\theta)|^2}{r^2}\hat{e}_r$ (componente radial).

(11.2) Muestre que la sección eficaz diferencial ($d\sigma$) está dada por:

$$d\sigma \stackrel{def}{=} \frac{\vec{\jmath} \cdot \hat{e}_r r^2 d\Omega}{|\vec{\jmath}_{in}|} = |f(k,\theta)|^2 d\Omega. \tag{14}$$

12. Análisis de ondas parciales.
Debido a que la función f no depende del ángulo azimutal, podemos entonces proponer una expansión de la forma

$$f(k,\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)a_l(k)P_l(\cos\theta). \tag{15}$$

Los coeficientes $a_l(k)$ se denominan *amplitudes de onda parcial.*

(12.1) La sección eficaz total se define como $\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega$. Usando la ortogonalidad de los armónicos esféricos ($Y_{l,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$), muestre que

$$\sigma \equiv \sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|a_l(k)|^2. \tag{16}$$

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

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\triangle\psi + U(r)\psi = E\psi. \tag{17}$$

Usando el método de separación de variables, con $\psi = (u(r)/r)Y(\theta,\phi)$, se obtienen dos ecuaciones. La ecuación angular nos lleva a los armónicos esféricos (de tal forma que $Y = Y_{lm}$), mientras que la ecuación radial (la que satisface $u \equiv u_l$) toma la forma:

$$u_l''(r) - \left(\frac{2m}{\hbar^2}U_{ef}(r) - k^2\right)u_l(r) = 0, \tag{18}$$

donde $U_{ef}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r)$ (el primer término -potencial centrífugo- sale de la parte angular del laplaciano..) y $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (ya que buscamos soluciones con energía positiva). Para potenciales de rango finito ($rU(r) \to 0$, para $r \to \infty$), la ecuación radial toma la siguiente forma, para r grande:

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

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

$$u_l(r) \sim \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right). \tag{19}$$

Las fase de u_l ha sido escogida de tal forma que el término δ_l, definido a través de la ecuación anterior, sea cero cuando $U(r)$ es cero. Aunque no lo haremos aquí, es posible mostrar, usando la ecuación radial, que las fases de scattering (δ_l) se pueden expresar en términos del potencial, de acuerdo a la siguiente fórmula:

$$\sin\delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty rU(r)u_l(r)j_l(r)dr. \tag{20}$$

Asumiendo esto, para calcular la sección eficaz, dado un potencial $U(r)$, todo lo que nos falta es saber cómo expresar a_l en términos de δ_l. Para esto, procedemos de la siguiente forma:
(12.2) Estamos buscando soluciones de la forma

$$\psi_{Somm}(\vec{x}) \sim e^{ikx_3} + f(k,\theta)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{21}$$

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. (17). Lo que haremos entonces será proponer una solución para (17), de la forma

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{r}\sum_{l=0}^{\infty} c_l u_l(r) Y_{l,0}(\theta), \tag{22}$$

y escoger los factores c_l de tal forma que las ondas esféricas que están contenidas de forma implícita en las ecs. (21) y (22) (en el límite $r \to \infty$)coincidan.
Inserte la expansión (9) en el primer término de ψ_{Somm} y, teniendo en cuenta el comportamiento asintótico de las funciones de Bessel esféricas, muestre que para $r \to \infty$ se tiene:

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

(12.3) Usando la forma asintótica para u_l, ec. (19), muestre que para r grande la ecuación (22) toma la siguiente forma:

$$\psi(\vec{x}) \sim -\frac{e^{-ikr}}{2ir}\left(\sum_{l=0}^{\infty} c_l e^{-i\delta_l}e^{il\pi/2}Y_{l,0}\right) + \frac{e^{ikr}}{2ir}\left(\sum_{l=0}^{\infty} c_l e^{i\delta_l}e^{-il\pi/2}Y_{l,0}\right).$$

(12.4) Comparando las dos expresiones anteriores, obtenemos las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} c_l \quad &= \quad \frac{i^l}{k}\sqrt{4\pi(2l+1)}e^{i\delta_l}, \\ f(k,\theta) \quad &= \quad \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{e^{2i\delta_l}-1}{2i}(2l+1)P_l(\cos\theta).\end{aligned}$$

Usando esto, muestre que se cumple:

$$a_l(k) = e^{i\delta_l(k)}\sin\delta_l(k).$$

La fórmula (20) permite obtener δ_l si se conoce el potencial $U(r)$. Por otro lado, el resultado anterior nos permite calcular, usando la ec. (15), la función $f(k, \theta)$ y, por lo tanto, la sección eficaz correspondiente a $U(r)$.

Fecha de entrega: jueves 6 de octubre, en clase.