

Estructura de la materia 3

TEMA 2 REPASO

ESTADOS DEL CONTINUO DE UN ELECTRON.

TEORIA DE SCATTERING

J. E. Miraglia

*Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas
y Naturales. Universidad de Buenos Aires. Argentina.*

(Dated: January 18, 2018)

Abstract

ESTADOS DEL CONTINUO. Espacio de coordenadas. Relación con la onda plana. Estado de continuo para el potencial Culombiano. Ecuación de Lippman Schwinger en el espacio de los momentos. Comportamiento a grandes distancias. Condiciones entrantes y salientes. El estado continuo y su relación con la sección eficaz de scattering.

MATERIAL ADICIONAL .

Comportamiento a grandes distancias del potencial Culombiano. Condiciones entrantes y salientes para el potencial Culombiano. La amplitud de scattering del potencial Coulombiano. Sección eficaz diferencial de Rutherford.

APENDICE 1. Integrales de Nordsieck. Integrales que contienen dos continuos. Integrales que contienen un sólo continuo. Integrales de Nordsieck en una dimensión.

APENDICE 2. Integrales de Feynman.

APENDICE 3. Integral básica de la teoría de scattering.

Falta: incluir figuras. Corregir español, acentos, incluir referencias. Incluir Dirac?

PACS numbers:

I. ESTADOS DEL CONTINUO

Nuestro objetivo en este capítulo es resolver el hamiltoniano correspondiente a un electrón el potencial $V(\vec{r})$

$$H\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi = E\Psi \quad (1)$$

para energías positivas ($E > 0$)

A. Espacio de coordenadas

Hasta ahora hemos tratado con estados ligados que son bien conocidos en los cursos elementales de cuántica. Ahora estudiaremos los estados del continuo que resultan fundamental para tratar el movimiento. Los estados ligados son a la Química como el continuo es a la Física. Recordemos que cuando expresamos la unidad en términos de los estados hidrogénicos, escribimos

$$1 = \sum_{nlm} |\Psi_{nlm}\rangle \langle \Psi_{nlm}| + \int d\vec{k} |\Psi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle \langle \Psi_{\vec{k}}^{\pm}|, \quad (2)$$

donde $\Psi_{\vec{k}}^{\pm}$ son los estados del continuo que aquí veremos. Trabajaremos en unidades atómicas.

El continuo no está discretizado. No presenta el problema de los estados ligados, en el sentido que la energía aquí se conoce (porque termina midiéndose en forma de energía cinética en el detector experimental directa o indirectamente). Es positiva y resulta ser

$$E_k = \frac{k^2}{2\mu} \quad (3)$$

que corresponde al autovalor de la función $\Psi_{\vec{k}}^{\pm}$. Luego veremos lo que significa el signo \pm . Debemos recordar que los estados del continuo se normaliza a la delta de Dirac **y no** a la de Kronecker, o sea

$$\langle \Psi_{\vec{k}}^{\pm} | \Psi_{\vec{k}'}^{\pm} \rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (4)$$

Para el caso del potencial central, $V(\vec{r}) = V(r)$, la forma de encontrar los estados del continuo sigue la misma estructura que la de los ligados. Se propone

$$\Psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) = \sum_{lm} R_{kl}^{\pm}(r) Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k}), \quad (5)$$

y la condición (4) impone la normalización

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{kl}^\pm(r) R_{k'l}^\pm(r) = \delta(k - k') \quad (6)$$

Haciendo, como siempre,

$$R_{kl}^\pm(r) = i^{\mp l} \frac{u_{kl}(r)}{r}, \quad \text{con} \quad k \in [0, \infty] \quad (7)$$

El $i^{\mp l}$ será el responsable de la condición saliente o entrante. La función $u_{kl}(r)$ satisface, la misma ecuación que la del estado ligado

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{k^2}{2} \right] u_{kl}(r) = 0. \quad (8)$$

Como $V(r) \rightarrow 0$, cuando $r \rightarrow \infty$, la solución de (9) resulta ser las funciones de Bessel esféricas, cuyo límite asintótico es

$$u_{kl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l), \quad (9)$$

A la cantidad $\delta_l = \delta_l(k)$ se lo llama desfase y tiene en cuenta el efecto de $V(r)$.

Estas ecuaciones son válidas si $V(r)$ en el infinito tiende mas rapidamente a cero que el potencial Coulombiano! A partir de δ_l se determina la sección eficaz diferencial vista en cuántica

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| \sum_l f_l(k) (2l+1) P_l(\cos \theta) \right|^2, \quad \text{con} \quad (10)$$

$$f_l(k) = -\frac{1 - \exp(2i\delta_l)}{2i k} = \frac{\exp(i\delta_l)}{k} \sin(\delta_l) = \frac{1}{k (\cot \delta_l - i)}, \quad (11)$$

con lo que la sección eficaz total resulta

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1)^2 \sin^2(\delta_l). \quad (12)$$

Que es la forma en que se la calcula, y de allí la importancia de la determinación del desfase δ_l . Hay un excelente diagrama debido a Argendaud donde se visualiza graficamente los límites.

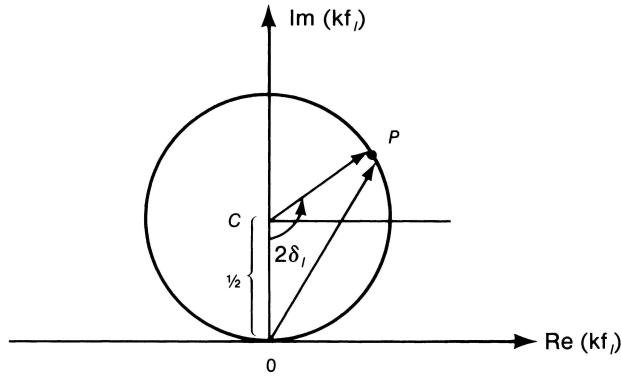


FIGURE 7.6. Argand diagram for $k f_l$. OP is the magnitude of $k f_l$, while CO and CP are each radii of length $\frac{1}{2}$ on the unitary circle; angle $OCP = 2\delta_l$.

FIG. 1:

B. Teorema optico

De aquí hay una forma muy facil de verificar el teorema óptico y es partiendo de la Eq.(10) y calcularla en la dirección hacia adelante $\hat{k}' \uparrow \hat{k}$, o sea $\theta = 0$,

$$\begin{aligned} f(0) &= \sum_l f_l(k)(2l+1) \underbrace{P_l(1)}_1 = \sum_l f_l(k)(2l+1), \\ &= \sum_l \underbrace{\frac{\exp(i\delta_l)}{k}}_{f_l(k)} \sin(\delta_l)(2l+1), \end{aligned} \quad (13)$$

tomando la parte imaginaria

$$\begin{aligned} \text{Im}[f(0)] &= \frac{1}{k} \sum_l \underbrace{\sin^2(\delta_l)(2l+1)}_{\frac{k^2 \sigma}{4\pi}}, \\ \text{Im}[f(0)] &= \frac{k}{4\pi} \sigma = \frac{k}{4\pi} \sigma_{total}, \end{aligned} \quad (14)$$

que es la famosa expresion válida para un potencial central.

C. Relación con la onda Plana

En el caso de no tener potencial, $V(r) = 0$, obviamente no hay estados ligados y la unidad se escribe

$$1 = \int d\vec{k} |\psi_{\vec{k}}\rangle \langle \psi_{\vec{k}}|. \quad (15)$$

La ecuación (8) se reduce

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{k^2}{2} \right] u_{kl}^0(r) = 0. \quad (16)$$

Usamos el supraindice 0 para denotar que es estado libre . Usando el factor i^{+l} , tenemos

$$R_{kl}^0(r) = i^l \frac{u_{kl}^0(r)}{r} = i^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} i^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (17)$$

que comparado con (9) no introduce obviamente ningun desfase ($\delta_l = 0$). Sumando sobre lm según (5) llegamos a la conocida onda plana

$$\sum_{lm} R_{kl}^0(r) Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k}) = \sum_{lm} \overbrace{\sqrt{\frac{2}{\pi}} i^l j_l(kr) Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k})}^{R_{kl}^0(r)} \quad (18)$$

$$= \frac{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (19)$$

De haber usado i^{-l} habríamos llegado a $\psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) = \psi_{-\vec{k}}(\vec{r})$ que es también solución. Las ondas planas son una base que nos permite representar el continuo y los estados ligados. $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ es una razonable aproximación al continuo $\Psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ (no siempre!), sólo cuando $k \rightarrow \infty$.

D. Estado del continuo para el potencial Culombiano

Acá haremos un atajo que nos ayudará mucho: pasaremos directamente de $R_{nl}(r)$ a $R_{kl}^{\pm}(r)$. Recordemos la solución de los estados ligados para el potencial Culombiano

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \exp(-\rho/2) \rho^l {}_1F_1(-n+l+1; 2l+2; \rho) \quad (20)$$

$$N_{nl} = \sqrt{\left(\frac{2Z}{n}\right)^3 \frac{(n+l)!}{(2l+1)!^2 2n (n-l-1)!}} \quad y \quad (21)$$

$$\rho = 2Zr/n. \quad y \quad E_{nl} = E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \quad (22)$$

Si comparamos las energías de los estados ligados del electrón (μ =masa reducida=1) con la del continuo, resulta

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \equiv \frac{k^2}{2} \implies n \equiv \pm i \frac{Z}{k} \quad (23)$$

Tomemos el signo positivo por las razones que expondremos posteriormente. Generalizemos al campo complejo las ecuaciones obtenidas para los estados ligados según la regla dada por la Eq.(23)

$$n \rightarrow +i\frac{Z}{k} = ia \quad \text{con} \quad a = Z/k, \quad \text{parametro de Sommerfeld} \quad (24)$$

$$\rho = \frac{2Z}{n}r \rightarrow \frac{2Z}{(iZ/k)}r = -2ikr, \quad (25)$$

$$\exp(-\rho/2) \rightarrow \exp(+ikr), \quad (26)$$

$$\rho^l \rightarrow (-2ikr)^l = (-i)^l (2kr)^l. \quad (27)$$

Incluyendo estas transformaciones en la solución del estado ligado, la función del continuo nos queda

$$R_{kl}(r) = N_{al} (2kr)^l \exp(ikr) {}_1F_1(-ia + l + 1; 2l + 2; -2ikr) \quad (28)$$

donde ponemos en $N_{al} = N(a, l)$ todas las otras magnitudes que no dependen de r y lo interpretamos como una constante de normalización que se puede calcular via la normalizacion con la delta de Dirac (4). Con la ayuda de las integrales de Nordsieck en una dimensión (ver Apendice, hay que hacerla con muchisimo cuidado!),

$$\int_0^\infty dr \, r^2 R_{kl}^\pm(r) R_{k'l}^\pm(r) = \delta(k - k'), \quad (29)$$

así determinamos N_{al} . El resultado final es

$$R_{kl}^\pm(r) = i^{\mp l} \exp(\pm i\sigma_l) R_{kl}(r), \quad (30)$$

$$\sigma_l = \arg\{\Gamma(1 + l - ia)\}, \quad (31)$$

$R_{kl}(r)$ es real y vale,

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &= k \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(a\pi/2) |\Gamma(1 + l - ia)| \frac{1}{(2l + 1)!}, \\ &\times (2kr)^l \exp(ikr) {}_1F_1(-ia + l + 1; 2l + 2; -2ikr). \end{aligned} \quad (32)$$

El signo \pm se entenderá cuando se vea funciones entrantes y salientes. Aunque luce complejo, el término $\exp(ikr) {}_1F_1(-ia + l + 1; 2l + 1; -2ikr)$, es real. Se prueba usando la regla de Kummer de las funciones hipergeométricas (ver Apendice), que nos dice

$$\begin{aligned} &\exp(ikr) {}_1F_1(-ia + l + 1; 2l + 2; -2ikr) \\ &= \exp(-ikr) {}_1F_1(+ia + l + 1; 2l + 2; +2ikr). \end{aligned} \quad (33)$$

Si un número es igual a su conjugado: es real, con lo cual $R_{kl}(r)$ es real. Además el término de la izquierda es el que hubiesemos obtenido si hubieramos elegido $n \equiv -iZ/k$ en lugar de $n \equiv iZ/k$.

Es facil ver que la función radial $R_{kl}(r)$ satisface la condición de Kato. Efectivamente haciendo un desarrollo para $l = 0$, salvo una constante independiente de r

$$\begin{aligned} \exp(ikr) {}_1F_1(-ia + 1; 2; -2ikr) &\simeq (1 + ikr + \dots) \left(1 + \frac{(-ia + 1)}{2} (-2ikr) + \dots \right) \\ &\simeq (1 + ikr) (1 - (-ia + 1) (ikr) + \dots) \end{aligned} \quad (34)$$

$$\simeq (1 + ikr) (1 + ia(ikr) - ikr) + \dots \quad (35)$$

$$\simeq 1 - akr + \mathcal{O}(r^2) = 1 - Zr + \mathcal{O}(r^2) \quad (36)$$

que es precisamente la condicion de Kato.

La función ${}_1F_1(-ia + l + 1; 2l + 1; -2ikr)$ ya no es más un polinomio finito como en los estados ligados, sino que es una serie infinita.

Verifiquemos que si $Z = 0$, no tenemos potencial y por lo tanto deberíamos obtener el estado libre, o sea la la onda plana. En efecto, si $Z = 0$, entonces $a = 0$, $\sigma_l = 0$, $\Gamma(1 + l) = l!$, entonces

$$R_{kl}^{\pm}(r)|_{Z=0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{i^{\mp l} l!}{(2l + 1)!} (2kr)^l \underbrace{[\exp(ikr) {}_1F_1(l + 1; 2l + 1; -2ikr)]}_{\text{Bessel esférica}}, \quad (37)$$

el término en [...] esta relacionado con la Bessel esférica, con lo que llegamos a $R_{kl}^0(r)$ dado por ecuación (17) que es la solución de la onda plana; lo que era obvio.

De la misma manera que llegamos a la onda plana, podriamos sumar la serie \sum_{lm} para el caso del potencial culombiano según (5) [es una pedantería. No se puede. Se llega por otros caminos (digamos la solución de Schroedinger en coordenadas parabólicas)] y obtendríamos

$$\Psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) = \sum_{lm} R_{kl}^{\pm}(r) Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k}) \quad (38)$$

$$\stackrel{!}{=} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) D^{\pm}(a, \vec{k} | \vec{r}), \quad (39)$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} = \text{onda plana} \quad (40)$$

$$D^{\pm}(a, \vec{k} | \vec{r}) = \exp(a\pi/2) \Gamma(1 \mp ia) {}_1F_1(\pm ia; 1; \pm ikr - i \vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (41)$$

Y esta es la función del continuo Coulombiano, tal vez la mas importante en la dinámica de los electrones. Aquí es mas evidente que si $Z = 0$, entonces $a = 0$, $D^{\pm}(0, \vec{k}, \vec{r}) = 1$, con

lo cual recuperamos la onda plana, que era lo esperado. Una propiedad muy importante es que

$$\Psi_{\vec{k}}^{-}(\vec{r}) = \left[\Psi_{-\vec{k}}^{+}(\vec{r}) \right]^* \quad (42)$$

que tiene que ver con la reversibilidad temporal, y obviamente es una propiedad de cualquier potencial.

Nos falta dar la explicación del porqué \pm . A continuación damos una interpretación matemática, luego veremos la interpretación física. Sin entrar en detalle, vamos a hacer un *mapping* que nos indica la relación: $E = k^2/2$. Veámosla en el campo complejo de k : tenemos

$$\begin{cases} k = |k| \exp(i\phi_k), & E = k^2/2 = |E| \exp(i\phi_E), & \phi_E = 2\phi_k \\ \phi_k \in [0, \pi] & \phi_E \in [0, 2\pi] & \text{hoja física} \\ \phi_k \in [\pi, 2\pi] & \phi_E \in [0, 2\pi], \text{ de más} & \text{hoja no-física} \end{cases} \quad (43)$$

El espacio $Im(k) > 0$, nos da las soluciones en la hoja física.

- Con $Re(k) > 0$ ($\phi_k = \epsilon$, $\epsilon \rightarrow 0$) tenemos la $\Psi_{\vec{k}}^{+}$,
- Con $Re(k) < 0$ ($\phi_k = \pi - \epsilon$, $\epsilon \rightarrow 0$), tenemos la $\Psi_{\vec{k}}^{-}$,
- Con $k = i\frac{Z}{n}$ ($\phi_k = i\pi$), tenemos los estados ligados, Ψ_{nlm} ,
- Con $k = -i\frac{Z}{n}$ ($\phi_k = -i\pi$) tenemos los estados no físicos (antiligantes).

Hay otros polos en el campo complejo de k . En general para cualquier potencial los polos cerca del eje real dan las llamadas resonancias.

E. Ecuación de Lippman Schwinger en el espacio de los momentos

En Cuántica se vió la teoría de perturbaciones, aplicable siempre a estados ligados. Hay una teoría de perturbaciones para el continuo, a partir de la ecuación de Lippman Schwinger. Si no hay potencial la solución es la onda plana que pasa a ser aquí el orden zero. Reciclandola podemos calcular los otros ordenes.

Recordemos que obtuvimos una expresión de la ecuación de Schrödinger en el espacio de los momentos (espacio Fourier) para estados ligados, que aca reescribimos

$$\left[E_{nl} - \frac{k^2}{2} \right] \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{u}), \quad (44)$$

Ahora hagamos la equivalencia con el continuo, haciendo:

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}_{nlm} &\rightarrow \tilde{\Psi}_{\vec{K}} \\ E_{nl} &\rightarrow E_{\vec{K}} = \frac{K^2}{2}\end{aligned}$$

entonces quedaría la solución inhomogénea

$$\left[E_{\vec{K}} - \frac{k^2}{2}\right] \tilde{\Psi}_{\vec{K}}(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \tilde{\Psi}_{\vec{K}}(\vec{u}), \quad (45)$$

$$\tilde{\Psi}_{\vec{K}}(\vec{k}) \stackrel{!}{=} \frac{1}{[E_{\vec{K}} - \frac{k^2}{2}]} \int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \tilde{\Psi}_{\vec{K}}(\vec{u}) \quad (46)$$

y $V(r)$ puede ser cualquier potencial de corto alcance. Vamos a usar a un atajo similar a la Eq.(23) en la que recurrimos al campo complejo. Ya que $E_{\vec{K}} > 0$ habra un valor de k ($k = K$) en el que el denominador se anula. Escapemos a la hoja física de Rieman en campo complejo

$$E_{\vec{K}} = \frac{K^2}{2} \rightarrow \frac{1}{2}(\pm K + i\epsilon)^2 = \frac{K^2}{2} \pm i\epsilon, \quad (47)$$

queda entonces la famosa ecuacion de Lippman Schwinger

$$\tilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{k}) = \delta(\vec{K} - \vec{k}) + \frac{1}{[E_{\vec{K}} - \frac{k^2}{2} \pm i\epsilon]} \int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \tilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{u}). \quad (48)$$

Este valor de $\pm i\epsilon$ nos sitúa siempre en la hoja de Rieman Física, anteriormente vistas y nos evita el polo en el denominador. A la ecuación (48) le sumamos la onda plana $\delta(\vec{K} - \vec{k})$ que es la solución de la ecuación homogénea. La ecuación (48) **es exacta** y es la **ecuación de Lippman Schwinger en el espacio de momentos**.

A partir de esta podemos obtener una serie perturbativa en el potencial, de modo tal que podemos escribir

$$\tilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{k}) = \tilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(0)}(\vec{q}) + \tilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(1)}(\vec{q}) + \tilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(2)}(\vec{q}) + \dots, \quad (49)$$

donde el término n-esimo $\tilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(n)}$ es proporcional a \tilde{V}^n . El primer orden es obviamente

$$\tilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(0)}(\vec{q}) = \delta(\vec{K} - \vec{k}), \quad (50)$$

$$\Psi_{\vec{K}}^{(0)}(\vec{r}) = \psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{K} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}, \quad (51)$$

o sea la onda plana. Iterando la Eq.(48) tenemos (ver Bethe)

$$\widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(n)}(\vec{k}) = \widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(0)}(\vec{q}) + \frac{1}{[E_{\vec{K}} - \frac{k^2}{2} \pm i\epsilon]} \int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \widetilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(n-1)}(\vec{u}), \quad (52)$$

$$\widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(1)}(\vec{k}) = \frac{1}{[E_{\vec{K}} - \frac{k^2}{2} \pm i\epsilon]} \frac{\widetilde{V}(\vec{k} - \vec{K})}{(2\pi)^{3/2}}, \quad (53)$$

$$\widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(2)}(\vec{k}) = \frac{1}{[E_{\vec{K}} - \frac{k^2}{2} \pm i\epsilon]} \int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \widetilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \frac{1}{[E_{\vec{K}} - \frac{u^2}{2} \pm i\epsilon]} \frac{\widetilde{V}(\vec{u} - \vec{K})}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (54)$$

Y así sucesivamente. Lo que es importante es que el primer orden $\widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(1)}(\vec{k})$ es analítico, con lo cual es de muchísima ayuda en procesos que involucran altas energías, por ejemplo: scattering elásticos e inelásticos, Bremsstrahlung, Compton, efectos radiativos etc. Y lo vamos a usar seguido cuando veamos interacción con la radiación. Las integrales del tipo (54) se resuelven con la técnica de Feynman (ver Apéndice). El tercer orden ya se complica. El hecho que $\widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm(1)}(\vec{k}) \propto \widetilde{V}(\vec{k} - \vec{K})$ es casi mágico: permite reducir algunas expresiones autoconsistentemente

F. Ecuación de Lippman Schwinger en el espacio de coordenadas

Vamos a calcular como es la expresión de cualquier estado del continuo a grandes distancias para **cualquier potencial de corto alcance**. Para el caso del potencial Culombiano es mas complejo porque aparecen fases logarítmicas y lo corremos para el apéndice. Haciendo la antitransformada de (48) resulta que

$$\overbrace{\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})} \widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{k}) = \overbrace{\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})} \left[\delta(\vec{K} - \vec{k}) + \frac{1}{[E_{\vec{K}} - \frac{k^2}{2} \pm i\epsilon]} \int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \widetilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{u}) \right] \quad (55)$$

Usando el teorema de convolución

$$\int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \widetilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \widetilde{\Psi}_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{u}) = \int \frac{d\vec{r}'}{(2\pi)^{3/2}} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}'] V(\vec{r}') \Psi_{nlm}(\vec{r}') \quad (56)$$

la transformación (55) nos queda

$$\Psi_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{K} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} + \int \frac{d\vec{r}'}{(2\pi)^{3/2}} I(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{r}'). \quad (57)$$

$$I(\vec{r} - \vec{r}') = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp[i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] }{[E_{\vec{K}} - \frac{k^2}{2} \pm i\epsilon]}, \quad (58)$$

$I(\vec{r} - \vec{r}')$ puede resolver en forma analítica (ver apéndice)

$$I(\vec{r} - \vec{r}') = -2 \frac{2\pi^2}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(\pm iK |\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

quedando entonces

$$\Psi_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{r}) = \psi_{\vec{K}}(\vec{r}) - \frac{1}{2\pi} \int d\vec{r}' \frac{\exp(\pm iK |\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(r') \Psi_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{r}'). \quad (59)$$

Y esta ecuación es exacta y es la ecuación de Lippman Schwinger en el espacio de coordenadas.

G. Comportamiento a grandes distancias

Ahora hagamos el límite para $|r| \rightarrow \infty$

$$\frac{\exp(\pm iK |\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \xrightarrow{|r| \rightarrow \infty} \frac{\exp(\pm iKr \mp i(K \hat{r}) \cdot \vec{r}' \pm \dots)}{r}. \quad (60)$$

Llamando

$$\vec{K}' = K \hat{r} = \text{momento de salida del electrón}, \quad (61)$$

queda

$$\frac{\exp(\pm iKr \mp i(K \hat{r}) \cdot \vec{r}')}{r} = \frac{\exp(\pm iKr)}{r} \exp(\mp i\vec{K}' \cdot \vec{r}') = (2\pi)^{3/2} \frac{\exp(\pm iKr)}{r} \psi_{\vec{K}'}^{\pm}(\vec{r}'). \quad (62)$$

Sigamos con el signo +

$$\Psi_{\vec{K}}^{+}(\vec{r}) \xrightarrow{|r| \rightarrow \infty} \psi_{\vec{K}}(\vec{r}) - \frac{1}{2\pi} (2\pi)^{3/2} \frac{\exp(\pm iKr)}{r} \underbrace{\int d\vec{r}' \psi_{\vec{K}'}^{*}(\vec{r}') V(r') \Psi_{\vec{K}}^{+}(\vec{r}')}_{\langle \psi_{\vec{K}'} | V | \Psi_{\vec{K}}^{+} \rangle}, \quad (63)$$

$$= \psi_{\vec{K}}(\vec{r}) + \frac{f(\theta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(\pm iKr)}{r}, \quad (64)$$

$$f(\theta) = -(2\pi)^2 \langle \psi_{\vec{K}'} | V | \Psi_{\vec{K}}^{+} \rangle. \quad (65)$$

con $\cos(\theta) = \hat{K} \cdot \hat{K}'$. Al término $\langle \psi_{\vec{K}'} | V | \Psi_{\vec{K}}^{+} \rangle$ se lo llama **matriz de transición**. Con el signo - hubiesemos llegado al elemento de matriz de transición $\langle \Psi_{\vec{K}}^{-} | V | \psi_{\vec{K}'} \rangle$, que resulta ser el mismo *on-the energy-shell*.

H. Condiciones entrantes y salientes

De la expresión (63) podemos separar la onda en dos términos

$$\Psi_{\vec{k}}^+ \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \underbrace{\psi_{\vec{K}}(\vec{r})}_{\Psi_{\vec{k}}^{+ \text{ in}}} + \underbrace{\left(\frac{f_c(\theta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(ikr)}{r} \right)}_{\Psi_{\vec{k}}^{+ \text{ out}}} \quad (66)$$

Via paquetes de onda, se puede ver que $\Psi_{\vec{k}}^{+ \text{ in}}$ es una **onda plana entrante** (asociada a tiempos negativos) y $\Psi_{\vec{k}}^{+ \text{ out}}$ es una **onda esférica saliente** (asociada a tiempos positivos), por esa razón se la llama entrante. Usando la propiedad de reversibilidad temporal $\Psi_{\vec{k}}^-(\vec{r}) = [\Psi_{-\vec{k}}^+(\vec{r})]^*$, resulta que

$$\Psi_{\vec{k}}^- \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \underbrace{\psi_{\vec{K}}(\vec{r})}_{\Psi_{\vec{k}}^{- \text{ out}}} + \underbrace{\left(\frac{f_c^*(\theta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(-ikr)}{r} \right)}_{\Psi_{\vec{k}}^{- \text{ in}}} \quad (67)$$

Cuya interpretación es exactamente lo contrario. $\Psi_{\vec{k}}^{- \text{ in}}$ es una **onda esférica entrante** (asociada a tiempos negativos) y $\Psi_{\vec{k}}^{- \text{ out}}$ es una **onda plana saliente** (asociada a tiempos positivos), por esa razón se la llama saliente. Para el coulombiano que dejamos para el apéndice, aparecen factores de la forma $\exp\{-ia \ln(kr \pm \vec{k} \cdot \vec{r})\}$ y $\exp\{ia \ln(2kr)\}$. Esto es debido al largo rango del potencial. El concepto matemático y físico de entrante y saliente se ve haciendo un desarrollo temporal de la función de onda con **paquetes de onda**, que aquí evitamos por razones de tiempo. Lo mas importante en este aspecto es el desarrollo temporal -lo que vimos hasta ahora es la solución estacionaria. La solución dependiente del tiempo se escribe

$$\Phi_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{b}|\vec{r}, t) = \int d\vec{k} \tilde{a}(\vec{K}|\vec{k}) \Psi_{\vec{k}}^{\pm}(r) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{b} - it k^2/2) \quad (68)$$

\vec{b} es el parámetro de impacto y $\tilde{a}(\vec{K}|\vec{k})$ es la amplitud del paquete picado alrededor de $\vec{k} = \vec{K}$, normalizado $\int d\vec{k} \tilde{a}^*(\vec{K}|\vec{k}) \tilde{a}(\vec{K}|\vec{k}) = 1$. La densidad $\rho_{\vec{K}}(\vec{b}|\vec{r}, t) = |\Phi_{\vec{K}}(\vec{b}|\vec{r}, t)|^2$ describe las ondas entrantes y salientes

I. El estado continuo y su relación con la sección eficaz de scattering

Repasemos. Para potenciales, mas débiles que el Culombiano , vale el siguientes límite

$$\Psi_{\vec{K}}^{\pm}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \underbrace{\psi_{\vec{K}}(\vec{r})}_{in} + \underbrace{\frac{f(\theta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(\pm iKr)}{r}}_{out}, \quad (69)$$

$$f(\theta) = -(2\pi)^2 \langle \psi_{\vec{K}'} | V | \Psi_{\vec{K}}^+ \rangle. \quad (70)$$

con $\psi_{\vec{K}'}$ es la onda plana saliente, $\Psi_{\vec{K}}^+$ es la funcion **exacta** entrante, $\langle \psi_{\vec{K}'} | V | \Psi_{\vec{K}}^+ \rangle$ es la matriz de transición y $f_c(\theta)$ es la amplitud de scattering. Vamos a probar que la sección eficaz diferencial resulta ser

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2, \quad (71)$$

con $\cos(\theta) = \hat{K} \cdot \hat{K}'$.

Dada las ecuaciones anteriores, podemos calcular la sección eficaz diferencial. La definimos así: corriente saliente dividido por corriente entrante

$$d\sigma = \frac{di_{out}}{di_{in}}. \quad (72)$$

Recordemos que (como en electricidad)

$$i = \int \vec{J} \cdot d\vec{a} = \int \vec{J} \cdot \hat{n} da \quad \Rightarrow \quad di = \vec{J} \cdot \hat{n} da \quad (73)$$

donde \vec{J} es el flujo. Expresando el flujo de las partículas salientes a un determinado ángulo por unidades de área normalizado al flujo entrante por unidad de area. Debemos hacer

$$d\sigma = \frac{di_{out}}{di_{in}} = \frac{\overrightarrow{J}_{out} \cdot \overbrace{\hat{k}'}^{\hat{n}_{out}} \overbrace{r^2 d\Omega}^{da}}{\overrightarrow{J}_{in} \cdot \underbrace{\hat{k}}_{\hat{n}_{in}} \underbrace{1}_{da}}. \quad (74)$$

Aquí es importante notar que el detector no acepta ninguna componente del flujo entrante (esto esta asociado con el concepto del paquetes de onda y su relación con el teorema óptico).

En el caso particular del potencial Culombiano las fases logarítmicas ($\exp\{-ia \ln(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})\}$ ni $\exp\{ia \ln(2kr)\}$) introducen flujo a grandes distancias. El flujo incidente es, por

definición (recordar mecánica cuántica).

$$\vec{J}^+ = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi_k^{+*} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi_k^+ - \psi_k^+ \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi_k^{+*} \right), \quad (75)$$

en el pasado remoto tomo,

$$\Psi_k^+ \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \Psi_k^{+in} = \psi_k^+ = \frac{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} \quad (76)$$

$$\vec{J}_{in} = \frac{\hbar}{2mi} \psi_k^{+*} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi_k^+ - \psi_k^+ \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi_k^{+*} = \frac{\hbar \vec{k}}{(2\pi)^3 m}. \quad (77)$$

El flujo saliente es

$$\vec{J}_{out} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\phi_{k'}^{+*} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \phi_{k'}^+ - \phi_{k'}^+ \vec{\nabla}_{\vec{r}} \phi_{k'}^{+*} \right), \quad (78)$$

en el futuro lejano tomo,

$$\Psi_{k'}^+ \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \Psi_{k'}^{+out} = \phi_{k'}^+ = \frac{f(\theta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(+ikr)}{r} \quad \text{sabiendo que,} \quad (79)$$

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\exp(+ikr)}{r} = ik \hat{r} \frac{\exp(+ikr)}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) = i \vec{k}' \frac{\exp(+ikr)}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right), \quad (80)$$

donde hemos usado (61), o sea $\vec{k}' = k \hat{r}$ ($t \rightarrow \infty$). Luego $k' = k$ (ojo $\hat{k}' \neq \hat{k}$), entonces

$$\vec{J}_{out} = \frac{|f(\theta)|^2}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \vec{k}'}{m r^2}. \quad (81)$$

Reemplazando en (74),

$$d\sigma = \frac{\overbrace{\frac{|f(\theta)|^2 \hbar \vec{k}'}{(2\pi)^3 m r^2}}^{\vec{J}_{out}} \cdot \hat{k}' r^2 d\Omega}{\underbrace{\frac{\hbar \vec{k}}{(2\pi)^3 m}}_{\vec{J}_{in}} \cdot \hat{k}} \quad (82)$$

$$= |f(\theta)|^2 \frac{k'}{k} d\Omega \quad \text{sabiendo que } k = k' \text{ (caso elástico)} \quad (83)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2, \quad (84)$$

que es lo que usamos siempre. La sección eficaz total es obviamente

$$\sigma = \int d\Omega |f(\theta)|^2 \quad (85)$$

Y esta es la base de la teoría de scattering no relativista. desde bajas energías (térmicas) hasta altas energías (con aceleradores) para diferentes potenciales centrales (Rutherford, potenciales nucleares, Moleculares, Yukawa, etc). .

II. SIGUE MATERIAL ADICIONAL.

A. Comportamiento a grandes distancias del potencial Culombiano

En estos apartados seguiremos los mismo lineamientos pero nos restringiremos al caso sui generis del potencial Culombiano. Veremos las similitudes y diferencias

Calculemos ahora el comportamiento a grandes distancias de Ψ_k^\pm para el caso Culombiano. Usando el limite asintótico de las hipergeométricas (ver apéndice sobre hipergeométricas visto en el tema anterior)

$${}_1F_1(ia, 1, ix) \rightarrow \frac{\exp(-a\pi/2)}{\Gamma(1-ia)} \exp\{-ia \ln x\} + \frac{a \exp(-a\pi/2)}{\Gamma(1+ia)} \frac{\exp(ix)}{x} \exp\{ia \ln x\} \quad (86)$$

la función de onda del continuo Colulombiano $\Psi_k^\pm(\vec{r})$

$$\Psi_k^\pm(\vec{r}) = \underbrace{\frac{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}}_{\psi_{\vec{k}}(\vec{r})} \exp(a\pi/2) \Gamma(1-ia) {}_1F_1(\pm ia; 1; ikr - i \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (87)$$

tiende como

$$\Psi_k^\pm \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \left[\exp\{-ia \ln x\} + a \exp(2i\sigma_0) \frac{\exp(ix)}{x} \exp\{ia \ln x\} \right], \quad (88)$$

$$x = kr - \vec{k} \cdot \vec{r} > 0, \quad (89)$$

y recordemos que $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ es la onda plana y $\sigma_0 = \arg \{\Gamma(1-ia)\}$. Reemplazando resulta

$$\begin{aligned}
\Psi_{\vec{k}}^+ \xrightarrow{x \rightarrow \infty} & \frac{\overbrace{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}^{\psi_{\vec{k}}(\vec{r})}}{(2\pi)^{3/2}} \exp \left\{ -ia \ln \overbrace{(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})}^x \right\} \\
& + \underbrace{\frac{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}}_{\psi_{\vec{k}}(\vec{r})} a \exp(2i\sigma_0) \frac{\exp \left[\overbrace{i(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})}^x \right]}{\underbrace{kr - \vec{k} \cdot \vec{r}}_x} \exp \left\{ ia \ln \underbrace{(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})}_x \right\} \quad (90)
\end{aligned}$$

Escribiendo

$$x = kr - \vec{k} \cdot \vec{r} = rk(1 - \cos \theta) = 2k r \sin^2 \theta / 2, \quad (91)$$

y refinando la amplitud culombiana $f_c(\theta)$ podemos escribir

$$\Psi_{\vec{k}}^+ \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) \exp\{-ia \ln x\} + f_c(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \exp\{ia \ln(2kr)\} \right], \quad \text{con} \quad (92)$$

$$f_c(\theta) = \frac{a \exp(2i\sigma_0)}{2k \sin^2 \theta / 2} \exp\{ia \ln(\sin^2 \theta / 2)\} \quad (93)$$

B. Condiciones entrantes y salientes del potencial Culombiano

De la expresion (92) podemos separar la onda en dos términos

$$\Psi_{\vec{k}}^+ \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \Psi_{\vec{k}}^+{}^{in} + \Psi_{\vec{k}}^+{}^{out} \quad (94)$$

$$\Psi_{\vec{k}}^+{}^{in} = \frac{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} \exp\{-ia \ln(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})\} \quad (95)$$

$$\Psi_{\vec{k}}^+{}^{out} = f_c(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \exp\{ia \ln(2kr)\} \quad (96)$$

Como se ve $\Psi_{\vec{k}}^+{}^{in}$ **no es una onda plana pura entrante** (asociada a tiempos negativos), sinó que adiciona a la onda plana una fase logaritmica $\exp\{-ia \ln(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})\}$ propia del potencial Coulombiano. Y $\Psi_{\vec{k}}^+{}^{out}$ es una **onda esférica saliente** (asociada a tiempos positivos), también con la fase logarítmica $\exp\{ia \ln(2kr)\}$. Debemos notar que estas fases

logaritmicas no cambian el flujo a grandes distancias y por lo tanto no afecta a la definicion de seccion eficaz diferencial.

Usando la propiedad de reversibilidad temporal $\Psi_{\vec{k}}^{-}(\vec{r}) = \left[\Psi_{-\vec{k}}^{+}(\vec{r}) \right]^*$, $x = (kr - \vec{k} \cdot \vec{r}) \rightarrow (kr + \vec{k} \cdot \vec{r})$, y resulta que

$$\Psi_{\vec{k}}^{-} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \Psi_{\vec{k}}^{- out} + \Psi_{\vec{k}}^{- in} \quad (97)$$

$$\Psi_{\vec{k}}^{- out} = \frac{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} \exp\{+ia \ln(kr + \vec{k} \cdot \vec{r})\} \quad (98)$$

$$\Psi_{\vec{k}}^{- in} = f_c^*(\theta) \frac{\exp(-ikr)}{r} \exp\{-ia \ln(2kr)\} \quad (99)$$

Cuya interpretacion es exactamente lo contrario. $\Psi_{\vec{k}}^{- in}$ es una **onda (cuasi) esférica entrante** (asociada a tiempos negativos) y $\Psi_{\vec{k}}^{- out}$ es una **onda (cuasi) plana saliente** (asociada a tiempos positivos), por esa razon se la llama saliente. adicionando una fase logaritmica. Por **cuasi** entendemos que hay fases Coulombiana que no contribuirán al flujo En ningún potencial, excepto el culombiano, aparece $\exp\{-ia \ln(kr \pm \vec{k} \cdot \vec{r})\}$ ni $\exp\{ia \ln(2kr)\}$. Esto es debido al largo rango del potencial. El concepto matemático y físico de entrante y saliente se ve haciendo un desarrollo temporal de la función de onda con **paquetes de onda**, que aqui evitamos por razones de tiempo. Lo que resulta importante destacar es que la fases logaritmicas **no** introducen flujo adicional a grandes distancias con lo cual se puede definir segun su definicion tradicional dado por (74).

C. La amplitud de scattering del potencial Coulombiano

Para chequear que todo bien, calculemos $f_c(\theta)$ en primer orden perturbativo (llamado de Born) para el potencial Culombiano. A partir del formalismo de potenciales de corto

alcance podemos aproximar $\Psi_k^+ \simeq \psi_{\vec{k}}$, y así llegamos a la primera aproximación de Born

$$\begin{aligned}
f_c^B(\theta) &= -(2\pi)^2 \langle \psi_{\vec{k}'} | V | \psi_{\vec{k}} \rangle = (2\pi)^2 \int d\vec{r} \psi_{\vec{k}'} \left(\underbrace{-\frac{Z}{r} e^{-\epsilon r}}_{V(r)} \right) \psi_{\vec{k}} = \\
&= (2\pi)^2 \int d\vec{r} \frac{\exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{Z}{r} e^{-\epsilon r} \right) \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{Z}{(2\pi)} \frac{4\pi}{(\vec{k} - \vec{k}')^2 + \epsilon^2} \\
&= \frac{2Z}{(\vec{k} - \vec{k}')^2 + \epsilon^2} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{2Z}{k^2 + k'^2 - 2kk' \underbrace{\widehat{k} \cdot \widehat{k}'}_{\cos \theta}} \Big|_{k=k'} = \frac{Z}{k^2} \frac{1}{1 - \cos \theta} \\
&= \frac{Z}{k^2} \frac{1}{2 \sin^2 \theta / 2} = \underbrace{\frac{Z}{k}}_a \frac{1}{2 \sin^2 \theta / 2} = \frac{a}{k} \frac{1}{2 \sin^2 \theta / 2} \tag{100}
\end{aligned}$$

$$|f_c^B(\theta)|^2 = \left(\frac{a}{2k} \right)^2 \frac{1}{(\sin^2 \theta / 2)^2} \tag{101}$$

que coincide con (93) en modulo!. Recordar que el caso Culombiano incluía aparte fases logarítmicas, que las tendrán que dar los altos ordenes perturbativos.

D. Seccion eficaz diferencial de Rutherford

Para hacer un link con la mecánica clásica, en esta sección, volvamos a las unidades de MKS. Ya que a es adimensional entonces $[f_c(\theta)] = [1/k] = \text{metro}$, con lo que $[|f_c(\theta)|^2] = \text{metro}^2$, o sea seccion eficaz. En MKS, $a = Ze^2\mu/k\hbar^2$, entonces

$$f_c(\theta) = \frac{Ze^2\mu}{\hbar^2 2k^2 \sin^2 \theta / 2} \exp\{2i\sigma_0 + ia \ln(\sin^2 \theta / 2)\} \tag{102}$$

que es la expresion famosa que se encuentra en todos los libros.

Si quisieramos hacer una serie perturbativa tenemos que desarrollar simplemente $f_c(\theta) \equiv f_c(Z, \theta)$

$$f_c(\theta) = \sum_{j=1} \frac{\partial^j}{\partial Z^j} f_c(Z, \theta) \Big|_{Z=0} \frac{Z^j}{j!}. \tag{103}$$

El primer orden en Z es la primera aproximacion de Born que resulta ser

$$f_c^B(\theta) = \frac{Ze^2\mu}{(\hbar k)^2 2 \sin^2 \theta / 2}. \tag{104}$$

Con lo que podemos reconstruir $f_c(\theta)$

$$f_c(\theta) = f_c^B(\theta) \exp\{2i\sigma_0 + ia \ln(\sin \theta^2/2)\}. \quad (105)$$

La seccion eficaz es simplemente

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_c(\theta)|^2 = |f_c^B(\theta)|^2 = \frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4 \mu^2}{(\hbar k)^4 4 \sin^4 \theta/2}. \quad (106)$$

Haciendo $p = \hbar k = \sqrt{2\mu E}$, donde E es la energía incidente, tenemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma^B}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{16 E^2 \sin^4 \theta/2}, \quad (107)$$

que es la ecuación de Rutherford (lo mismo que la mecánica clásica). Como siempre la sección eficaz exacta o en primera aproximación de Born es insensible al signo de la carga Culombiana. Lo que resulta extraordinario es que el resultado exacto coincide con el primer orden perturbativo (o sea Born). Otro hecho llamativo es que el segundo orden (ec.(54)) diverge!, pero la suma infinta converge! Estos son problemas inherentes al potencial culombiano que es el mas importante (por no decir el único básico) a nivel atómico.

III. APENDICE 1. INTEGRALES DE NORDSIECK

A. Integrales que contienen dos continuos

La integral básica, diseñada para calcular el Bremsstrahlung es

$$I_1 = \int dr \exp(-zr + i\vec{q} \cdot \vec{r}) F_1 \frac{1}{r} F_2 \quad (108)$$

donde llamamos

$$F_1 = {}_1F_1(ia_1, 1, ik_1 r + k_1 r), \quad (109)$$

$$F_2 = {}_1F_1(ia_2, 1, ik_2 r + k_2 r) \quad (110)$$

La solución es

$$I_1 = \frac{4\pi}{D} A_1^{-ia_1} A_2^{-ia_2} F(x_0) \quad (111)$$

donde

$$S_j = \vec{k}_j \cdot \vec{q} - izk_j, \quad j = 1, 2, \quad S_3 = k_1 k_2 - \vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2 \quad (112)$$

$$U_j = 2S_j/D, \quad A_j = 1 + U_j, \quad j = 1, 2, 3 \quad (113)$$

$$B_j = 2(ik_j + zU_j), \quad j = 1, 2, \quad B_3 = 2zU_3, \quad (114)$$

$$D = z^2 + q^2, \quad x_0 = 1 - \frac{A_1 + A_2 - A_3}{A_1 A_2}, \quad (115)$$

$$F(x) = {}_2F_1(ia_1, ia_2, 1, x), \quad (116)$$

$$F^+(x) = {}_2F_1(1 + ia_1, 1 + ia_2, 2, x), \quad (117)$$

Otras integrales de interés son

B.

$$I_2 = \int d\vec{r} \exp(-zr + i\vec{q} \cdot \vec{r}) F_2 \vec{\nabla}_r F_1 = k_1 \vec{\nabla}_{p_1} I_1 \quad (118)$$

$$I_n = \int d\vec{r} \exp(-zr + i\vec{q} \cdot \vec{r}) F_1 r^{n-1} F_2 = (-1)^n \frac{\partial}{\partial z^n} I_1 \quad (119)$$

Integrales que contienen un sólo continuo

Para calcular la amplitud de scattering se requiere

$$K_1 = \int d\vec{r} \exp(-zr + i\vec{q} \cdot \vec{r}) F_1 \frac{1}{r} = \frac{4\pi}{D} A_1^{-ia_1} \quad (120)$$

que es simplemente $K_1 = I_1(a_2 = 0)$. Usando derivaciones paramétricas tenemos

$$K_2 = \int d\vec{r} \exp(-zr + i\vec{q} \cdot \vec{r}) \vec{\nabla}_r F_1 = k_1 \vec{\nabla}_{p_1} K_1 \quad (121)$$

$$K_n = \int d\vec{r} \exp(-zr + i\vec{q} \cdot \vec{r}) F_1 r^{n-1} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial z^n} K_1, \quad (122)$$

$$\vec{K}_v = \int d\vec{r} \exp(-zr + i\vec{q} \cdot \vec{r}) F_1 x^n = \frac{1}{i} \frac{\partial^n}{\partial z^n} K_1 \quad (123)$$

$$K_x = \int d\vec{r} \exp(-zr + i\vec{q} \cdot \vec{r}) F_1 \vec{r} = (-i)^n \nabla_{\vec{q}} K_1 \quad (124)$$

C. Integrales de Nordsieck en una dimensión

La integral del tipo

$$M = \int_0^\infty dx x^n \exp(-zx) {}_1F_1(\alpha_1, \gamma_1, k_1 x) {}_1F_1(\alpha_2, \gamma_2, k_2 x) \quad (125)$$

se pueden ver en el último Apéndice del Landau.

IV. APENDICE 2. INTEGRALES DE FEYNMAN

Consideremos la siguiente integral

$$I_{i,j,k} = \int \frac{d\vec{x}}{(x^2 + \delta^2)^i} \frac{1}{[(\vec{x} - \vec{A})^2 + \alpha^2]^j} \frac{1}{[(\vec{x} - \vec{B})^2 + \beta^2]^k} \quad (126)$$

El primer valor es

$$I_{1,1,1} = \frac{\pi^2}{Q} \ln \frac{S+Q}{S-Q} \quad (127)$$

$$S = \delta \left[(\vec{A} - \vec{B})^2 + (\alpha + \beta)^2 \right] + \alpha(\delta^2 + \beta^2 + B^2) + \beta(\delta^2 + \alpha^2 + A^2) \quad (128)$$

$$Q = \sqrt{S^2 - q} \quad (129)$$

$$q = \left[(\vec{A} - \vec{B})^2 + (\alpha + \beta)^2 \right] \left[A^2 + (\alpha + \delta)^2 \right] \left[B^2 + (\beta + \delta)^2 \right] \quad (130)$$

con la condición que $\text{Re}(\alpha, \beta) > 0$. En general todas se puede poner en términos de $I_{1,1,1}$ a partir de la derivación paramétrica, a saber

$$I_{i,j+1,k} = \left(\frac{1}{2\alpha} \right)^i \frac{\partial^i}{\partial^i \alpha} I_{i,j,k} \quad (131)$$

y similarmente en relación a los otros parametros

V. APENDICE 3. INTEGRAL BÁSICA DE LA TEORÍA DE SCATTERING

Una integral de interes es

$$L_2 = \int d\vec{u} \frac{\exp(i\vec{u} \cdot \vec{x})}{u^2 - (k \pm i\epsilon)^2} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 2\pi^2 \frac{\exp(\pm ikx)}{x} \quad (132)$$

que se resuelve con la técnica de residuos.