



T

eoría de colisiones elásticas

OBRA MUY NECESARIA A TODOS LOS INGENIOS PERPICACES Y CURIOSOS, CON LA QUE TODO ESTUDIOSO DE FÍSICA, INGENIERÍA U OTRAS DISCIPLINAS NATURALES O MATEMÁTICAS CONSEGUIRÁ SUAVÍSIMA, SUTIL Y ADMIRABLE DOCTRINA, Y SE DELEITARA CON VARIAS CUESTIONES DE SECRETÍSIMA CIENCIA ♣ VEINTE LÁMINAS EN HUECOGRABADO



Nihil Obstat:

W. J. Kirkhead,
Censor Delegatus

Imprimatur:
Michael Augustine,
Archbishop of New York

DECLARASE OFICIALMENTE QUE EL PRESENTE PANFLETO ESTA LIBRE DE ERRORES MORALES O DE DOCTRINA.

TEORÍA DE COLISIONES ELÁSTICAS

Raúl Oscar Barrachina¹

Centro Atómico Bariloche² e Instituto Balseiro³
R8402AGP San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina.

¹También, miembro de la Carrera del Investigador del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina.

²Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Argentina.

³Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo, Argentina.

Contenido

1	Teoría clásica de colisiones	1
1.1	Sección eficaz diferencial	1
1.2	Definición clásica de la sección eficaz	2
1.3	Descripción independiente del tiempo	4
1.4	Dispersión de Rutherford	5
1.5	Efectos Gloria y Arco Iris	5
2	Teoría cuántica de colisiones	9
2.1	Operador de Green	9
2.2	Operador de Green libre	9
2.3	Ecuación de Lippmann-Schwinger	10
2.4	Estados estacionarios de dispersión	10
2.5	Límite asintótico de los estados estacionarios de dispersión	10
2.6	Sección eficaz cuántica	11
2.7	Dispersión coulombiana	11
3	Aproximación de Born	13
3.1	La serie de Born	13
3.2	Primera aproximación de Born	13
3.3	Potencial de Yukawa	15
3.4	Dispersión elástica por átomos	15
4	Colisiones de baja energía	19
4.1	Desarrollo en ondas parciales	19
4.2	Corrección de la primera aproximación de Born	21
4.3	Propiedades de la amplitud de onda parcial	22
5	Resonancias	27
5.1	La función de Jost	27
5.2	Ceros de la función de Jost y estados ligados	27
5.3	Resonancias	28
5.4	Resonancia de energía cero	32

6	Teoría semiclásica de colisiones	33
6.1	Aproximación semiclásica	33
6.2	Interferencia cuántica en el efecto Arco Iris	35
7	Dispersión de partículas idénticas	39
7.1	Descripción de un proceso de dispersión elástica en el sistema de laboratorio	39
7.2	Dispersión de partículas idénticas	41
7.3	Colisión electrón - átomo	44
A	Unidades Atómicas	47
B	Teorema óptico	49

Lista de figuras

1.1	Esquema de un experimento de colisiones	1
1.2	Dispersión de una partícula por un centro de fuerzas	2
1.3	Densidad de partículas en un potencial coulombiano	4
1.4	Potencial interatómico típico	5
1.5	Función de deflexión para un potencial interactómico típico	6
1.6	Parámetro de impacto como función del ángulo de dispersión	7
1.7	Sección eficaz diferencial mostrando el efecto Arco Iris	8
3.1	Primera aproximación de Born	14
3.2	Colisión elástica $e + \text{He}$	17
4.1	Desfasajes para un pozo cuadrado central	23
4.2	Secciones eficaces parciales para un pozo cuadrado central	24
4.3	Sección eficaz total para la colisión de electrones contra gases nobles	25
5.1	Estados ligados, virtuales y resonantes	28
5.2	Cuatro posibles resonancias	30
5.3	Desfasaje y sección eficaz parcial para $\ell = 3$	31
6.1	Función de deflexión clásica	35
6.2	Desfasaje obtenido con la condición de fase estacionaria	36
6.3	Sección eficaz diferencial para la colisión $\text{Na} + \text{Xe}$	37
7.1	Dos procesos indistinguibles en la dispersión de partículas idénticas	41

Capítulo 1

Teoría clásica de colisiones

1.1 Sección eficaz diferencial

Consideremos un flujo J de partículas de masa m e impulso \mathbf{p} que inciden sobre un blanco formado por N centros de fuerzas.

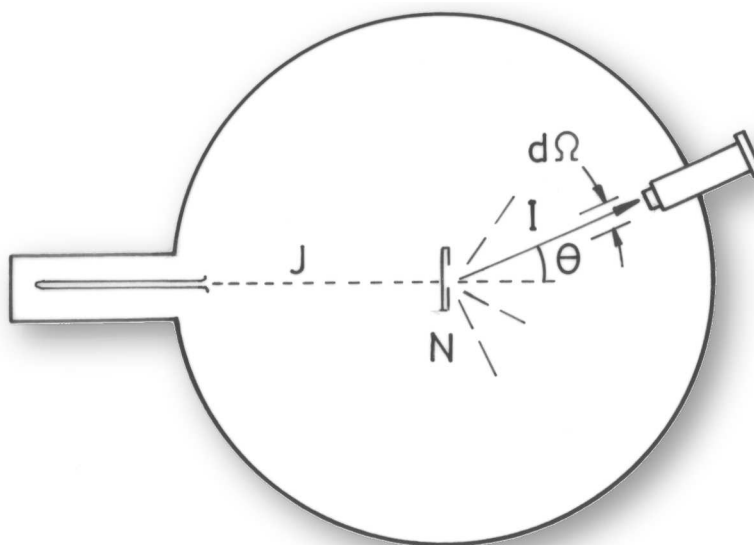


Figura 1.1: Esquema de un experimento de colisiones.

El número I de partículas detectadas por unidad de tiempo en un diferencial $d\Omega$ de ángulo sólido no es adecuado para describir el proceso de colisión, ya que siendo proporcional al flujo de proyectiles y al número de átomos del blanco, depende de las características particulares del experimento.

$$I d\Omega \propto J N . \quad (1.1)$$

El factor de proporcionalidad debe ser un diferencial de igual orden, y lo llamaremos sección eficaz diferencial $d\sigma$,

$$I = \frac{d\sigma}{d\Omega} JN . \quad (1.2)$$

A partir de esta ecuación vemos que la sección eficaz $d\sigma/d\Omega$ tiene unidades de área. Es claramente independiente de la intensidad del haz incidente, del número de partículas en el blanco o de la resolución del detector. Está definida exclusivamente por las características de la interacción entre cada proyectil y cada partícula del blanco, y es función únicamente de la energía $E_p = p^2/2m$ y del ángulo de deflexión θ .

1.2 Definición clásica de la sección eficaz

Consideremos un proyectil que se acerca a un centro de fuerzas con cierto apartamiento ρ respecto de la trayectoria de colisión frontal, para luego ser desviado en un cierto ángulo de deflexión θ por la acción del potencial central actuante $V(r)$. Supondremos que la relación entre el ángulo de deflexión θ y el parámetro de impacto ρ es biunívoca. Esto es claramente cierto para el potencial coulombiano donde el ángulo de deflexión es una función monótona del parámetro de impacto. En este caso sólo aquellas partículas con parámetros de impacto entre ρ y $\rho + d\rho$ serán dispersadas en el cono de ángulo sólido entre θ y $\theta + d\theta$.

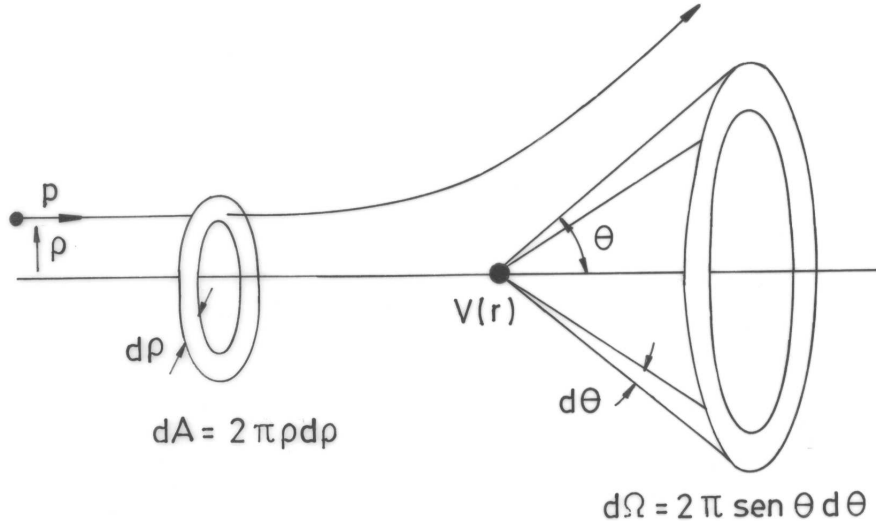


Figura 1.2: Dispersión de una partícula por un centro de fuerzas.

Por lo tanto $I d\Omega = J dA$ o, si consideramos N centros dispersores, $I d\Omega = N J dA$. O sea

$$I 2\pi \sin\theta d\theta = N J 2\pi \rho , d\rho \quad (1.3)$$

y, por la definición de sección eficaz diferencial, tenemos finalmente

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\rho}{|\sin\theta|} \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right|. \quad (1.4)$$

El cálculo de la sección eficaz diferencial se ha reducido a considerar el problema de la deflexión de una partícula por un centro de fuerzas. Sabemos que la trayectoria de la partícula en un campo de fuerzas central es simétrica respecto de una línea que pase por el punto de máximo acercamiento al centro de fuerzas. Por lo tanto, si llamamos ϕ al ángulo de dicho perihelio, tenemos una relación bastante simple con el ángulo de deflexión θ ,

$$2\phi + \theta = \pi . \quad (1.5)$$

El impulso angular $\ell = \rho p$ y la energía $E_p = p^2/2m$ se conservan durante la colisión. O sea

$$\rho p = m r^2 \frac{d\varphi}{dt}, \quad (1.6)$$

$$E_p = \frac{1}{2} m \left(\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right) + V(r). \quad (1.7)$$

Eliminando dt de ambas ecuaciones resulta la ecuación de las órbitas

$$d\varphi = \frac{\rho/r^2 dr}{\sqrt{1 - (\rho/r)^2 - V/E_p}}. \quad (1.8)$$

Finalmente, integrando entre el punto en el infinito y el perihelio r_o obtenemos

$$\phi = \int_{r_o}^{\infty} \frac{\rho/r^2 dr}{\sqrt{1 - (\rho/r)^2 - V/E_p}}. \quad (1.9)$$

Esta ecuación nos permite calcular el ángulo de deflexión θ en términos del parámetro de impacto ρ , dando una resolución completa al problema.

1.3 Descripción independiente del tiempo

En la sección anterior estudiamos el proceso de colisión analizando la órbita de cada partícula que choca contra el centro de fuerzas. También podemos basar nuestro razonamiento en la descripción del correspondiente flujo estacionario de partículas. Asintóticamente, la densidad de partículas $n(\mathbf{r})$ puede descomponerse en dos términos,

$$n(\mathbf{r}) \approx n_o + n_+(\mathbf{r}) , \quad (1.10)$$

donde

$$n_o(\mathbf{r}) = \frac{J}{p/m} \quad (1.11)$$

es la densidad que produciría el flujo incidente en ausencia del centro de fuerzas. De manera semejante, el segundo término puede identificarse con el número I de partículas saliente por unidad de tiempo y ángulo sólido como

$$n_+(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{r^2} \frac{I/N}{p/m} . \quad (1.12)$$

De esta manera, la sección eficaz diferencial está dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{r^2 n_+(\mathbf{r})}{n_o} . \quad (1.13)$$

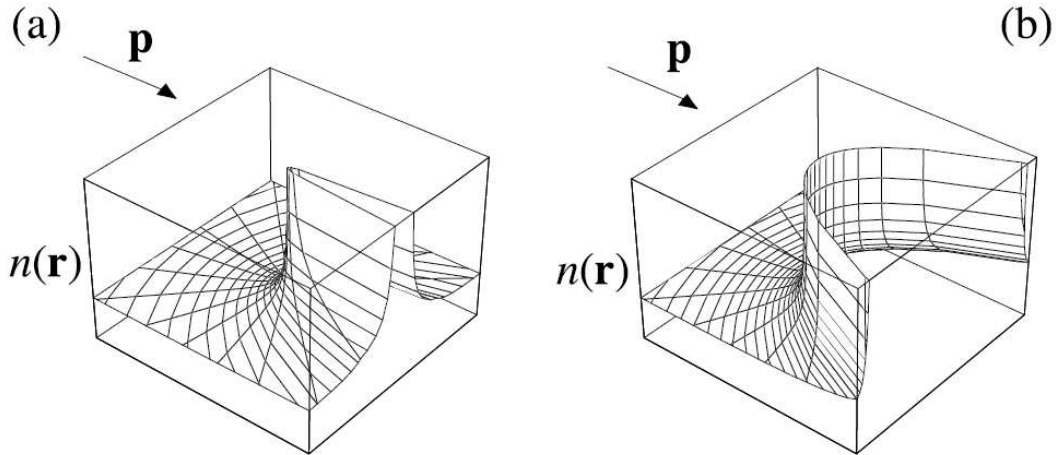


Figura 1.3: Densidad de partículas en la dispersión por un potencial $V(r) = Z/r$ atractivo (a) o repulsivo (b).

1.4 Dispersión de Rutherford

Reemplazando $V(r) = Z/r$ en la expresión (1.9) y efectuando una integración elemental obtenemos el parámetro de impacto ρ en función del ángulo de deflexión θ que, reemplazando en la sección eficaz, nos da como resultado la fórmula que Rutherford dedujo en 1911

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z}{4E_p} \right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4(\theta/2)}. \quad (1.14)$$

Debe notarse que la fórmula de Rutherford es independiente del signo de la carga Z , con lo cual el resultado es el mismo tanto para campos repulsivos como atractivos.

1.5 Efectos Gloria y Arco Iris

Consideremos un potencial interatómico típico, repulsivo a cortas distancias y atractivo a grandes distancias.

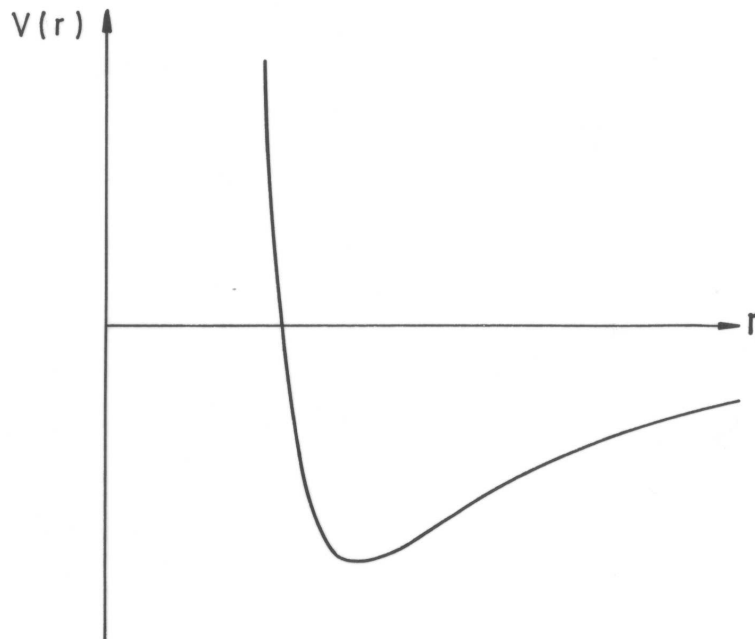


Figura 1.4: Potencial interatómico típico.

Si el parámetro de impacto ρ es grande, el ángulo de deflexión θ es negativo y crece al disminuir ρ . Para parámetros de impacto pequeños, en cambio, θ es positivo. Finalmente, para $\rho = 0$ el ángulo de deflexión toma el valor $\theta = \pi$ correspondiente a la dispersión hacia atrás.

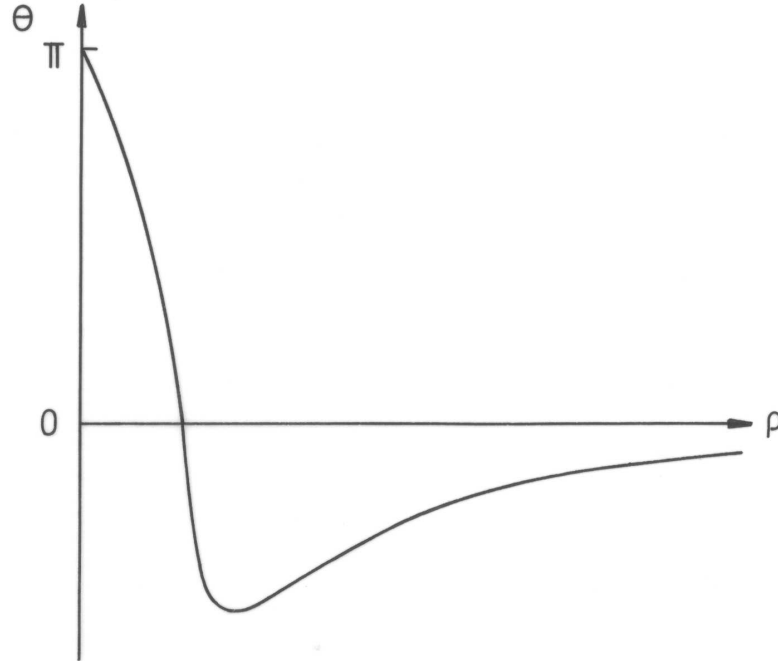


Figura 1.5: Función de deflexión $\theta(\rho)$ para un potencial interatómico típico.

Para evaluar la sección eficaz, graficamos ρ como función de θ , restringiendo el ángulo al rango $0 \leq \theta \leq \pi$.

Vemos que la relación entre el parámetro de impacto ρ y este ángulo de *dispersión* no es biunívoca como habíamos supuesto, sino que para $\theta < \theta_R$ tiene tres ramas. Por esto debemos generalizar la sección eficaz para incluir todas las contribuciones a un mismo ángulo de dispersión.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{\sin\theta} \sum_i \rho_i \left| \frac{d\rho_i}{d\theta} \right|. \quad (1.15)$$

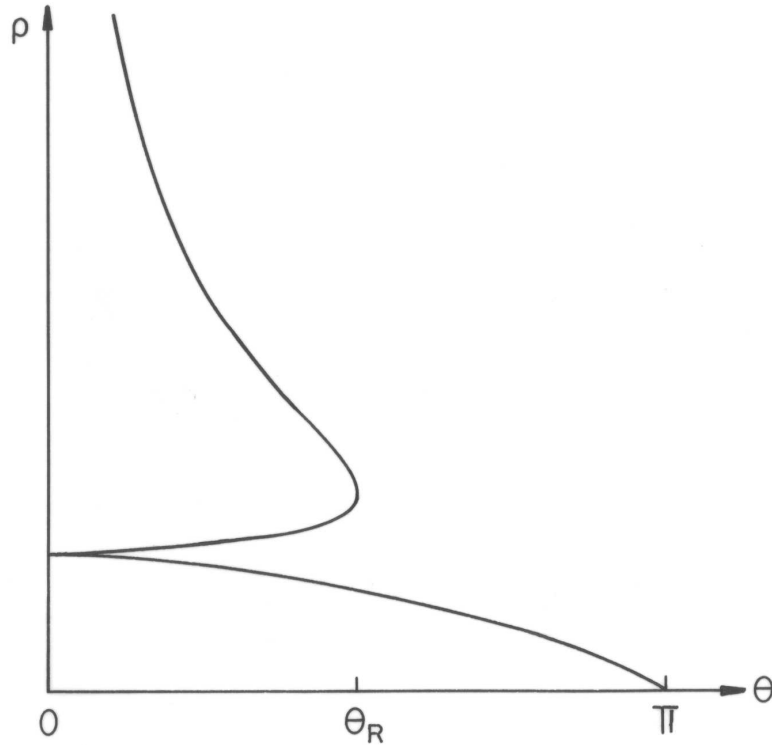


Figura 1.6: Parámetro de impacto ρ como función del ángulo de dispersión θ .

Algo que llama rápidamente la atención es que la sección eficaz puede divergir para ciertos ángulos particulares. Esto ocurre, por ejemplo, para $\theta = \theta_R$, donde $d\rho/d\theta$ se vuelve infinito. Lo que ocurre es que una banda ancha $\delta\rho$ de trayectorias incidentes son dispersadas hacia una banda angular $\delta\theta$ muy estrecha, produciendo un brusco aumento de la intensidad en esa dirección. Este efecto se denomina Arco Iris, por su similitud con el conocido fenómeno óptico.

Vemos además que $\sin\theta = 0$ para $\theta = \pi$ pero, como el parámetro de impacto también se anula, ello no produce ninguna divergencia en la sección eficaz. Cuando $\theta = 0$, en cambio, el parámetro de impacto no se anula y se produce una nueva divergencia de la sección eficaz. Este efecto se denomina Gloria.

Ambos efectos ocurren cuando más de un parámetro de impacto contribuye a un dado ángulo de dispersión. Cuánticamente esto produce una interferencia entre las distintas ramas de $\rho(\theta)$ que, tal como veremos en el capítulo 6, se manifiesta como oscilaciones de la sección eficaz con el ángulo de dispersión.

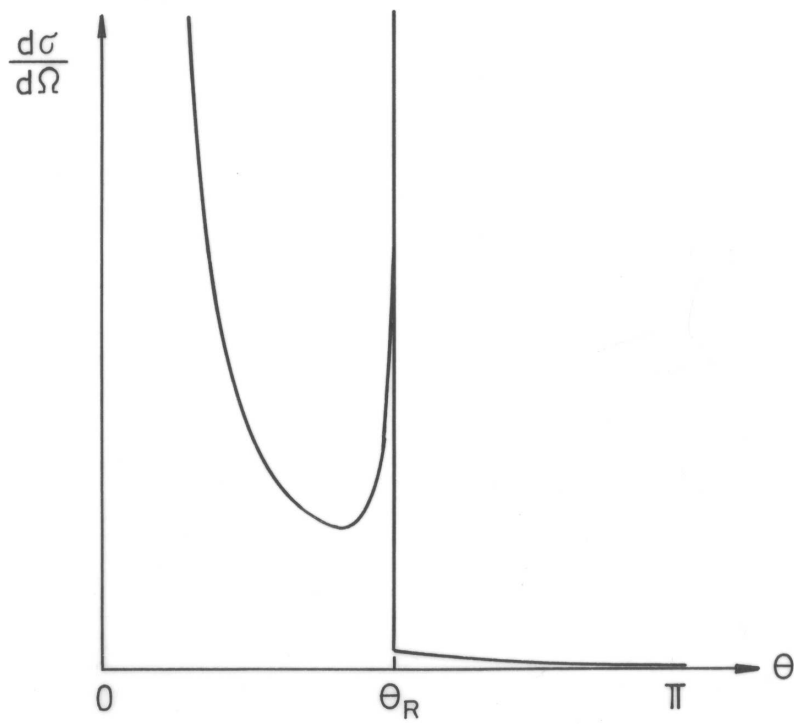


Figura 1.7: Sección eficaz diferencial correspondiente a la función de deflexión representada en la figura 1.5, θ_R es el ángulo de Arco Iris.

Capítulo 2

Teoría cuántica de colisiones

2.1 Operador de Green

La herramienta más importante en la teoría de colisiones es el operador estacionario de Green

$$G(z) = (z - H)^{-1} . \quad (2.1)$$

Es evidente que no está bien definido cuando z es igual a un autovalor del Hamiltoniano $H = H_o + V$, es decir, sobre el eje real positivo y sobre algunos puntos del eje real negativo. Fuera de esa zona $G(z)$ es analítico. Además siendo H hermítico, verifica $G(z^*) = G^\dagger(z)$.

2.2 Operador de Green libre

El elemento de matriz del operador de Green libre $G_o(z) = (z - H_o)^{-1}$ está dado por (utilizando unidades atómicas, ver apéndice A)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | G_o(z) | \mathbf{r}' \rangle &= \int \langle \mathbf{r} | G_o(z) | \mathbf{k} \rangle d\mathbf{k} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{z - k^2/2m} d\mathbf{k} = \\ &= \frac{2im}{(2\pi)^2} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{k^2 - 2mz} k dk . \end{aligned} \quad (2.2)$$

Considerando $Im(z) \neq 0$, esta integral puede evaluarse por residuos,

$$\langle \mathbf{r} | G_o(z) | \mathbf{r}' \rangle = -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{2mz}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} . \quad (2.3)$$

Como caso particular, en el límite $Im(z) \rightarrow 0$, obtenemos

$$\langle \mathbf{r} | G_o(E_p \pm i\varepsilon) | \mathbf{r}' \rangle = -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{\pm ip|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} , \quad (2.4)$$

con $\varepsilon \rightarrow 0^+$. Vemos que, debido al corte que presenta a lo largo del eje real positivo, $G_o(z)$ toma valores distintos al aproximarse según $E_p + i\varepsilon$ o $E_p - i\varepsilon$.

2.3 Ecuación de Lippmann-Schwinger

Conocer $G(z)$ es equivalente a tener solucionado el problema de autovalores de H . Este es un problema muy difícil, por lo cual se buscan soluciones aproximadas. Tal como veremos en el próximo capítulo, la clave de estas técnicas de aproximación es la ecuación de Lippmann-Schwinger

$$G = G_o + G_o V G = G_o + G V G_o, \quad (2.5)$$

que resulta de

$$G = G_o G_o^{-1} G = G_o (z - H_o) G = G_o (G^{-1} + V) G. \quad (2.6)$$

2.4 Estados estacionarios de dispersión

Comenzaremos discutiendo el proceso de colisión más simple: la dispersión elástica de una partícula sin espín por un centro de fuerzas fijo de potencial $V(r)$. Como primer paso hacia la obtención de la correspondiente sección eficaz cuántica, introducimos los estados estacionarios de dispersión

$$|\mathbf{p}+\rangle = |\mathbf{p}\rangle + G(E_p + i\varepsilon) V |\mathbf{p}\rangle. \quad (2.7)$$

Estos estados son autovectores del Hamiltoniano total

$$H|\mathbf{p}+\rangle = E_p |\mathbf{p}+\rangle, \quad (2.8)$$

y satisfacen la ecuación de Lippmann-Schwinger

$$|\mathbf{p}+\rangle = |\mathbf{p}\rangle + G_o(E_p + i\varepsilon) V |\mathbf{p}+\rangle. \quad (2.9)$$

2.5 Límite asintótico de los estados estacionarios de dispersión

De la ecuación de Lippmann-Schwinger resulta:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} + \rangle &= \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle + \int \langle \mathbf{r} | G_o(E_p + i\varepsilon) | \mathbf{r}' \rangle V(r') \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} + \rangle d\mathbf{r}' = \\ &= \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle - \frac{m}{2\pi} \int \frac{e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(r') \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} + \rangle d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Cuando r es mucho mayor que el alcance a del potencial $V(r')$ (que es la zona de integración) podemos desarrollar

$$\frac{e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq \frac{1}{r} e^{ipr} e^{-ip\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} \quad r \gg a \quad r \gg pa^2, \quad (2.11)$$

de tal forma que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} + \rangle &\simeq \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle - \frac{m}{2\pi} \frac{e^{ipr}}{r} \int e^{-ip\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} V(r') \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} + \rangle d\mathbf{r}' = \\ &= \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle - \frac{m}{2\pi} \frac{e^{ipr}}{r} (2\pi)^{3/2} \int \langle p\hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r}' \rangle V(r') \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} + \rangle d\mathbf{r}' = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} - (2\pi)^2 m \langle p\hat{\mathbf{r}} | V | \mathbf{p} + \rangle \frac{e^{ipr}}{r} \right]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

2.6 Sección eficaz cuántica

Vemos que a grandes distancias, y más allá de la presencia de términos de interferencia, la densidad $n = |\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} + \rangle|^2$ del estado estacionario de dispersión incluye la densidad de la onda plana $n_o = 1/(2\pi)^3$ y la de la onda esférica saliente

$$n_+ = 2\pi \frac{1}{r^2} m^2 |\langle p\hat{\mathbf{r}} | V | \mathbf{p} + \rangle|^2. \quad (2.13)$$

De esta manera, reemplazando en la ecuación (1.13), obtenemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 |\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{p} + \rangle|^2, \quad (2.14)$$

donde $\mathbf{k} = p\hat{\mathbf{r}}$ es un vector impulso que apunta en la dirección del detector.

Definiendo el operador de transición $T(z) = V + VG(z)V$, podemos escribir

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 |\langle \mathbf{k} | T(E_p + i\varepsilon) | \mathbf{p} \rangle|^2. \quad (2.15)$$

2.7 Dispersión coulombiana

El potencial coulombiano $V(r) = Z/r$ es una rareza dentro de la teoría de colisiones. Por un lado su comportamiento asintótico presenta distorsiones logarítmicas que impiden su inclusión en el marco de la teoría que estamos desarrollando aquí. Pero, por otra parte, sus estados estacionarios de dispersión $|\mathbf{p}\pm\rangle$ se conocen exactamente ¹.

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} + \rangle = \frac{\Gamma(1+in)}{e^{\pi n/2}} {}_1F_1(-in, 1, i(pr - \mathbf{p}\cdot\mathbf{r})) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.16)$$

¹B. R. Johnson et al., Phys. Rev. A **32**, 1998 (1985).

con $n = Z/(p/m)$. En su forma asintótica,

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} + \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left((pr - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})^{in} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} - n \frac{\Gamma(1 + in)}{\Gamma(1 - in)} \frac{e^{ipr}}{(pr - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})^{1+in}} \right), \quad (2.17)$$

advertimos claramente la presencia de las distorsiones logarítmicas a las que hacíamos referencia. Comparando con la forma asintótica (2.12) obtenemos

$$\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{p} + \rangle = \frac{Z}{2\pi^2} \frac{\Gamma(1 + in)}{\Gamma(1 - in)} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2} \left(\frac{4p^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2} \right)^{in}, \quad (2.18)$$

y reemplazando en la sección eficaz recuperamos la fórmula clásica de Rutherford

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2mZ)^2 \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^4} \quad (2.19)$$

Capítulo 3

Aproximación de Born

3.1 La serie de Born

Hemos visto que el cálculo de la sección eficaz elástica se reduce a la evaluación del elemento de matriz de transición

$$\langle \mathbf{k} | T(E_p + i\varepsilon) | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{p} \rangle . \quad (3.1)$$

Si iteramos en la ecuación de Lippmann–Schwinger ,

$$| \mathbf{p} \rangle = | \mathbf{p} \rangle + G_o V | \mathbf{p} \rangle , \quad (3.2)$$

obtenemos la serie de Born

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | T(E_p + i\varepsilon) | \mathbf{p} \rangle &= \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{p} \rangle + \langle \mathbf{k} | V G_o(E_p + i\varepsilon) V | \mathbf{p} \rangle + \\ &+ \langle \mathbf{k} | V G_o(E_p + i\varepsilon) V G_o(E_p + i\varepsilon) V | \mathbf{p} \rangle + \dots \end{aligned} \quad (3.3)$$

En muchos casos de interés práctico esta serie converge, y lo hace con suficiente rapidez como para que sólo unos pocos términos sean importantes. Existen teoremas de convergencia que, en general, resultan en condiciones de validez innecesariamente restrictivas. Sin embargo, teniendo en cuenta que cada término incluye potencias sucesivas del potencial y de la función de Green -que en cierto sentido es inversamente proporcional a la energía- podemos anticipar que la convergencia será buena para potenciales débiles y energías altas.

3.2 Primera aproximación de Born

El primer término de la serie es

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | T_{1B} | \mathbf{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} V(r) d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\text{sen}(|\mathbf{p}-\mathbf{k}|r)}{|\mathbf{p}-\mathbf{k}|r} V(r) r^2 dr . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Es posible obtener algunas propiedades importantes de este primer orden de aproximación sin necesidad de referirse a ningún potencial particular. En primer lugar vemos que, en la dirección hacia adelante, la matriz de transición

$$\langle \mathbf{p} | T_{1B} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty V(r) r^2 dr \quad (3.5)$$

es independiente de la energía. Fuera de esa dirección, el momento transferido $|\mathbf{p} - \mathbf{k}| = 2p \sin(\theta/2)$ crece monótonamente con el ángulo y la matriz de transición decrece, tanto más rápidamente cuanto mayor es la energía.

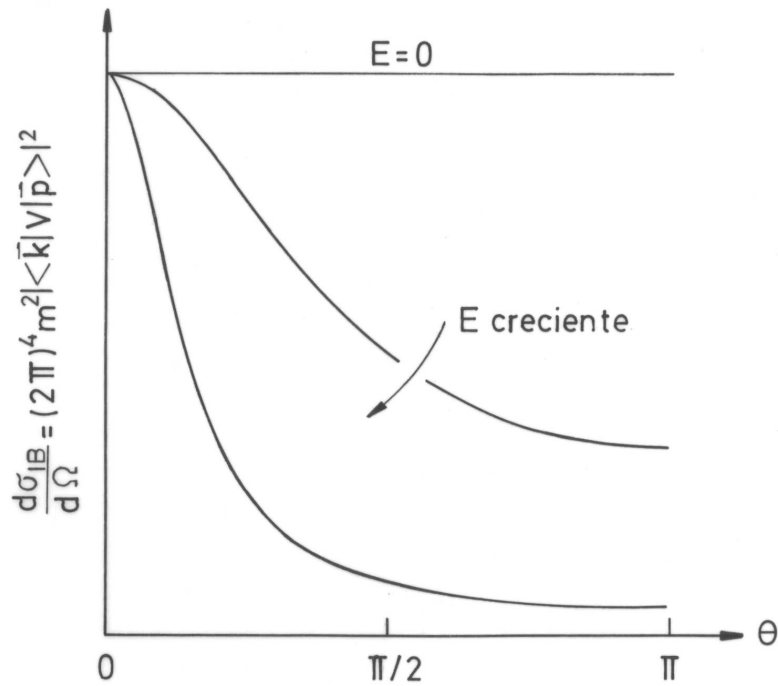


Figura 3.1: Comportamiento típico de la sección eficaz diferencial en la primera aproximación de Born.

Vemos que la primera aproximación de Born es real y, por lo tanto, no verifica el teorema óptico (ver apéndice B)

$$Im \langle \langle \mathbf{p} | T(E_p + i\varepsilon) | \mathbf{p} \rangle \rangle = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{p}{2m} \sigma(p). \quad (3.6)$$

Esto se debe a que la sección eficaz total es al menos de segundo orden en el potencial. Por lo tanto, no hay contradicción en primer orden.

3.3 Potencial de Yukawa

Como primera aplicación de la serie de Born consideramos el potencial de Yukawa $V(r) = \frac{Z}{r} e^{-r/a}$ para el cual

$$\langle \mathbf{k} | T_{1B} | \mathbf{p} \rangle = \frac{Za^2}{2\pi^2} \frac{1}{1 + |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2 a^2}. \quad (3.7)$$

La sección eficaz

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{4m^2 Z^2 a^4}{(1 + |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2 a^2)^2} = \\ &= \frac{4m^2 Z^2 a^4}{(1 + 4p^2 a^2 \sin^2(\theta/2))^2} \end{aligned} \quad (3.8)$$

muestra todas las propiedades que indicamos anteriormente, formando un pico a ángulo cero de altura $d\sigma/d\Omega|_o = 4m^2 Z^2 a^4$ y ancho $\Delta\theta \simeq 1/pa$.

Para analizar la validez de esta aproximación deberíamos compararla con el término de segundo orden $\langle \mathbf{k} | V G_o V | \mathbf{p} \rangle$. Este término puede calcularse exactamente sin mucha dificultad, pero en nuestro caso basta con conocer su expresión a ángulo cero

$$\langle \mathbf{p} | V G_o V | \mathbf{p} \rangle = -\frac{Za^2}{2\pi^2} \frac{mZa}{1 - 2ipa}. \quad (3.9)$$

Vemos que, siendo

$$\left| \frac{\langle \mathbf{p} | V G_o V | \mathbf{p} \rangle}{\langle \mathbf{p} | V | \mathbf{p} \rangle} \right| = \frac{mZa}{\sqrt{1 + (2pa)^2}}, \quad (3.10)$$

debería verificarse que $mZa \ll 1$ para que la aproximación de Born fuese válida independientemente de la energía. Pero, como en colisiones atómicas típicas, m , Z y a son del orden de la unidad o mayores, esta condición no puede satisfacerse. En cambio, a altas energías tenemos la condición

$$\frac{p}{m} \gg \frac{Z}{2}, \quad (3.11)$$

que se satisface con un proyectil suficientemente rápido.

3.4 Dispersión elástica de partículas cargadas rápidas por átomos

Consideremos ahora el choque de un proyectil de carga Z_P contra un átomo de número atómico Z_B . Este es, en realidad, un problema de muchas partículas. Sin embargo es posible obtener una aproximación razonablemente buena para la

dispersión elástica si se considera a los electrones del átomo blanco como formando una distribución fija de carga $\rho(\mathbf{r})$, sin tener en cuenta efectos de polarización o intercambio. En esta aproximación estática el potencial de interacción es

$$V(\mathbf{r}) = Z_P \left(\frac{Z_B}{r} - \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right). \quad (3.12)$$

Reemplazando en la primera aproximación de Born, obtenemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mZ_P}{|\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2} \right)^2 [Z_B - F(\mathbf{p} - \mathbf{k})]^2, \quad (3.13)$$

donde

$$F(\mathbf{q}) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (3.14)$$

es el llamado factor de forma atómico

Para átomos simples podemos describir la densidad de carga por

$$\rho(r) = Z_B \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-2\alpha r}, \quad (3.15)$$

con α una carga efectiva obtenida variacionalmente ($\alpha = 1$ para el Hidrógeno atómico, 1.69 para el Helio). El factor de forma resulta

$$F(q) = \frac{Z_B}{[1 + (q/2\alpha)^2]^2}, \quad (3.16)$$

y la sección eficaz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mZ_P Z_B}{2\alpha^2} \right)^2 \frac{[2 + (|\mathbf{p} - \mathbf{k}|/2\alpha)^2]^2}{[1 + (|\mathbf{p} - \mathbf{k}|/2\alpha)^2]^4}. \quad (3.17)$$

Esta aproximación es válida mientras $p/m \gg Z_B Z_P$, o si el proyectil es un electrón $p \gg Z_B$. En términos de energía tenemos

$$E_e \gg 15 Z_B^2 \text{ eV}. \quad (3.18)$$

En la figura 3.2 vemos cómo para la colisión $e + \text{He}$ el acuerdo de la teoría con los resultados experimentales mejora al aumentar la energía. Las discrepancias que se observan hacia adelante y hacia atrás serán explicadas más adelante.

¹N. F. Mott y H. S. W. Massey, *Theory of Atomic Collisions*, pag. 122 (Oxford University Press, Oxford, 1933).

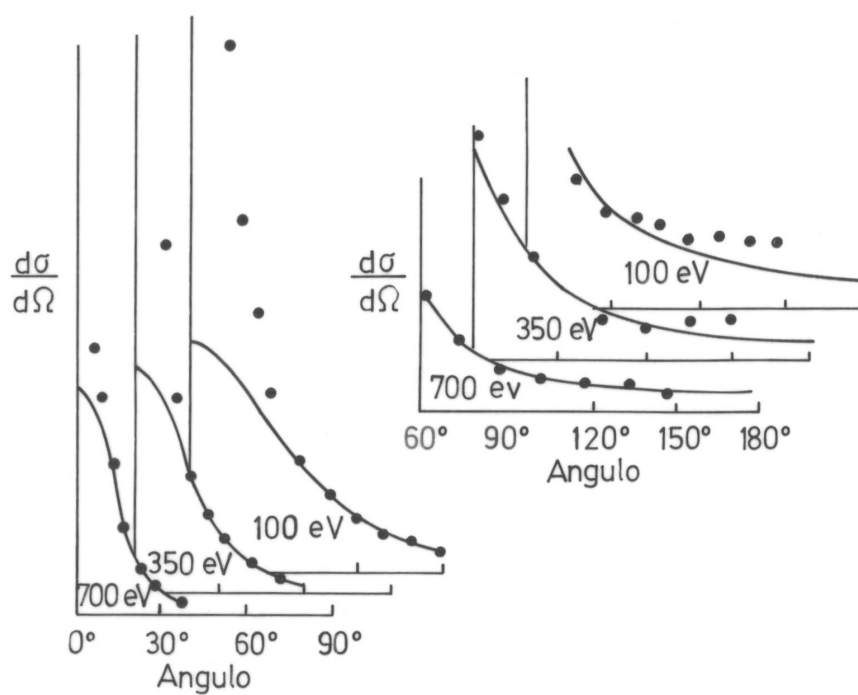


Figura 3.2: Sección eficaz diferencial para la colisión elástica de electrones con Helio¹, (●) datos experimentales, (—) Primera aproximación de Born.

Capítulo 4

Colisiones de baja energía

4.1 Desarrollo en ondas parciales

Podemos desarrollar el estado estacionario de dispersión en polinomios de Legendre,

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} + \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{pr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^{\ell} \psi_{\ell p}(r) P_{\ell}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) , \quad (4.1)$$

donde las funciones de onda $\psi_{\ell p}(r)$ verifican la ecuación de Schrödinger radial

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} - 2mV(r) + p^2 \right] \psi_{\ell p}(r) = 0 , \quad (4.2)$$

con la condición $\psi_{\ell p}(0) = 0$ y la normalización

$$\int_0^{\infty} \psi_{\ell p'}^*(r) \psi_{\ell p}(r) dr = \frac{\pi}{2} \delta(p' - p) . \quad (4.3)$$

Reemplazando el desarrollo en ondas parciales de $|\mathbf{p} + \rangle$ en la matriz de transición, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | T(E_p + i\varepsilon) | \mathbf{p} \rangle &= \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{p} + \rangle = \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{m} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) f_{\ell}(p) P_{\ell}(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) , \end{aligned} \quad (4.4)$$

con

$$f_{\ell}(p) = -\frac{2m}{p^2} \int_0^{\infty} \psi_{\ell}^o(pr) V(r) \psi_{\ell p}(r) dr , \quad (4.5)$$

donde

$$\psi_\ell^o(z) = \sqrt{z\pi/2} J_{\ell+\frac{1}{2}}(z) \quad (4.6)$$

son las funciones de Ricatti–Bessel, solución de la ecuación de Schrödinger radial en ausencia de interacción. Es decir que $\psi_{\ell p}(r) = \psi_\ell^o(pr)$ para $V(r) = 0$.

Finalmente, si reemplazamos este desarrollo en la sección eficaz e integramos sobre el ángulo resulta

$$\sigma(p) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) |f_\ell(p)|^2 . \quad (4.7)$$

A partir del teorema óptico,

$$Im \langle \mathbf{p} | T | \mathbf{p} \rangle = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{p}{2m} \sigma(p) , \quad (4.8)$$

vemos que $Im(f_\ell(p)) = p |f_\ell(p)|^2$, por lo cual la amplitud de onda parcial debe ser de la forma

$$f_\ell(p) = \frac{1}{p} e^{i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell , \quad (4.9)$$

con $\delta_\ell(p)$ una cantidad real llamada *desfasaje*.

La importancia del desarrollo en ondas parciales radica en que, tal como veremos, a bajas energías sólo algunas fases δ_ℓ son significativamente distintas de cero. Esto permite truncar el desarrollo, obteniendo una solución aproximada de la matriz de transición que, a diferencia del desarrollo de Born, es automáticamente consistente con el teorema óptico.

La forma más directa de calcular la matriz de transición (o sea, de hallar los desfasajes δ_ℓ) es en base a la forma asintótica de los estados estacionarios. Reemplazando la onda plana y la matriz de transición en la forma asintótica

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} + \rangle \simeq \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} - (2\pi)^2 m \langle p\hat{r} | V | \mathbf{p} + \rangle \frac{e^{ipr}}{r} \right] \quad (4.10)$$

por sus correspondientes desarrollos en ondas parciales, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} + \rangle &\simeq \\ &\simeq \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{pr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \left[i^\ell \psi_\ell^o(pr) + e^{i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell e^{ipr} \right] P_\ell(\hat{k} \cdot \hat{p}) , \end{aligned} \quad (4.11)$$

por lo cual

$$\psi_{\ell p}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \psi_\ell^o(pr) + \text{sen} \delta_\ell e^{i(pr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)} , \quad (4.12)$$

o, si reemplazamos por su forma asintótica $\psi_\ell^o(pr) \simeq \text{sen}(pr - \ell\pi/2)$,

$$\psi_{\ell p}(r) \longrightarrow_{r \rightarrow \infty} e^{i\delta_\ell} \text{sen}(pr - \ell\pi/2 + \delta_\ell). \quad (4.13)$$

Esta expresión da una manera de calcular los desfases resolviendo la ecuación de Schrödinger radial (con la condición de que la solución se anule en $r = 0$) y tomando el límite asintótico para despejar δ_ℓ .

4.2 Corrección de la primera aproximación de Born

Si el potencial es muy débil la función de onda radial $\psi_{\ell p}$ se aproxima a la solución de onda libre ψ_ℓ^o y ello se refleja en que el desfase δ_ℓ lo hace a algún múltiplo entero de π . Pero si esto es así, la parte imaginaria de $f_\ell(p) = \frac{1}{p} e^{i\delta_\ell} \text{sen}\delta_\ell$ es despreciable frente a su parte real y por lo tanto la aproximación de Born que reemplaza f_ℓ por un valor real,

$$f_\ell^1(p) = -\frac{2m}{p^2} \int_0^\infty \psi_\ell^o(pr) V(r) \psi_\ell^o(pr) dr, \quad (4.14)$$

no ha de violar significativamente la condición de unitariedad dada por el teorema óptico. Entonces, y a partir de la ecuación de Schrödinger para $\psi_{\ell p}$, vemos que –tal como ya sabíamos– la aproximación de Born $\psi_{\ell p}(r) \simeq \psi_\ell^o(pr)$ es válida cuando el potencial es débil comparado con la energía. Pero ahora vemos, además, que esto también es cierto para momentos angulares ℓ altos. Este último resultado es fácil de entender, pues cuando mayor es ℓ más repulsiva es la barrera centrífuga y menor es la probabilidad de que la partícula penetre en la zona donde el potencial $V(r)$ es apreciable. O sea que si a es el alcance del potencial, el desfase será próximo a cero para $E_p \ll \ell^2/2ma^2$ es decir para $\ell \gg pa$. Esto nos indica que una manera de mejorar la aproximación de Born consiste en corregir las ondas parciales de bajo momento angular $\ell < \ell_o \simeq pa$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | T(E_p + i\varepsilon) | \mathbf{p} \rangle &\approx \\ &\approx \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{p} \rangle - \frac{1}{(2\pi)^2 m} \sum_{\ell=0}^{\ell_o} (2\ell + 1) [f_\ell(p) - f_\ell^1(p)] P_\ell(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{p}}). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Para ángulos grandes el primer orden de Born decrece fuertemente y esta corrección (que, en particular para $\ell = 0$, no depende del ángulo) es dominante.

4.3 Propiedades de la amplitud de onda parcial

Para p pequeño podemos reemplazar en

$$f_\ell(p) = -\frac{2m}{p^2} \int_0^\infty \psi_\ell^o(pr) V(r) \psi_{\ell p}(r) dr \quad (4.16)$$

tanto $\psi_\ell^o(pr)$ como $\psi_{\ell p}(r)$ por sus límites de baja energía, ambos proporcionales a $p^{\ell+1}$, con lo cual ¹

$$f_\ell(p) \xrightarrow{p \rightarrow 0} -a_\ell p^{2\ell}, \quad (4.17)$$

o, equivalentemente,

$$\delta_\ell(p) \xrightarrow{p \rightarrow 0} -a_\ell p^{2\ell+1} \text{ mod}(\pi), \quad (4.18)$$

donde a_ℓ es una constante, necesariamente real, llamada *longitud de scattering*. Vemos entonces que a bajas energías todas las amplitudes de onda parcial, excepto la correspondiente a la onda s , tienden a cero, y tanto más rápido cuando mayor es ℓ . Esto justifica el interés práctico del método de ondas parciales, pues indica que a bajas energías sólo es necesario calcular algunos pocos términos del desarrollo.

En general la indeterminación en módulo π de los desfases suele eliminarse exigiendo arbitrariamente que $\delta_\ell(\infty) = 0$. Con esta condición puede demostrarse (teorema de Levinson) que $\delta_\ell(0) = n_\ell \pi$, con n_ℓ el número de estados ligados de momento ℓ .

En las figuras 4.1 y 4.2 mostramos los desfases δ_ℓ y las secciones eficaces parciales

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{p^2} (2\ell + 1) \text{sen}^2 \delta_\ell \quad (4.19)$$

para un pozo cuadrado de radio a y profundidad $V_o = 12/ma^2$. Esta profundidad es tal que el potencial puede ligar dos estados con $\ell = 0$, uno con $\ell = 1$ y otro con $\ell = 2$. Por lo tanto, y de acuerdo con el teorema de Levinson, a bajas energías $\delta_0 \simeq 2\pi - a_0 p$, $\delta_1 \simeq \pi - a_1 p^3$, $\delta_2 \simeq \pi - a_2 p^5$ y $\delta_3 \simeq -a_3 p^7$.

Todas las secciones eficaces se anulan en $p = 0$, excepto $\sigma_0(0) = 4\pi a_0^2$. Además, como el comportamiento de δ_ℓ a bajas energías es más *plano* cuando mayor es ℓ , ocurre que para $0 \leq pa \leq 1$ σ_0 domina la sección eficaz total, mientras que para $1 \leq pa \leq 2$ lo hace $\sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2$. Por último, la sección eficaz σ_3 presenta una resonancia que estudiaremos en el próximo capítulo.

¹Este resultado es válido si el potencial está exponencialmente acotado. Si $V(r) = O(1/r^\nu)$ para $r \rightarrow \infty$, entonces la expresión dada en el texto para el límite de baja energía de $f_\ell(p)$ sigue siendo válida, excepto cuando $\ell > \frac{\nu-3}{2}$, en cuyo caso $f_\ell(p) = O(p^{\nu-3})$.

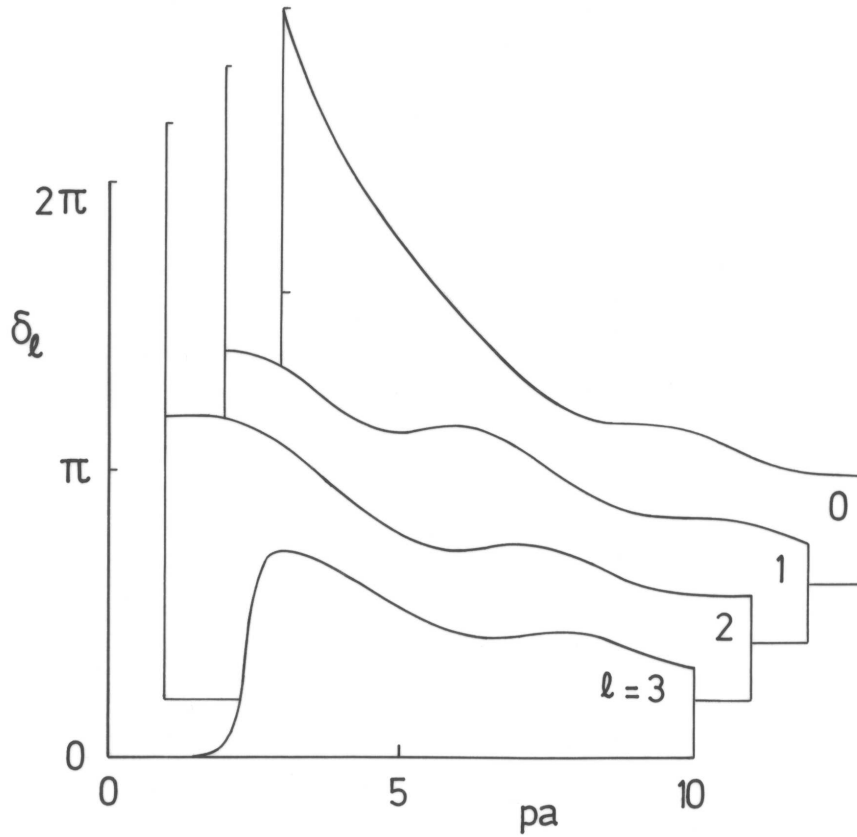


Figura 4.1: Desfasajes $\delta_\ell(p)$ para un pozo cuadrado central de radio a y profundidad $V_o = 12/ma^2$.

En $pa = 2.8$ el desfasaje δ_0 cruza π y la sección eficaz σ_0 se anula. En otras palabras, a esta energía el potencial no tiene efecto sobre la onda s . Con algunos potenciales esto puede ocurrir dentro de la región $pa < 1$ donde el resto de las secciones eficaces parciales σ_ℓ con $\ell > 0$ son despreciables y, por lo tanto, no habrá ninguna dispersión apreciable a esa energía. Esto explica el famoso efecto Ramsauer – Townsend, donde se ve que algunos gases son transparentes a los electrones de cierta energía particular, tal como se muestra en la figura 4.3.

²H. S. W. Massey y E. H. S. Burhop, *Electronic and Ionic Impact Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1952).

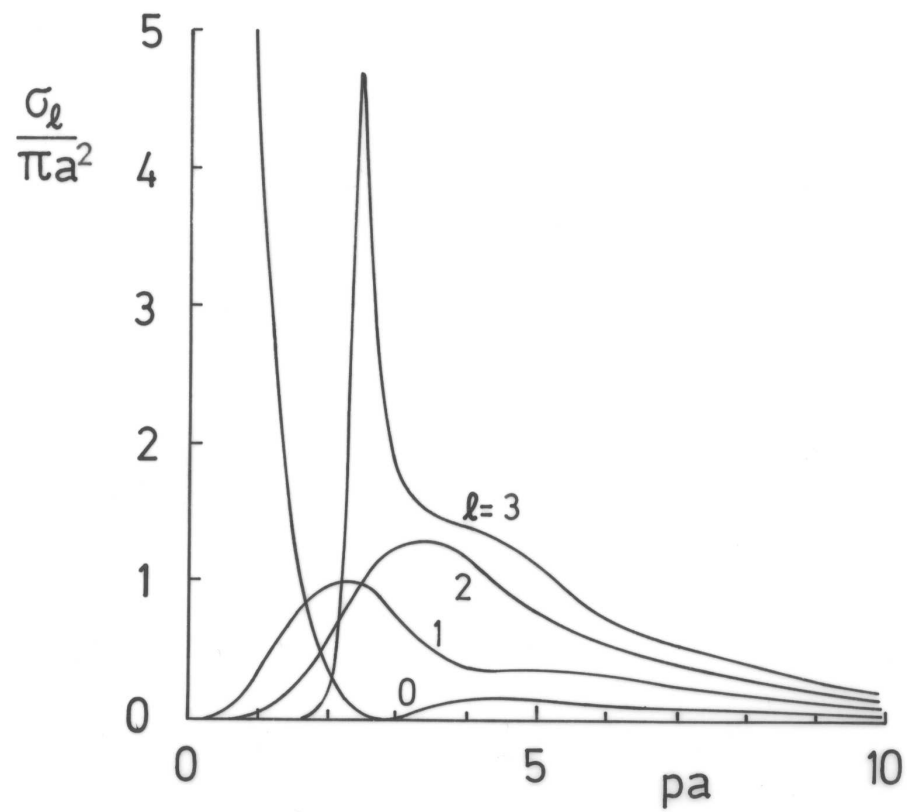
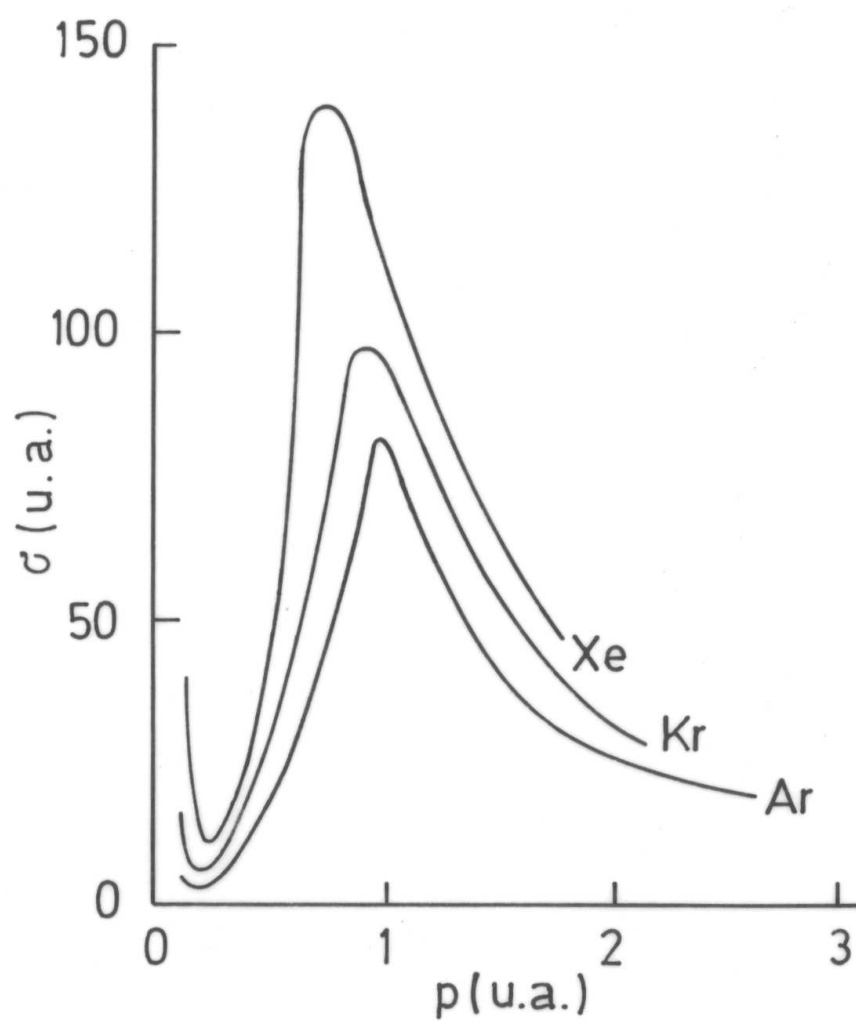


Figura 4.2: Secciones eficaces parciales $\sigma_\ell(p)$ para un pozo cuadrado central de radio a y profundidad $V_o = 12/ma^2$.

Figura 4.3: Sección eficaz total para la colisión de electrones contra gases nobles.²

Capítulo 5

Resonancias

5.1 La función de Jost

Introducimos otra solución $\phi_{\ell p}(r)$ de la ecuación de Schrödinger radial que difiere de $\psi_{\ell p}(r)$ en su normalización. Mientras que para $\psi_{\ell p}(r)$ pedíamos que $\psi_{\ell p}(0) = 0$ y

$$\int_0^\infty \psi_{\ell p'}^*(r) \psi_{\ell p}(r) dr = \frac{\pi}{2} \delta(p' - p) , \quad (5.1)$$

a esta nueva función le exigimos que, para $r \rightarrow 0$,

$$\phi_{\ell p}(r) \simeq \psi_{\ell}^o(r) . \quad (5.2)$$

Estas funciones $\phi_{\ell p}(r)$ deben ser reales, ya que lo son la ecuación y la condición de contorno, y proporcionales a las funciones de onda radiales normalizadas

$$\phi_{\ell p}(r) = F_{\ell}(p) \psi_{\ell p}(r) , \quad (5.3)$$

donde el coeficiente de proporcionalidad $F_{\ell}(p)$ se denomina función de Jost. Puede demostrarse que $F_{\ell}^*(p) = F_{\ell}(-p)$. Además, en el límite asintótico

$$\phi_{\ell p}(r) \simeq F_{\ell}(p) e^{i \delta_{\ell}} \text{sen} (pr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell}) , \quad (5.4)$$

y, por lo tanto, como $\phi_{\ell p}(r)$ es real, la función de Jost debe verificar que

$$F_{\ell}(p) = |F_{\ell}(p)| e^{-i\delta_{\ell}(p)} , \quad (5.5)$$

en módulo π

5.2 Ceros de la función de Jost y estados ligados

Reescribimos el límite asintótico de $\phi_{\ell p}(r)$ como

$$\phi_{\ell p} \simeq \frac{i}{2} \left[F_{\ell}(p) e^{-i(pr - \ell\pi/2)} - F_{\ell}(-p) e^{i(pr - \ell\pi/2)} \right] , \quad (5.6)$$

y continuamos analíticamente $F_\ell(p)$ al plano complejo. Supongamos ahora que $F_\ell(p)$ tiene un cero en algún punto $p_o = i\alpha$ del semieje imaginario positivo. Entonces

$$\phi_{\ell p_o} \simeq -\frac{i}{2} F_\ell(-i\alpha) e^{-\alpha r - i\ell\pi/2}, \quad (5.7)$$

tiende a cero para $r \rightarrow \infty$ y, por lo tanto, representa una solución normalizable de la ecuación de Schrödinger con momento angular ℓ y energía negativa $-\alpha^2/2m$. Es decir que es un estado ligado. Vemos entonces que existe una relación entre los ceros de la función de Jost en el semieje imaginario positivo y estados ligados.

Supongamos ahora que multiplicamos al potencial por un parámetro de acoplamiento λ . Si a partir de $\lambda = 1$ disminuimos este parámetro, la capacidad del potencial para mantener estados ligados disminuye y los ceros de $F_\ell(p)$ se mueven hacia el origen. Puede demostrarse que, cuando $\ell = 0$, los ceros cruzan el origen y se meten en el semiplano inferior siguiendo el eje imaginario. Estos ceros ya no representan estados ligados y se los llama "estados virtuales". Cuando $\ell > 0$, en cambio, por cada cero en el eje imaginario positivo hay otro en el eje imaginario negativo y ambos alcanzan el origen para el mismo valor de λ . Si se sigue disminuyendo λ , estos ceros se separan del origen moviéndose tangencialmente al eje real, dentro del semiplano inferior. Por motivos que veremos enseguida, al cero de la derecha se lo denomina resonante.

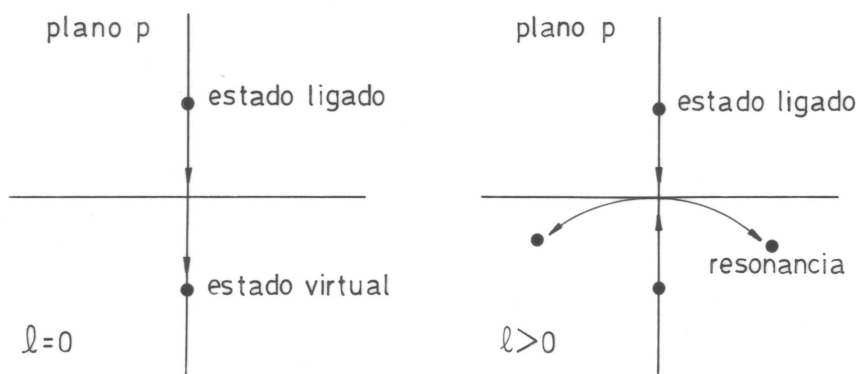


Figura 5.1: Transformación de un estado ligado en un estado virtual (cuando $\ell = 0$) o en una resonancia (cuando $\ell > 0$).

5.3 Resonancias

Consideremos un cero resonante $p_o = p_R - ip_I$ de alguna función de Jost $F_\ell(p)$ con $\ell > 0$. Si p_I es suficientemente pequeño, hay un intervalo alrededor de p_R en

el eje real (zona física) donde la aproximación

$$F_\ell(p) \simeq \left. \frac{dF}{dp} \right|_{p_o} (p - p_o) \quad (5.8)$$

es válida. Usando la relación entre desfase y función de Jost obtenemos

$$\delta_\ell(p) \simeq - \arg \left. \frac{dF}{dp} \right|_{p_o} - \arg (p - p_o) . \quad (5.9)$$

Vemos que δ_ℓ aumenta en π en la vecindad de p_R , tanto más bruscamente cuando más cercano está el cero del eje real. El comportamiento de la sección eficaz parcial,

$$\sigma_\ell(p) = \frac{4\pi}{p^2} (2\ell + 1) \text{sen}^2 \delta_\ell , \quad (5.10)$$

cerca de $p = p_R$ depende del desfase de fondo $\delta_B \simeq - \arg \left. \frac{dF}{dp} \right|_{p_o}$

En la figura 5.2 mostramos cuatro posibilidades. En todas ellas se produce un brusco cambio de la sección eficaz. La primera, que corresponde a δ_B igual a un múltiplo entero de π , da lugar a un pico de forma lorentziana,

$$\sigma_\ell(p) \simeq \frac{4\pi}{p^2} (2\ell + 1) \frac{p_I^2}{(p - p_R)^2 + p_I^2} , \quad (5.11)$$

que es la conocida fórmula de Breit–Wigner. La resonancia que encontramos en el pozo cuadrado para σ_3 era justo una resonancia de este tipo. En la figura 5.3 se muestran el correspondiente desfase δ_3 y la sección eficaz parcial σ_3 para distintas profundidades.

En los tres casos correspondientes a $2ma^2V_o = 20$, 25 y 30 el potencial no puede contener ningún estado ligado con $\ell = 3$, pero hay un cero resonante de la función de Jost $F_3(p)$. Este cero produce un pico de Breit–Wigner en la sección eficaz con altura $28\pi/p_R^2$ y ancho p_I . Este pico se hace cada vez más agudo al aumentar la profundidad del pozo, hasta que el potencial puede contener un estado ligado con $\ell = 3$ y la resonancia desaparece.

Físicamente las resonancias ocurren como una captura transitoria del proyectil en un estado metaestable de energía $p_R^2/2m$ del cual es posteriormente emitido, con un decaimiento exponencial de vida media $\tau \simeq 1/\Delta E \simeq m/p_R \Delta p \simeq m/p_R p_I$.

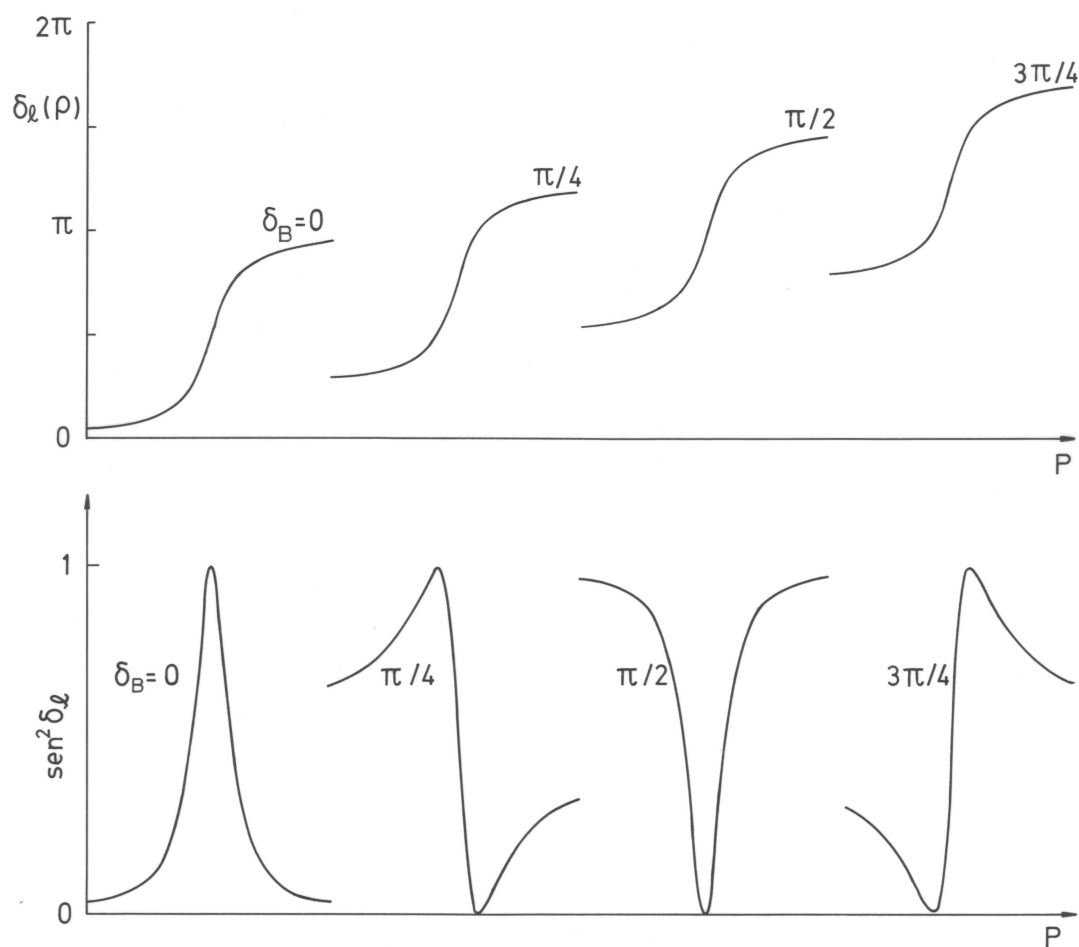


Figura 5.2: Desfasaje $\delta_\ell(p)$ y función $\text{sen}^2 \delta_\ell(p)$ (representativa del comportamiento de la sección eficaz parcial $\sigma_\ell(p) = 4\pi(2\ell + 1) \text{sen}^2 \delta_\ell / p^2$) en resonancia para distintos valores de δ_B .

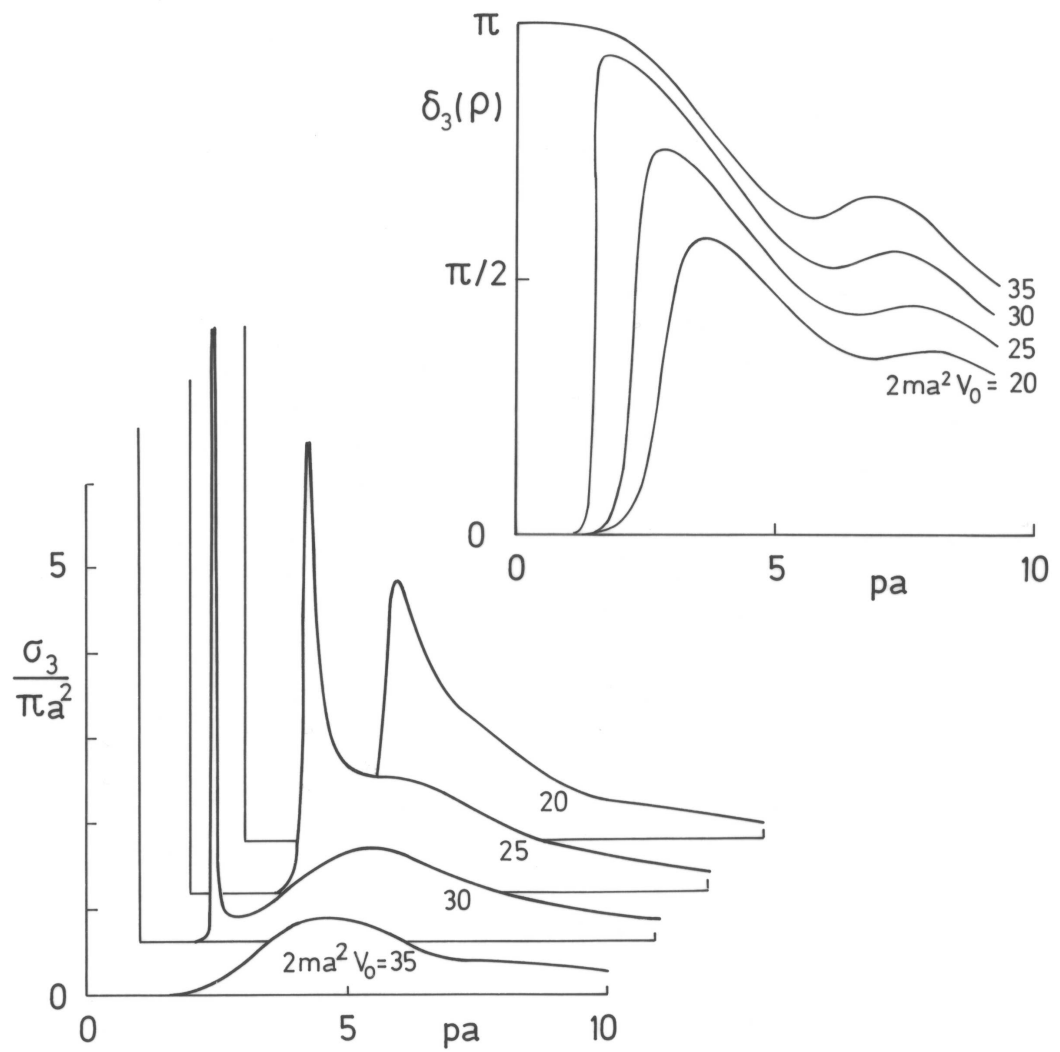


Figura 5.3: Desfasaje δ_ℓ y sección eficaz parcial σ_ℓ con $\ell = 3$ para cuatro pozos cuadrados de distintas profundidades.

5.4 Resonancia de energía cero

En la sección anterior vimos cómo los ceros de la función de Jost de momento angular $\ell > 0$ podían producir una variación brusca de la sección eficaz parcial correspondiente. Veamos ahora que ocurre cuando $\ell = 0$. En este caso sabemos que los ceros están ubicados sobre el eje imaginario. Sea entonces $p_o = i/a_o$ el cero más cercano al origen. Tenemos que, para p pequeño,

$$F_o(p) \simeq i\beta \left(p - \frac{i}{a_o} \right), \quad (5.12)$$

donde puede demostrarse que la constante β es real. De esta manera la amplitud de dispersión es

$$\begin{aligned} f_0(p) &= \frac{1}{p} e^{i\delta_0} \operatorname{sen} \delta_0 \simeq \\ &\simeq \frac{i}{p - i/a_o}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

de donde deducimos que $a_o = -f_0(0)$ es la longitud de scattering de onda s . Finalmente, reemplazando en la sección eficaz resulta

$$\begin{aligned} \sigma_0(p) &= 4\pi |f_0(p)|^2 \simeq \\ &\simeq \frac{4\pi a_o^2}{1 + p^2 a_o^2}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Vemos que la sección eficaz presenta un máximo en el origen que es tanto más agudo cuando mayor es la longitud de scattering a_o , es decir, cuando más cerca se encuentra el cero $p_o = i/a_o$ del origen. Este tipo de resonancia se denomina de *energía cero*. Es importante señalar que estos resultados son independientes de que el cero corresponda a un estado ligado ($\operatorname{Im}(p_o) > 0$) o un estado virtual ($\operatorname{Im}(p_o) < 0$). Una resonancia de este tipo se observa en el caso ya analizado del pozo cuadrado de radio a y profundidad $V_o = 12/ma^2$, donde la sección eficaz $\sigma_0(0)$ es 8.3 veces mayor que la sección geométrica. El ejemplo más conocido se da en el sistema neutrón–protón singlete donde la sección eficaz es 200 veces mayor que cualquier estimación razonable de su tamaño geométrico.

Capítulo 6

Teoría semiclásica de colisiones

6.1 Aproximación semiclásica

Volvamos al desarrollo en ondas parciales

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4p^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos\theta) \right|^2. \quad (6.1)$$

Sabemos que sólo aquellos términos con $\ell < pa$, con a el alcance del potencial, dan una contribución significativa. Sin embargo, usualmente, pa es un número muy grande, y se necesitan cien o más términos para lograr la convergencia del desarrollo. Por esto se buscan aproximaciones que lo simplifiquen. Por ejemplo, para ángulos de dispersión no muy pequeños podemos reemplazar los polinomios de Legendre por sus expresiones asintóticas

$$P_\ell(\cos\theta) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi\ell\text{sen}\theta}} \cos \left[\left(\ell + \frac{1}{2} \right) \theta - \frac{\pi}{4} \right] \quad (6.2)$$

para $\ell\text{sen}\theta \gg 1$. Además, y siempre que el desfase δ_ℓ sea una función suave de ℓ , podemos reemplazar la suma por una integral, con lo cual

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{1}{2\pi p^2 \text{sen}\theta} \left| \int_0^\infty \frac{2\ell + 1}{\sqrt{\ell}} (e^{2i\delta_\ell} - 1) \cos \left[\left(\ell + \frac{1}{2} \right) \theta - \frac{\pi}{4} \right] d\ell \right|^2. \quad (6.3)$$

Debemos tener presente que esta aproximación no es válida para ángulos pequeños, y no puede representar correctamente la contribución de las ondas parciales de bajo orden.

Vemos que el integrando está compuesto por términos fuertemente oscilantes excepto en las regiones de valores de ℓ donde alguno de los siguientes exponentes presenta una variación suave con ℓ .

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{1}{2\pi p^2 \text{sen}\theta} \left| \int_0^\infty \frac{2\ell + 1}{\sqrt{\ell}} \left[e^{i[2\delta_\ell + (\ell + \frac{1}{2})\theta - \frac{\pi}{4}]} + \right. \right. \quad (6.4)$$

$$+ \left. e^{i[2\delta_\ell - (\ell + \frac{1}{2})\theta + \frac{\pi}{4}]} - e^{i[(\ell + \frac{1}{2})\theta - \frac{\pi}{4}]} - e^{-i[(\ell + \frac{1}{2})\theta - \frac{\pi}{4}]} \right] d\ell \Big|^2 .$$

En los dos últimos términos esto ocurre para ángulos pequeños, $\theta \simeq 0$, es decir fuera de la zona de validez de la expresión anterior. En los dos primeros términos, en cambio, la condición de *fase estacionaria* es (extendemos el ángulo θ a valores negativos para eliminar la indeterminación en el signo)

$$2 \frac{\partial \delta_\ell}{\partial \ell} = \theta . \quad (6.5)$$

O sea que sólo ciertas ondas parciales ℓ_i (dadas por esta ecuación) contribuyen significativamente a la dispersión en un dado ángulo θ . Esto es análogo a lo que ocurre en la teoría clásica, donde sólo ciertas trayectorias (representadas por parámetros de impacto $\rho_i = \ell_i/p$) contribuyen a la dispersión en una dirección dada.

De hecho si para cada punto estacionario ℓ_i aproximamos

$$\delta_\ell \simeq \delta_{\ell_i} + \left. \frac{\partial \delta_\ell}{\partial \ell} \right|_{\ell_i} (\ell - \ell_i) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \delta_\ell}{\partial \ell^2} \right|_{\ell_i} (\ell - \ell_i)^2 , \quad (6.6)$$

obtenemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \left| \sum_i \sqrt{\frac{\ell_i}{p^2 \sin\theta \left. \frac{d\theta}{d\ell} \right|_{\ell_i}}} e^{i(2\delta_{\ell_i} - \ell_i\theta)} \right|^2 \quad (6.7)$$

o, en términos del parámetro de impacto $\rho_i = \ell_i/p$,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \left| \sum_i \sqrt{\frac{\rho_i}{\sin\theta} \frac{d\rho_i}{d\theta}} e^{i(2\delta_{\ell_i} - \ell_i\theta)} \right|^2 . \quad (6.8)$$

Esta expresión es idéntica a la sección eficaz clásica, excepto que ahora puede producirse un efecto de interferencia entre las distintas trayectorias que contribuyen a la dispersión en un cierto ángulo. Este es un fenómeno que ya habíamos mencionado al discutir los efectos Gloria y Arco Iris.

Tampoco tienen porqué ser similares la relación entre el ángulo de dispersión y el parámetro de impacto dada por la condición de fase estacionaria, ecuación 6.5, y la obtenida clásicamente. Sin embargo, en la aproximación semiclásica de Wentzel, Kramers y Brillouin -o aproximación WKB-, que consiste en expresar la función de onda en términos de una acción $\psi = \exp iS/\hbar$ y, reemplazando en la ecuación de Schrödinger, quedarse a primer orden en \hbar , se obtiene

$$\delta_\ell = \int_{r_o}^{\infty} [p_\ell(r) - p] dr - pr_o + \frac{\ell\pi}{2} , \quad (6.9)$$

y con ello la expresión clásica

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_o}^{\infty} \frac{\ell/r^2}{p_{\ell}(r)} dr, \quad (6.10)$$

donde r_o es un cero de

$$p_{\ell}(r) = \sqrt{p^2 - (\ell/r)^2 - 2mV(r)}. \quad (6.11)$$

6.2 Interferencia cuántica en el efecto Arco Iris

Recordemos que cuando se tiene un potencial interatómico típico, repulsivo a cortas distancias y atractivo a grandes distancias, la dependencia del ángulo de dispersión con el momento angular es, clásicamente, como se muestra en la figura 6.1.

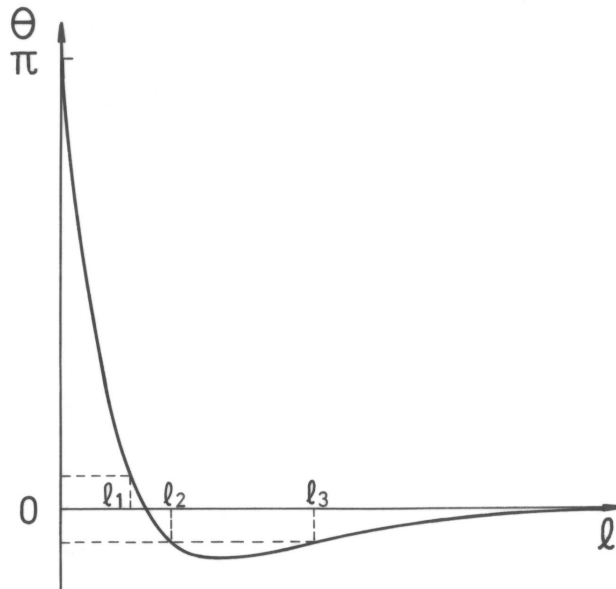


Figura 6.1: Función de deflexión clásica $\theta(\ell)$ para un potencial interatómico típico.

Utilizando la condición de fase estacionaria, ecuación 6.5, obtenemos el desfase. Los efectos de Gloria y Arco Iris –relacionados con los ceros y extremos del ángulo de deflexión, respectivamente– ahora pueden relacionarse con los extremos y puntos de inflexión del desfase.

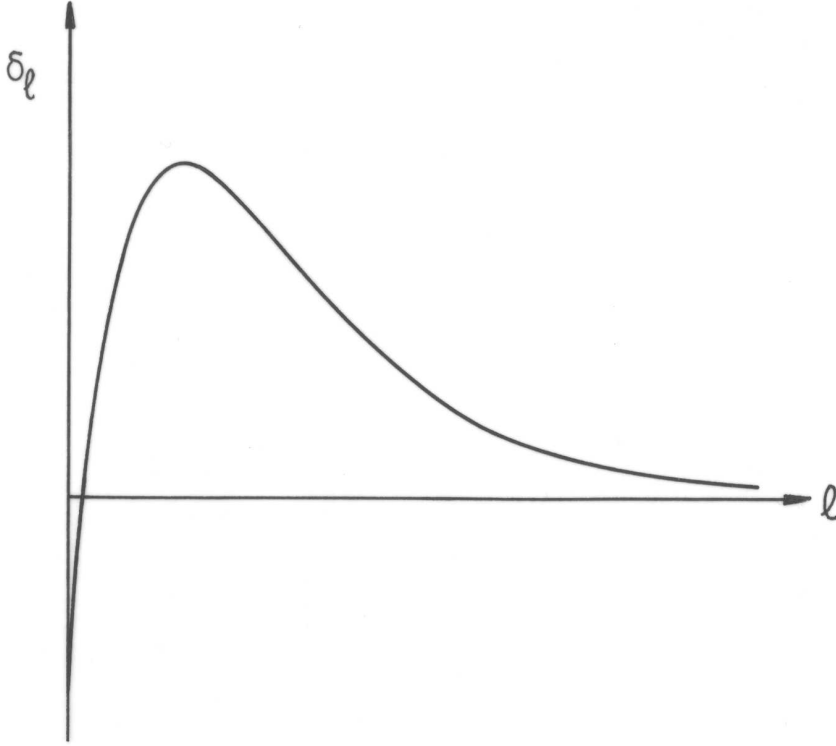


Figura 6.2: Desfase δ_ℓ obtenido a partir de la función de deflexión clásica de la figura 6.1 utilizando la condición de fase estacionaria, ecuación 6.5.

Para ángulos de dispersión mayores que el de Arco Iris, sólo hay un punto de fase estacionaria y la sección eficaz semiclassical coincide con la clásica. Para ángulos menores, en cambio, hay tres puntos estacionarios (ℓ_1 , ℓ_2 y ℓ_3 en la figura) que contribuyen a la sección eficaz

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq & \frac{1}{p^2 \sin\theta} \left| \left| \frac{\ell_1}{\frac{d\theta}{d\ell}} \right|_{\ell_1} \right|^{\frac{1}{2}} e^{i(2\delta_{\ell_1} - \ell_1\theta - \frac{\pi}{2})} + \left| \frac{\ell_2}{\frac{d\theta}{d\ell}} \right|_{\ell_2}^{\frac{1}{2}} e^{i(2\delta_{\ell_2} + \ell_2\theta)} + \\ & + \left| \frac{\ell_3}{\frac{d\theta}{d\ell}} \right|_{\ell_3}^{\frac{1}{2}} e^{i(2\delta_{\ell_3} + \ell_3\theta - \frac{\pi}{2})} \end{aligned} \quad (6.12)$$

Las oscilaciones con el ángulo de esta sección eficaz dependen básicamente de la diferencia entre las tres fases. Así tenemos dos oscilaciones de alta frecuencia $\nu = \ell_1 + \ell_2$ y $\nu = \ell_1 + \ell_3$, y otra de baja frecuencia $\nu = \ell_3 - \ell_2$ llamada de Arco Iris supernumerario. Para átomos pesados o energías altas las oscilaciones de alta frecuencia se aceleran y no pueden resolverse en experimentos típicos.

En general, el acuerdo entre las secciones eficaces cuántica y semiclásica es muy bueno, excepto en el ángulo de Arco Iris, donde la teoría cuántica no produce ninguna divergencia. En este ángulo los dos puntos estacionarios ℓ_2 y ℓ_3 coinciden y la aproximación falla. En la figura 6.3 mostramos la sección eficaz diferencial para una colisión Na + Xe de muy baja energía. El máximo de Arco Iris, la oscilación de Arco Iris supernumerario y la estructura de alta frecuencia son claramente visibles.

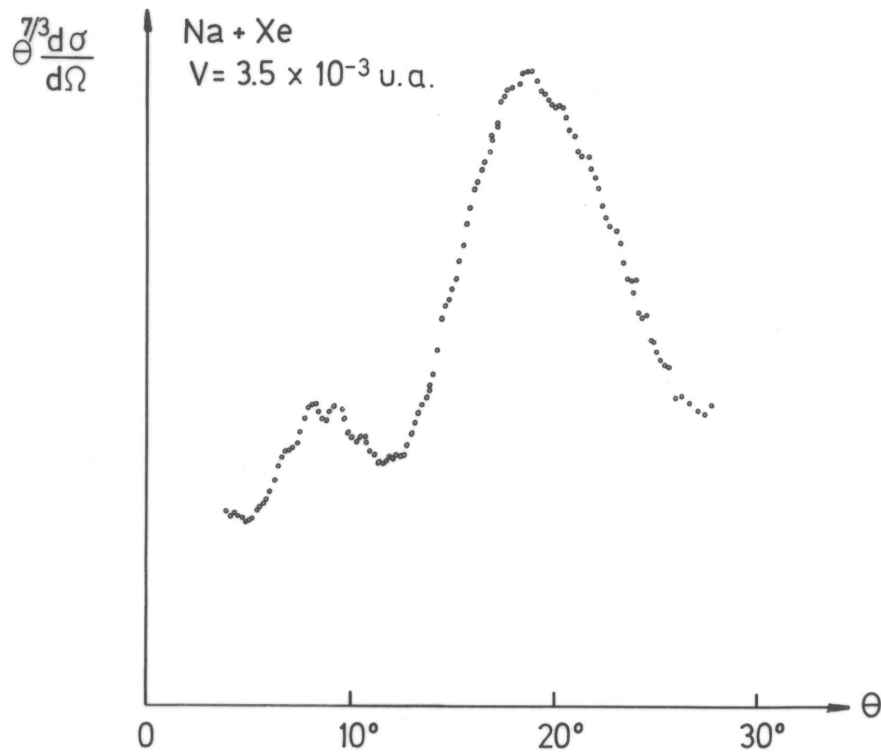


Figura 6.3: Sección eficaz diferencial para la colisión Na + Xe. ¹

¹P. Barwig, U. Buck, E. Hundhausen y H. Pauly, Z. Physik, **196**, 343 (1966).

Capítulo 7

Dispersión de partículas idénticas

7.1 Descripción de un proceso de dispersión elástica en el sistema de laboratorio

Hasta ahora hemos estudiado procesos de colisión de un proyectil contra un centro de fuerzas que permanece fijo. Aunque ésta es una buena aproximación cuando el blanco tiene mucha más masa que el proyectil, en general éste ha de retroceder por efecto de la colisión. En tal caso la colisión de una partícula de masa m_P contra otra de masa m_B inicialmente en reposo puede describirse muy simplemente en el sistema centro de masa como la dispersión por un centro de fuerzas de una partícula de masa reducida $m = m_P m_B / (m_P + m_B)$ y velocidad igual a la velocidad relativa. De esta manera el problema de colisión se reduce al caso que hemos estado describiendo hasta ahora de la colisión de una partícula por un centro de fuerzas fijo. Por conservación de impulso y energía es fácil ver que si θ es el ángulo de dispersión en el sistema centro de masa, el ángulo de dispersión del proyectil en el sistema de referencia del laboratorio, donde la partícula blanco se encuentra inicialmente en reposo es

$$\theta_P = \arctan \frac{m_B \text{sen} \theta}{m_P + m_B \text{cos} \theta} . \quad (7.1)$$

Vemos que si $m_P < m_B$ el proyectil puede ser dispersado, en principio, en cualquier dirección. En cambio si $m_P > m_B$, sólo podrá ser dispersado en un ángulo que no exceda un cierto valor máximo, $\theta_P \leq \arcsen(m_B/m_P)$. Además puede demostrarse que el átomo blanco retrocede en una dirección $\theta_B = \frac{1}{2}(\pi - \theta)$

Calculada la sección eficaz en el sistema centro de masa $d\sigma/d\Omega$, el pase al sistema de laboratorio sólo requiere cambiar θ por θ_P , o sea

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_P} = \frac{d\Omega}{d\Omega_P} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{sen}(\theta) d\theta d\phi}{\text{sen}(\theta_P) d\theta_P d\phi_P} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{sen}(\theta) d\theta}{\text{sen}(\theta_P) d\theta_P} \frac{d\sigma}{d\Omega} , \quad (7.2)$$

resultando

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_P} &= \Theta(m_B/m_P - \text{sen}\theta_P) \quad (7.3) \\ &\times \left[\frac{1 + (m_P/m_B)^2 \cos(2\theta_P)}{\sqrt{1 - (m_P/m_B)^2 \text{sen}^2(\theta_P)}} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta^+) + \Theta(m_P - m_B) \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta^-) \right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \frac{m_P}{m_B} \cos(\theta_P) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta^+) - \Theta(m_P - m_B) \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta^-) \right) \right], \end{aligned}$$

con $\Theta(x) = 1$ si $x \geq 0$ y $\Theta(x) = 0$ si $x < 0$, y donde

$$\theta^\pm = \arccos \left\{ -\frac{m_P}{m_B} \text{sen}^2(\theta_P) \pm \cos(\theta_P) \sqrt{1 - \frac{m_P^2}{m_B^2} \text{sen}^2(\theta_P)} \right\} \quad (7.4)$$

son las dos posibles soluciones de la ecuación (7.1).

Una cuenta similar muestra que el blanco es dispersado en un ángulo

$$\theta_B = \frac{1}{2}(\pi - \theta), \quad (7.5)$$

con una sección eficaz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_B} = \left| \frac{d \cos(\theta)}{d \cos(\theta_B)} \right| \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = 4 \cos\theta_B \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = \pi - 2\theta_B) \Theta(\pi/2 - \theta_B). \quad (7.6)$$

En particular, si ambas partículas tienen igual masa resulta

$$\theta_P = \frac{1}{2} \theta \quad \text{y} \quad \theta_B = \frac{1}{2} (\pi - \theta). \quad (7.7)$$

O sea que después de la colisión las partículas se mueven en direcciones que forman un ángulo recto entre ellas. Además la sección eficaz del proyectil en el sistema de laboratorio es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_P} = 4 \cos\theta_P \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = 2\theta_P) \Theta(\pi/2 - \theta_P). \quad (7.8)$$

Ahora bien, si no sólo las masas de las partículas son iguales, sino que las mismas partículas son idénticas (como ocurre, por ejemplo, en una colisión electrón-electrón ó en una colisión neutrón-neutrón), no será posible distinguir después de la colisión cuál era la partícula blanco y cuál la partícula proyectil. En este caso deberíamos sumar ambas contribuciones, resultando

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_P} = 4 \cos(\theta_P) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = 2\theta_P) + \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = \pi - 2\theta_P) \right) \Theta(\pi/2 - \theta_P). \quad (7.9)$$

Sin embargo, tal como veremos en la siguiente sección, este resultado no es correcto, ya que no está teniendo en cuenta los efectos cuánticos resultantes de la misma indistinguibilidad de ambas partículas.

7.2 Dispersión de partículas idénticas

Hay varias maneras de construir una teoría de colisiones de partículas idénticas. Por ejemplo, a través de un formalismo de segunda cuantización. Sin embargo aquí desarrollaremos un método más directo basado en la adecuada simetrización de los resultados obtenidos hasta ahora. Veamos como afecta este requerimiento a la colisión elástica de dos partículas idénticas de espín s . El estado inicial adecuadamente simetrizado es

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\mathbf{p}m_1m_2\rangle + (-1)^{2s} |-\mathbf{p}m_2m_1\rangle \right), \quad (7.10)$$

donde m_1 y m_2 son las proyecciones de espín de ambas partículas. Similarmente el estado final debe simetrizarse incorporando las contribuciones indicadas en la siguiente figura.

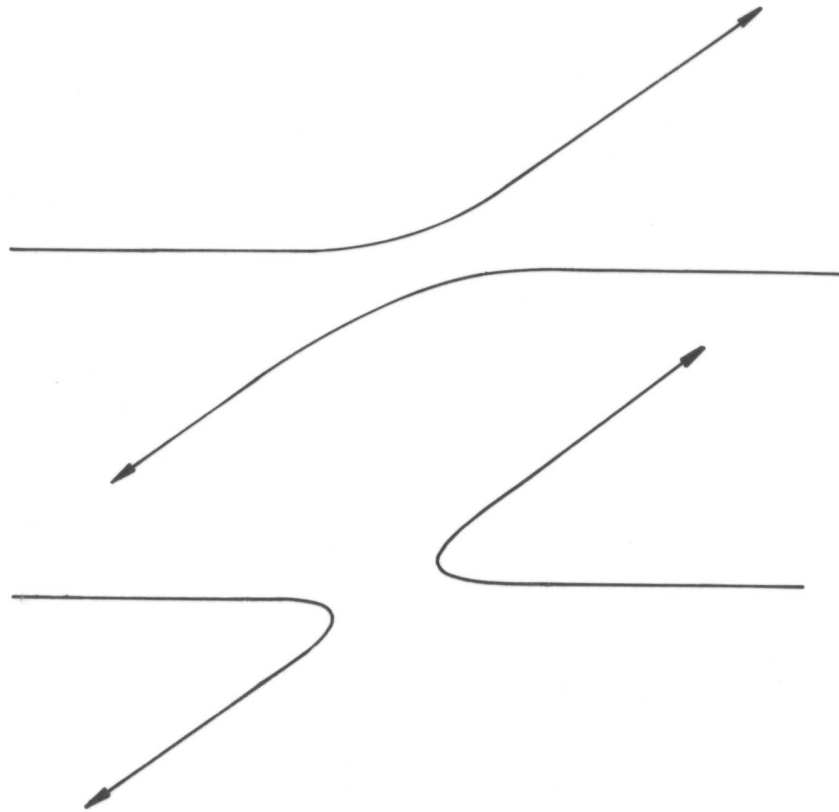


Figura 7.1: Dos procesos indistinguibles en la dispersión de partículas idénticas.

O sea que el estado asintótico adecuado es

$$|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\mathbf{k}m'_1m'_2\rangle + (-1)^{2s} |-\mathbf{k}m'_2m'_1\rangle \right). \quad (7.11)$$

Ahora la sección eficaz resulta

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= (2\pi)^4 m^2 |\langle f|T|i\rangle|^2 = \\ &= (2\pi)^4 m^2 \left| \langle \mathbf{k}m'_1m'_2|T|\mathbf{p}m_1m_2\rangle + (-1)^{2s} \langle -\mathbf{k}m'_2m'_1|T|\mathbf{p}m_1m_2\rangle \right|^2, \end{aligned} \quad (7.12)$$

donde hemos usado que $\langle \mathbf{k}m'_1m'_2|T|\mathbf{p}m_1m_2\rangle = \langle -\mathbf{k}m'_2m'_1|T|-\mathbf{p}m_2m_1\rangle$. Si la interacción no depende del espín, entonces

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 \left| \langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \delta_{m_1m'_1} \delta_{m_2m'_2} + (-1)^{2s} \langle -\mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \delta_{m_1m'_2} \delta_{m_2m'_1} \right|^2. \quad (7.13)$$

Finalmente, si los haces iniciales no están polarizados y no medimos la polarización final, obtenemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^4 m^2}{(2s+1)^2} \sum_{m_1m_2m'_1m'_2} \left| \langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \delta_{m_1m'_1} \delta_{m_2m'_2} + (-1)^{2s} \langle -\mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \delta_{m_1m'_2} \delta_{m_2m'_1} \right|^2, \quad (7.14)$$

o sea

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= (2\pi)^4 m^2 \left[|\langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle|^2 + |\langle -\mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle|^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2(-1)^{2s}}{2s+1} \text{Real} (\langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \cdot \langle -\mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle^*) \right]. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Los dos primeros términos representan el resultado clásico (7.9) que obtuvimos sumando las probabilidades para ambos procesos indistinguibles. El término de interferencia es de origen puramente cuántico.

Vamos a mostrar ahora que es posible llegar a esta misma expresión sin necesidad de trabajar explícitamente con los espines de las partículas colisionantes. Para ello ya no vamos a suponer que el estado inicial es como se indicaba en 7.10, donde cada partículas tenía individualmente una proyección de espín definida. En su lugar vamos a considerar una función de onda que es autoestado del espín total. Como usualmente el blanco y el proyectil se preparan en forma independiente, esta función de onda no representa una situación física fácilmente realizable. Sin embargo, como para llegar a la expresión 7.15 debemos promediar sobre todos los posibles estados de espín, ésto no representa una dificultad, sino todo lo contrario, ya que se simplifica mucho el análisis matemático del problema.

Recordemos que cuando la función de onda de dos partículas es autoestado del espín total se puede escribir como el producto de una parte espacial y otra de espín

$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(S, m_s)$, donde la parte espacial $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ es simétrica o antisimétrica respecto del intercambio de ambas partículas según que el espín total S sea par o impar, respectivamente. Por otro lado, si la interacción no depende del espín, podemos olvidarnos completamente de la parte espinorial y escribir

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}\rangle + (-1)^S |-\mathbf{p}\rangle) \quad (7.16)$$

$$|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{k}\rangle + (-1)^S |-\mathbf{k}\rangle) . \quad (7.17)$$

De esta manera la sección eficaz para la colisión de dos partículas de espín total S resulta

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_S = (2\pi)^4 m^2 \left| \langle \mathbf{k} | T | \mathbf{p} \rangle + (-1)^S \langle -\mathbf{k} | T | \mathbf{p} \rangle \right|^2 . \quad (7.18)$$

Finalmente, como la probabilidad de que un sistema de dos partículas de espín s tenga espín total S par es $s/(2s+1)$, y la probabilidad de que tenga espín total impar es $(s+1)/(2s+1)$, obtenemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{s}{2s+1} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S \text{ par}} + \frac{s+1}{2s+1} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S \text{ impar}} , \quad (7.19)$$

que conduce nuevamente al resultado 7.15.

En el caso de partículas de espín $s = 1/2$, esta división en estados de espín total par o impar, corresponde a los estados singlete ($S = 0$) y triplete ($S = 1$), respectivamente. La sección eficaz es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S=0} + \frac{3}{4} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S=1} . \quad (7.20)$$

Si la interacción es coulombiana $V(r) = Z/r$, reemplazando la fórmula de Rutherford 2.19 en 7.15 obtenemos la llamada fórmula de Mott

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = & \left(\frac{Z}{4E_p} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} + \right. \\ & \left. + \frac{2(-1)^{2s} \cos(n \ln(\cot^2 \theta/2))}{2s+1 \sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right] , \end{aligned} \quad (7.21)$$

con $n = Z/(p/m)$. Vemos que el término de interferencia se superpone en forma oscilatoria al resultado clásico. En particular la sección eficaz cuántica para la dispersión en ángulo recto es el doble de la clásica para partículas de espín nulo. Cuando las partículas tienen espín $1/2$, en cambio, la sección eficaz para la dispersión en ángulo recto es nula. Estos resultados ilustran el hecho de que aún

interacciones que son independientes del espín conducen a resultados que sí dependen de él.

La sección eficaz anterior puede convertirse fácilmente al sistema de laboratorio, resultando

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_P} &= \left(\frac{Z}{2E_P}\right)^2 \cos\theta_P \left[\frac{1}{\text{sen}^4\theta_P} + \frac{1}{\text{cos}^4\theta_P} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2(-1)^{2s} \cos(n \ln(\cot^2\theta_P))}{2s+1 \text{sen}^2\theta_P \text{cos}^2\theta_P} \right] \Theta(\pi/2 - \theta_P) . \end{aligned} \quad (7.22)$$

7.3 Colisión electrón - átomo

Cuando en la sección 3.4 estudiamos la dispersión elástica de partículas cargadas rápidas por átomos, no tuvimos en cuenta la posibilidad de que el proyectil fuese indistinguible respecto de alguna partícula del blanco como ocurre, por ejemplo, en una colisión electrón - átomo. En vista de lo discutido en la sección anterior resulta claro que en tal caso la colisión directa del electrón con el átomo es indistinguible de aquella donde el proyectil cambia su rol con algún electrón del blanco en lo que se denomina una *colisión de intercambio*. Realizando un análisis similar al de la sección anterior obtenemos entonces que en una colisión donde el proyectil de espín s es indistinguible respecto de n_B partículas del blanco, el elemento de matriz de transición para la dispersión elástica es la suma de dos términos

$$t = t^D + n_B(-1)^{2s}t^I , \quad (7.23)$$

donde t^D es el término directo y t^I es el término de intercambio que se refiere al proceso donde el proyectil cambia su lugar con alguna de las n_B partículas idénticas del blanco.

La sección eficaz resulta

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 \left(|t^D|^2 + n_B^2 |t^I|^2 + 2n_B(-1)^{2s} \text{Real}(t^{D*} \cdot t^I) \right) . \quad (7.24)$$

Nuevamente los dos primeros términos representan el resultado que hubiésemos obtenido clásicamente sumando las probabilidades para ambos procesos indistinguibles. El término de interferencia es de origen puramente cuántico.

Para ilustrar estos resultados consideremos la colisión de un electrón con un átomo de carga nuclear Z_B y n_B electrones. Evaluamos el término directo t^D en la aproximación de Born considerando, tal como hicimos en la sección 3.4 que el átomo está formado por una distribución fija de carga caracterizada por una carga efectiva α obtenida variacionalmente ($\alpha = 1$ para Hidrógeno atómico, 1.69 para el Helio). Recuperamos así el resultado 3.17

$$\begin{aligned} t^D &= \langle \mathbf{k}, m'_1, m'_2 | V | \mathbf{p}, m_1, m_2 \rangle = \\ &= - \frac{Z_B}{2\pi^2} \frac{8\alpha^2 + |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2}{[4\alpha^2 + |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2]^2} \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} , \end{aligned} \quad (7.25)$$

donde las deltas en las proyecciones del espín se deben a que la interacción no depende de dichas variables.

El cálculo del término de intercambio t^I en la aproximación de Born requiere algunos cuidados adicionales, ya que ahora no se puede despreciar ningún orden en la interacción $e - Z_B$ que mantiene unido al blanco. Sin embargo el cálculo puede realizarse en el marco de una aproximación de onda distorsionada resultando¹

$$\begin{aligned} t^I &= \langle \mathbf{k}, m'_2, m'_1 | V | \mathbf{p}, m_1, m_2 \rangle = \\ &= \frac{Z_B}{2\pi^2} \frac{2\alpha^2}{p^2} \frac{8\alpha^2}{[4\alpha^2 + |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2]^2} \delta_{m_1 m'_2} \delta_{m_2 m'_1}. \end{aligned} \quad (7.26)$$

Vemos que, siendo la interacción independiente del espín, el término de intercambio es el único que puede contribuir a un proceso de cambio de espín (+ - → - +) a través de un mecanismo donde el proyectil cambia su lugar con un electrón del blanco con espín opuesto.

A altas energías el término de intercambio es menor que el término directo en una cantidad del orden de $2\alpha^2/p^2$. Esto nos indica que, en la dispersión elástica de electrones rápidos por átomos, es posible despreciar la contribución del término de intercambio para energías suficientemente altas. Recuperamos así los resultados obtenidos en la sección 3.4 donde habíamos ignorado completamente la posible indistinguibilidad de las partículas interactuantes.

¹J. R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*, pag.456 (John Wiley Inc., New York, 1972).

Apéndice A

Unidades Atómicas

En física atómica se utiliza un sistema que toma como unidades básicas la masa y carga del electrón, y el radio y período orbital del estado fundamental del átomo de Hidrógeno.

masa	$1 \text{ u.a.} = m$	masa del electrón
carga	$1 \text{ u.a.} = e$	carga del electrón
longitud	$1 \text{ u.a.} = a_o = \hbar^2/mc^2$	radio de Bohr
tiempo	$1 \text{ u.a.} = a_o/c$	

Las unidades derivadas más utilizadas son

$$\begin{aligned} \text{velocidad} \quad 1 \text{ u.a.} &= \alpha c = e^2/\hbar \\ \text{energía} \quad 1 \text{ u.a.} &= 2 Ry = me^4/\hbar^2 \end{aligned}$$

donde $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137.036$ es la constante de estructura fina, y el Rydberg Ry es la energía de ligadura del estado fundamental del átomo de Hidrógeno, $1 Ry = 13.6058eV$.

En la siguiente tabla se indican algunas de las constantes más utilizadas en física atómica:

	unidades atómicas		
\hbar	1	1.05459×10^{-27} erg.seg	
h	2π	6.6262×10^{-27} erg.seg	
m	1	9.1095×10^{-28} gr	
e	1	1.60219×10^{-19} C	
a_o	1	5.29177×10^{-9} cm	5.29177×10^{-1} Å
Ry	1/2	2.1799×10^{-11} erg	13.6058eV
$M(\text{protón})$	1836.152	1.67261×10^{-24} gr	
c	137.036	2.997925×10^{10} cm/seg	

En general, la energía se mide en términos de una unidad denominada “electron - voltio”, eV . Esta es la energía adquirida por un electrón acelerado en un

campo electrostático de un voltio de intensidad. La transformación a velocidad en unidades atómicas es simple en el caso de electrones:

$$v \approx \sqrt{\frac{E}{13.6eV}} .$$

Para un ion de “número de masa A ” se tiene que

$$v \approx \sqrt{\frac{E/A}{25keV}} .$$

Apéndice B

Teorema óptico

Definimos el operador de “scattering” S , de elementos $\langle \mathbf{k}|S|\mathbf{p}\rangle = \langle \mathbf{k} - |\mathbf{p}+\rangle$, de manera tal que

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}|S|\mathbf{p}\rangle &= \langle \mathbf{k}|1 + VG(E_k + i\varepsilon)|\mathbf{p}+\rangle = \\ &= \langle \mathbf{k}|\mathbf{p}+\rangle + \frac{1}{E_k - E_p + i\varepsilon} \langle \mathbf{k}|V|\mathbf{p}+\rangle ,\end{aligned}\quad (\text{B.1})$$

donde hemos aprovechado el hecho de que $|\mathbf{p}+\rangle$ es autoestado del Hamiltoniano total. Aplicamos ahora la ecuación de Lippmann – Schwinger

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}|S|\mathbf{p}\rangle &= \langle \mathbf{k}|\mathbf{p}\rangle + \langle \mathbf{k}|G_o(E_p + i\varepsilon)V|\mathbf{p}+\rangle + \frac{1}{E_k - E_p + i\varepsilon} \langle \mathbf{k}|V|\mathbf{p}+\rangle = \\ &= \langle \mathbf{k}|\mathbf{p}\rangle + \left[\frac{1}{E_p - E_k + i\varepsilon} + \frac{1}{E_k - E_p + i\varepsilon} \right] \langle \mathbf{k}|V|\mathbf{p}+\rangle .\end{aligned}\quad (\text{B.2})$$

El término entre corchetes es una representación de la delta de Dirac $-2\pi i\delta(E_p - E_k)$ con lo cual resulta

$$\langle \mathbf{k}|S|\mathbf{p}\rangle = \langle \mathbf{k}|\mathbf{p}\rangle - 2\pi i \langle \mathbf{k}|V|\mathbf{p}+\rangle \delta(E_p - E_k) .\quad (\text{B.3})$$

Puede demostrarse que el operador S es unitario. Por lo tanto, utilizando el resultado anterior,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}|\mathbf{p}\rangle &= \langle \mathbf{k}|S^\dagger S|\mathbf{p}\rangle = \int \langle \mathbf{k}|S^\dagger|\mathbf{q}\rangle d\mathbf{q} \langle \mathbf{q}|S|\mathbf{p}\rangle \\ &= \langle \mathbf{k}|\mathbf{p}\rangle + 4\pi\delta(E_k - E_p) \text{Im}\langle \mathbf{k}|T(E_k + i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle \\ &\quad + 4\pi^2\delta(E_k - E_p) \int \langle \mathbf{k}|T(E_k - i\varepsilon)|\mathbf{q}\rangle d\mathbf{q} \delta(E_q - E_p) \langle \mathbf{q}|T(E_p + i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle .\end{aligned}\quad (\text{B.4})$$

Despejando la delta de Dirac y tomando $\mathbf{k} = \mathbf{p}$ resulta

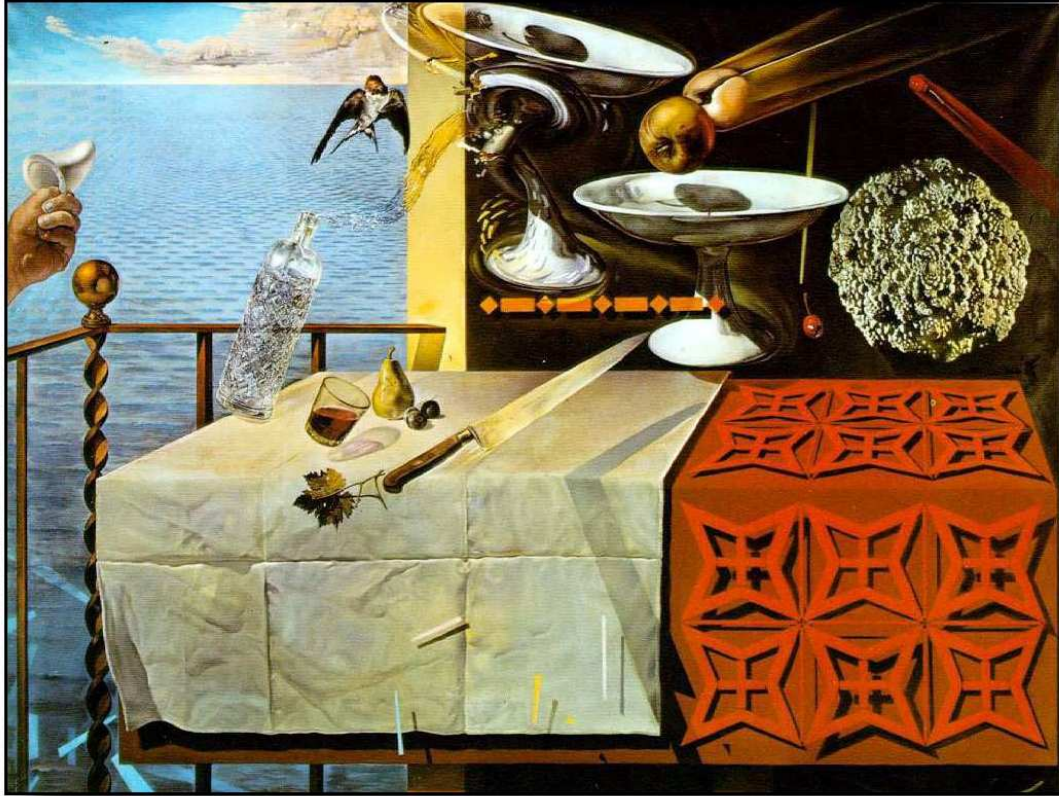
$$\begin{aligned}\text{Im}\langle \mathbf{p}|T(E_p + i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle &= -\pi \int |\langle \mathbf{q}|T(E_p + i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle|^2 \delta(E_q - E_p) d\mathbf{q} = \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{p}{2m} \int \frac{d\sigma}{d\mathbf{q}} d\mathbf{q} .\end{aligned}\quad (\text{B.5})$$

Bibliografía

- [1] **R. O. Barrachina y V. H. Ponce**, *Teoría de Colisiones* (Universidad de Alicante, España, 1994).
- [2] **B. H. Bransden**, *Atomic Collision Theory* (W. A. Benjamin Inc., New York, 1970).
- [3] **H. A. Bethe y R. W. Jackiw**, *Intermediate Quantum Mechanics* (Benjamin / Cummings Publishing Company, Reading, 1968).
- [4] **C. J. Joachain**, *Quantum Collision Theory* (North Holland, Amsterdam, 1975).
- [5] **H. Massey**, *Atomic and Molecular Collisions* (Taylor & Francis Ltd., London, 1979).
- [6] **N. F. Mott y H. S. W. Massey**, *Theory of Atomic Collisions* (Oxford University Press, Oxford, 1ra. edición 1933, 3ra. edición 1965).
- [7] **R. G. Newton**, *Scattering Theory of Waves and Particles* (McGraw-Hill Book Co., New York, 1966).
- [8] **J. R. Taylor**, *Scattering Theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions* (John Wiley & Sons Inc., New York, 1972).

Índice

Arco Iris, efecto	7	laboratorio, sistema de referencia del	39
interferencia cuántica en el efecto	35	Levinson, teorema de	22
supernumerario	37	Lippmann-Schwinger, ecuación de	10, 13
Born, corrección de la primera aproximación de	21	metaestable, estado	30
primera aproximación de	13	Mott, fórmula de	43
segunda aproximación de	15	óptico, teorema	14, 49
serie de	13	órbitas, ecuación de las	3
centro de masa, sistema de referencia de	39	parcial, amplitud de onda	20
coulombiana, dispersión	11	parciales, desarrollo en ondas	19
deflexión, función de	6	Ramsauer – Townsend, efecto	23
desfasaje	20	regular, función de onda	27
dispersión, estados estacionarios de	10	resonancia	28
elástica, dispersión elástica por átomos	15	resonancia de energía cero	32
electron - átomo, colisión	44	Rutherford, fórmula de	5
estacionaria, condición de fase	34	scattering, longitud de	22
forma, factor de forma atómico	16	sección eficaz clásica	2
Gloria, efecto	7	sección eficaz cuántica, definición	11
Green, operador de	9	semiclásica, aproximación	33
operador libre de	9	supernumerario, arco iris	37
Helio, colisión e + He	16	virtual, estado	28
idénticas, dispersión de partículas	41	WKB, aproximación	34
intercambio, colisión de	44	Yukawa, potencial de	15
Jost, ceros de la función de	27		
función de	27		



Salvador Dalí: *Natura morte, vivente* (1956).