



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

COLISIONES ULTRAFRÍAS
POLARIZADAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

ASAF PARIS MANDOKI

DIRECTORA DE TESIS:
DRA. ROCÍO JÁUREGUI RENAUD

2010





Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de datos del jurado

1.	Datos del alumno Paris Mandoki Asaf 56 71 54 89 Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 302500866
2.	Datos del asesor Dra. Rocío Jáuregui Renaud
3.	Datos del sinodal 1 Dr. José Ignacio Jiménez Mier y Terán
4.	Datos del sinodal 2 Dr. Antonio Marcelo Juárez Reyes
5.	Datos del sinodal 3 Dr. Pablo Barberis Blostein
6.	Datos del sinodal 4 Dr. José Recamier Angelini
7.	Datos de la tesis Colisiones Ultrafrías Polarizadas 73 p. 2010

a Paula...

Agradecimientos

- Katya
- Judith
- Amilcar
- Alan
- Miguel
- Benita Fisher, María Verónica Winkler y Jorge Mandoki

- Luege
- Nori, Paty, Alejandro
- Rana (José David), Marco e Itzamná
- Norma Saiph, Diegoche, Leon, Bagundo
- Michelle, Luis Guillermo, León, Patricio, Gero y Ana
- Marduk, Diego, Vicente, Heiblum
- Judith Cordero
- Judith Valdés y Gilberto Basilio

- Rocío Jáuregui mi asesora
- Pepe Jiménez, Toño Juárez, Pablo Barberis y Pepe Recamier por su valiosa ayuda
- Laura mi ayudante de clase y de tesis
- Julieta Tamayo, Gabriela Campero, Javier Páez y René Ortega
- Ramona Compte

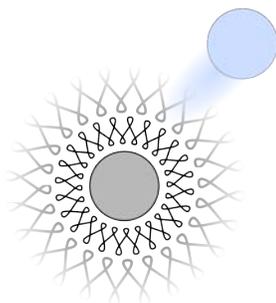
- Desarrolladores de Ubuntu, Eclipse, Inkscape, L^AT_EX, GCC, Python y bibliotecas
- DGAPA-UNAM por el apoyo mediante el proyecto PAPIIT 1N111109
- Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México

ÍNDICE GENERAL

1. Introducción	1
2. Teoría de Dispersión	5
2.1. Sección Eficaz	5
2.2. Dispersión Elástica por un Potencial Central	7
2.2.1. Dispersión Clásica	7
2.2.2. Dispersión Cuántica	9
Dispersión de partículas idénticas	10
Dispersión bosón-bosón	11
Dispersión fermión-fermión	12
2.2.3. Método de Ondas Parciales	13
Partícula libre	14
Condiciones de Frontera	14
Amplitud de Dispersión y Sección Eficaz	15
Amplitud de dispersión de partículas indistinguibles	17
2.2.4. Comportamiento a bajas energías	17
Onda- s ($l = 0$)	19
Potencial Modelo	20
Ecuación de Gross-Pitaevskii	22
Rango Efectivo	23
Onda- p ($l = 1$)	25
Potencial Modelo	25
3. Potencial de Morse	27
3.1. Estados ligados	29
3.2. Estados no-ligados	30
3.2.1. Comportamiento asintótico	32
Desfasamiento	33
Normalización	34
Comportamiento a Baja Energía	34

4. Cálculo Numérico de los Parámetros de Dispersión a Bajas Energías	37
4.1. Sección Eficaz Clásica	39
4.2. Amplitud de Dispersión Cuántica	42
4.3. Método de Calogero	42
Adimensionalización	44
4.3.1. Implementación	44
Cálculo del rango efectivo	46
4.3.2. Resultados	47
Onda- s	47
Evaluación del método numérico	47
Análisis Cualitativo	47
Onda- p	49
5. Conclusiones y Perspectivas	53
A. Ecuación de Gross-Pitaevskii	57
Bibliografía	63

CAPÍTULO 1



INTRODUCCIÓN

Historias románticas sobre grandes avances de la física se cuentan todo el tiempo. Arquímedes corriendo desnudo por las calles de Siracusa gritando “eureka”, Galileo subiéndose a la Torre de Pisa para refutar la mecánica aristotélica y Newton reposando bajo el manzano son sólo algunos ejemplos.

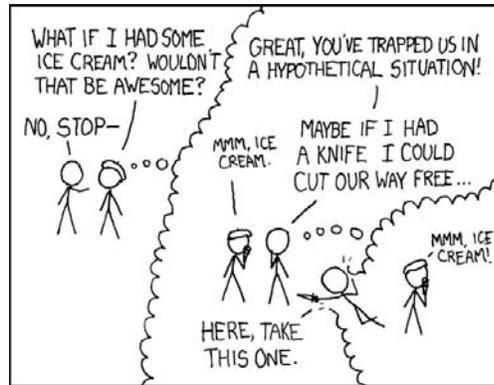
La mecánica cuántica no carece de este folclore. Las historias que se cuentan sobre los orígenes de esta disciplina involucran álgidas discusiones entre Bohr y Einstein durante las reuniones de Solvay de 1927 y 1930 respecto a si “Dios juega o no a los dados”. Los argumentos utilizados entre ellos se basaban principalmente en *experimentos pensados*. Estos experimentos consisten en situaciones hipotéticas que incluyen ingeniosos artilugios para manipular y medir átomos y fotones individuales. Al momento de las reuniones de Solvay, estos experimentos eran irrealizables y se manejaban únicamente como herramientas de argumentación y razonamiento.

Los experimentos pensados eran usualmente modelos simplificados en los que se podía aplicar la teoría de manera directa. El uso de estos modelos es una herramienta común en diversas áreas de la física. Por ejemplo, en el estudio de sistemas mecánicos es común despreocuparse de la fricción y en otros casos se suponen geometrías simplificadas como órbitas circulares o planetas esféricos. Cuando se trata de gases, las simplificaciones que se utilizan a menudo consisten en suponer una forma sencilla de interacción entre las partículas que lo componen.

Desde los tiempos de Cavendish llevar a cabo un experimento de precisión ha consistido en eliminar meticulosamente las variables estorbosas o poco interesantes en un sistema físico real. Las técnicas para lograr esto han ido progresando de tal manera que, a pesar de lo imposible que

parecía durante las reuniones de Solvay, se ha logrado manipular fotones y átomos individuales. La habilidad de llevar a cabo los experimentos pensados fundacionales de la mecánica cuántica nos permite explorar los aspectos más fundamentales de esta teoría, de manera que es posible poner a prueba la exactitud de la teoría para validarla o generar nuevas preguntas. Podemos distinguir entre *no saber* y *no poder saber* a través de experimentos de tipo EPR[EPR35] lo cual tiene profundas implicaciones tecnológicas y filosóficas.

Otro célebre experimento pensado, que no fue ideado dentro del contexto de las discusiones entre Einstein y Bohr, es el del gato de Schrödinger. El resultado de tal experimento es que se obtiene un sistema macroscópico en una superposición “absurda” de estados. Por otra parte, Bose y Einstein idearon otro famoso sistema macroscópico que exhibe un comportamiento cuántico. En éste se obtiene un gas de bosones en el que una fracción macroscópica del mismo se encuentra en el estado base del sistema. A esto se le llama *Condensado de Bose-Einstein*. Setenta años después el primer condensado fue realizado experimentalmente[DMA+95]. Para alcanzar las temperaturas necesarias para crear un condensado de bosones se utilizan técnicas evaporativas. Se coloca el gas



What if someone broke out of a hypothetical situation in your room right now?

-xkcd.com

de átomos bosónicos dentro de una trampa magneto-óptica. En este, existe un pequeño grupo de partículas mucho más energéticas que el resto. Posteriormente se disminuye la profundidad de la trampa por un breve instante lo que permite el escape de estas partículas más energéticas. Cuando se aumenta nuevamente la profundidad del pozo, las partículas restantes se termalizan mediante colisiones y nuevamente aparece un grupo de partículas más energético que el promedio. Se repite el proceso de disminución y aumento de la profundidad de la trampa hasta lograr la temperatura buscada.

La situación para gases de fermiones es muy diferente ya que, cuando está conformado por una sola especie de fermiones, el principio de exclusión de Pauli disminuye en gran medida las colisiones entre ellos. Esto imposibilita la termalización y por tanto el enfriamiento de gases fermiónicos utilizando las técnicas desarrolladas para condensados de bosones. Sin embargo, mezclando dos especies de fermiones, las colisiones entre fermiones de distinta especie son posibles y, de esta manera, una especie actúa como mediador de la otra redistribuyendo la energía entre las partículas y logrando así alcanzar muy bajas temperaturas[DJ99].

Experimentos realizados en condensados bosónicos llevaron a descubrir que la intensidad de la interacción entre los átomos que forman el gas puede ser controlada a través de un campo magnético externo [RCB+98][CFH+98]. Utilizando estas técnicas es posible amplificar la interacción entre fermiones de la misma especie lo suficiente como para poder realizar condensados fermiónicos puros [TFMK01][RTBJ03][SZS+05]. El control que existe sobre la interacción es de tal virtud, que se puede lograr que la atracción entre los átomos fermiónicos sea lo suficientemente intensa como para que éstos formen moléculas binarias bosónicas y, en consecuencia, formen un condensado de bosones. Estos sistemas son de particular interés para estudiar el cruce BEC-BCS[Leg80][GRJ03]. Esto es la transición de un ensamble de pares de cooper formados por átomos fermiónicos débilmente interactuantes a un condensado de moléculas bosónicas compuestas por fermiones fuertemente atraídos entre sí.

La motivación central de este trabajo es estudiar gases atómicos ultrafríos con interacción sintonizable. Estos sistemas tienen la virtud de ser muy sencillos. La interacción se caracteriza por muy pocos parámetros que pueden ajustarse a voluntad lo que nos permite explorar nuevos regímenes fenomenológicos. En épocas de las reuniones de Solvay, un sistema de esta naturaleza sólo parecía posible en el contexto de un experimento pensado. El objetivo de esta tesis es estudiar algunos aspectos preliminares de las colisiones binarias necesarios para describir estos gases. Utilizaremos el potencial de Morse pues éste es un modelo razonable de las interacciones atómicas.

En el Capítulo 1 de este trabajo damos un panorama general de la tesis.

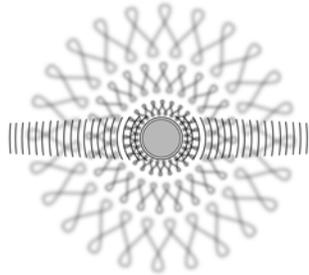
En el Capítulo 2 hacemos una síntesis de la teoría de dispersión elástica que utilizamos en los demás capítulos prestando especial atención a casos de muy baja energía. Dado que a bajas energías la longitud de onda de las partículas es muy grande, los detalles finos de la estructura del potencial de interacción son irrelevantes, por lo que se pueden caracterizar con muy pocos parámetros. También dentro del Capítulo 2 discutimos que para el caso de colisiones de onda- s , la *longitud de dispersión* contiene suficiente información es suficiente para caracterizarla. Para colisiones de onda- p , el *volumen de dispersión* no basta para caracterizar la colisión por lo que es necesario tomar en cuenta también el *rango efectivo* de onda- p [JLPC08].

En el Capítulo 3 estudiamos el potencial de Morse como un modelo factible de la interacción entre átomos con el que obtenemos resultados analíticos para onda- s . Además de obtener las soluciones ligadas y no ligadas, calculamos la longitud de dispersión y el rango efectivo.

Por último, en el Capítulo 4 aplicamos la teoría de dispersión clásica al potencial de Morse y posteriormente discutimos la implementación de métodos numéricos para calcular los parámetros de dispersión cuántica para onda- s y onda- p .

De acuerdo con la ecuación de Gross-Pitaevskii el efecto de las interacciones binarias en un condensado de Bose-Einstein está determinada en una primera aproximación por la longitud de dispersión del potencial binario. En el apéndice A desarrollamos una derivación de la ecuación de Gross-Pitaevskii basado en el método de Hartree-Fock.

CAPÍTULO 2



TEORÍA DE DISPERSIÓN

A lo largo de este trabajo utilizamos las herramientas de teoría de dispersión de manera extensa. Dicha teoría suele plantearse en términos de un *haz incidente* y de un *blanco*. Sin embargo en este trabajo la utilizaremos para describir colisiones entre pares de átomos iguales restringiéndonos a que el estado interno de los átomos no sea modificado por la colisión. Para tomar en cuenta cambios en el estado interno asociados a una colisión se requiere una descripción multicanal que se sale del alcance de este trabajo.

2.1. Sección Eficaz

Un experimento típico de dispersión consiste en apuntar un haz de partículas hacia un blanco para conocer la estructura de este último. De esta forma, una parte del haz incidente resulta desviado y la otra sigue su camino (Véase Fig. 2.1), de modo que, para encontrar la distribución de las partículas desviadas, se colocan detectores alrededor del blanco. Así, si el haz incidente tiene un área transversal A y una intensidad o densidad de flujo I (número de partículas por unidad de área transversal por unidad de tiempo), podemos asociar una fracción del área del haz incidente a cada parte saliente. De este modo, dado que se considera que el haz tiene una intensidad constante, podemos entender a I^{-1} como el área promedio del haz que ocupa cada partícula. Por otro lado si llamamos N_D al número de partículas desviadas, $N_D I^{-1}$ es el área A_D correspondiente a tales partículas. Ésta área puede interpretarse como el tamaño del obstáculo

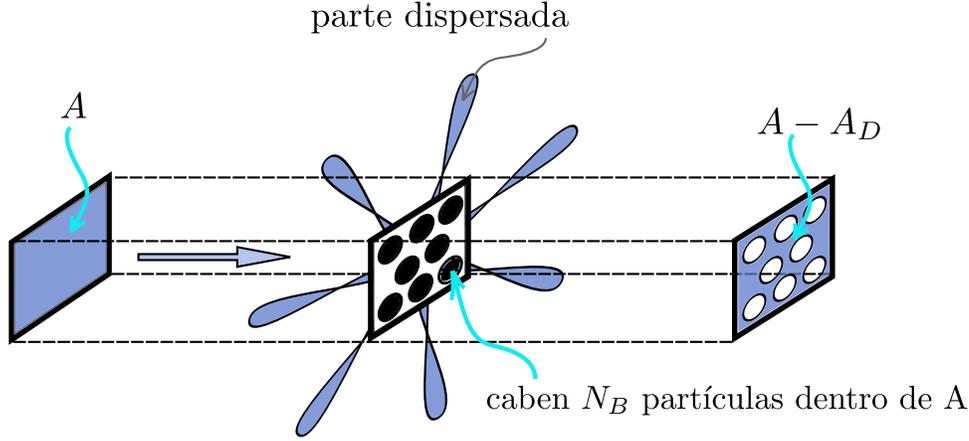


Figura 2.1: Definición de la sección eficaz.

que causa que las partículas sean desviadas. Así, si consideramos que el blanco está formado por muchas partículas y que el número de éstas que caben dentro del área A es N_B , entonces definimos la *sección eficaz* σ como

$$\sigma = \frac{A_D}{N_B} = \frac{N_D}{IN_B}, \quad (2.1)$$

la cual tiene unidades de área y se interpreta como el tamaño efectivo de las partículas del blanco. Obsérvese que la sección eficaz es meramente una manera de expresar la respuesta de un cierto tipo de problema en términos de un área. Los blancos no necesariamente *ocupan* esa área pues si por ejemplo se tratara de electrones, no habría un área directamente asociada a ellos físicamente.

La sección eficaz nos provee de información acerca de la interacción entre las partículas que componen al haz y al blanco a partir de contar el número de partículas dispersadas. Es posible obtener una mejor visión considerando la *sección eficaz diferencial*, que depende no sólo del número de partículas dispersadas, sino también de su distribución angular. Para definir la sección eficaz se consideran todas las partículas dispersadas y se contabilizan en N_D . En cambio, para definir la sección eficaz diferencial se utiliza la cantidad $\frac{dN_D}{d\Omega}(\theta, \phi)$, que representa al número de partículas dispersadas en la dirección definida por los ángulos θ y ϕ . Claramente $\int \frac{dN_D}{d\Omega} d\Omega = N_D$, donde $d\Omega$ es un elemento de ángulo sólido. De esta manera, la sección eficaz diferencial queda definida como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = \frac{1}{IN_B} \frac{dN_D}{d\Omega}(\theta, \phi). \quad (2.2)$$

Así, podemos interpretar la sección eficaz diferencial como el tamaño efectivo de la región de las partículas del blanco que desvía a las partículas incidentes en la dirección definida por los ángulos θ y ϕ .

En general, con un arreglo experimental dado, una colisión puede tener distintos resultados (canales) según el estado interno de las partículas involucradas. La sección eficaz se define para un tipo específico de canal en una colisión dada.

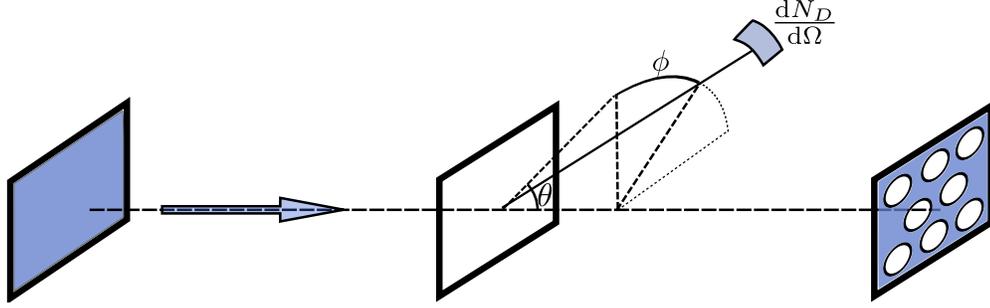


Figura 2.2: Parámetros para la sección eficaz diferencial.

Es importante notar que, para problemas no relativistas, la sección eficaz total no depende del sistema inercial. Por otro lado, la sección eficaz diferencial sí depende del sistema de referencia. Sin embargo, la única diferencia que hay entre secciones eficaces diferenciales en distintos sistemas coordenados radica en la forma en la que se miden los ángulos, por lo que solamente es necesario transformar éstos para transformar la sección eficaz diferencial entre un sistema de referencia y otro.

2.2. Dispersión Elástica por un Potencial Central

Para calcular la sección eficaz es necesario definir la manera en la que interaccionan las partículas involucradas en el proceso de dispersión. A continuación, discutiremos cómo calcular la sección eficaz a partir de un potencial de interacción central $V(r)$ arbitrario tal que $V(r) \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$ más rápido que r^{-1} , es decir, estudiaremos el caso en el que el potencial de interacción disminuye suficientemente rápido como para que, a grandes distancias, el comportamiento sea como el de una partícula libre. Dado que el potencial es central, en realidad $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ no depende de ϕ , por lo que podemos definir una sección eficaz diferencial que sólo depende de θ dada por

$$\frac{d\sigma}{d\theta}(\theta) = \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta \, d\phi = 2\pi \sin\theta \frac{d\sigma}{d\Omega}, \quad (2.3)$$

lo cual simplifica el tratamiento.

2.2.1. Dispersión Clásica

Una consecuencia más de que el potencial sea central es que, las trayectorias permanecen en un plano que contiene a ambas partículas. En la Figura (2.3) se muestran los parámetros importantes en un proceso de dispersión.

Se le llama *parámetro de impacto* b a la mínima distancia de acercamiento que habría entre las partículas si no hubiera interacción. El ángulo θ define la dirección de la trayectoria dispersada lejos de la zona de interacción. Así, si la interacción es repulsiva, θ es positivo, mientras que si es atractiva, θ es negativo. En general, si se resuelven las ecuaciones de movimiento resultará que la desviación θ siempre será una función del parámetro de impacto. Entonces, podemos escribir $\theta = \theta(b)$ o bien $b = b(\theta)$. La sección eficaz para una dispersión a un ángulo entre θ y $\theta + d\theta$ será el área del anillo ($2\pi b \, db$) en el que tienen que estar las partículas para ser dispersadas a

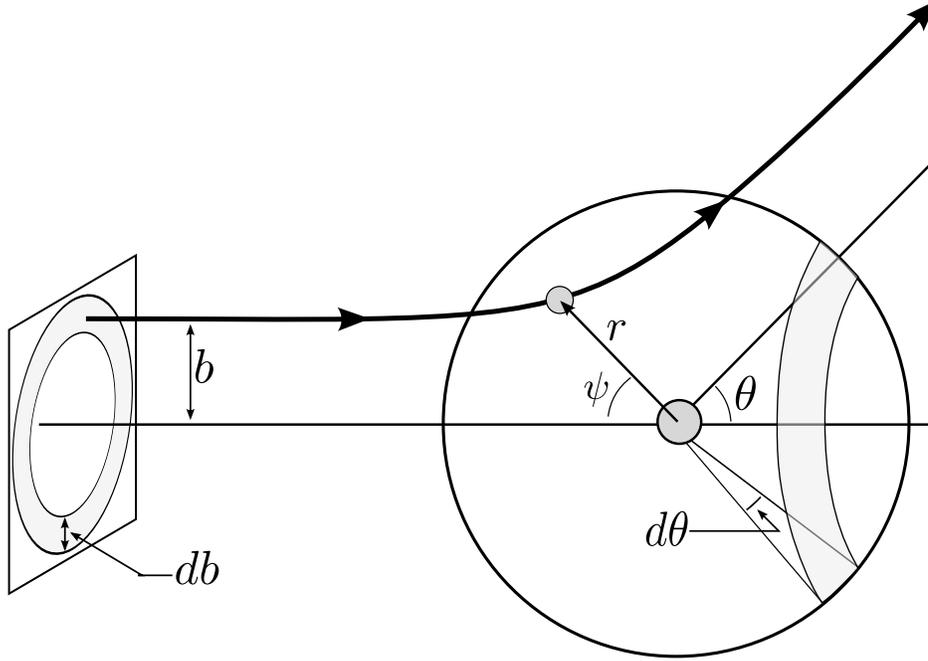


Figura 2.3: Parámetros relevantes para describir una colisión clásica entre dos partículas.

esos ángulos, es decir,

$$\frac{d\sigma}{d\theta} d\theta = 2\pi b \frac{db}{d\theta} d\theta. \quad (2.4)$$

La sección eficaz total resulta ser

$$\sigma = \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\theta} d\theta = \int_0^\pi 2\pi b \frac{db}{d\theta} d\theta = \pi b^2(0). \quad (2.5)$$

Se puede interpretar fácilmente el resultado obtenido notando que $b(0)$ es el parámetro de impacto necesario para que no haya desviación. Entonces $\pi b^2(0)$ es el área del círculo fuera del cual no hay desviación. Concluimos de la discusión anterior que para conocer σ es suficiente encontrar $b(\theta)$ lo cual se discute a continuación.

Para calcular $b(\theta)$ lo más natural es obtener $\theta(b)$ y posteriormente invertir esta última. Para esto, describamos la posición de la partícula por medio de las coordenadas polares ψ y r como se muestra en la Figura (2.3). Luego, suponiendo que $V(r) \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$, tenemos por conservación de la energía que

$$\frac{1}{2}m \left[\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\psi}{dt} \right)^2 \right] + V(r) = \frac{1}{2}mv^2, \quad (2.6)$$

donde v es la velocidad de aproximación muy lejos de la zona de interacción. Como el potencial es central, se conserva el momento angular y tenemos que

$$mr^2 \frac{d\psi}{dt} = mvb. \quad (2.7)$$

Juntando las ecuaciones (2.6) y (2.7) obtenemos que

$$\frac{dr}{dt} = \pm \sqrt{v^2 - \frac{v^2 b^2}{r^2} - \frac{2}{m} V(r)}. \quad (2.8)$$

Al dividir la ecuación (2.7) entre la (2.8) y simplificar mediante el teorema de la función inversa y la regla de la cadena obtenemos

$$\frac{d\psi}{dr} = \pm \frac{vb}{r^2 \sqrt{v^2 - \frac{v^2 b^2}{r^2} - \frac{2}{m} V(r)}}. \quad (2.9)$$

En la expresión anterior la raíz negativa corresponde a cuando la partícula se acerca y la positiva corresponde a cuando se aleja. Así, a partir de lo anterior podemos obtener θ integrando desde $r = \infty$ hasta a , que es la distancia de máximo acercamiento para v y b dados, y luego nuevamente hacia afuera hasta $r = \infty$. De acuerdo con la Figura (2.3), de la integración obtenemos

$$\Delta\psi = \pi - \theta. \quad (2.10)$$

Por otra parte, como la integral recorre los mismos valores dos veces, podemos duplicarla y finalmente obtenemos

$$\theta = \pi - \Delta\psi = \pi - 2vb \int_a^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{v^2 - \frac{v^2 b^2}{r^2} - \frac{2}{m} V(r)}}. \quad (2.11)$$

Al sustituir una forma particular de $V(r)$ podemos, en principio, calcular $\theta(b)$ y de esto obtener $b(\theta)$ con lo que a su vez, podemos calcular $\frac{d\sigma}{d\theta}$ y σ .

2.2.2. Dispersión Cuántica

En el enfoque clásico se estudian las trayectorias para conocer la sección eficaz. El tratamiento cuántico necesariamente será diferente pues no existen las trayectorias en este caso. Así, la teoría cuántica está basada en la descripción ondulatoria dada por la ecuación de Schrödinger. Consideremos la dispersión no-relativista de una partícula debido a un potencial. La ecuación de Schrödinger en el sistema de referencia del centro de masa toma la forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t). \quad (2.12)$$

Como el potencial no depende de tiempo, la ecuación admite soluciones estacionarias de la forma

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{iE}{\hbar} t}, \quad (2.13)$$

donde $\psi(\vec{r})$ es una eigenfunción del hamiltoniano con eigenvalor E , dado de tal manera que

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.14)$$

donde

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (2.15)$$

es el momento inicial de la partícula. Consideramos una onda plana incidente que se propaga a lo largo del eje- Z con momento $\hbar\vec{k}^1$ la cual es dispersada por un potencial, produciendo una onda esférica saliente. Así, buscaremos soluciones a la ecuación de Schrödinger de la forma

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) \approx A(k) \left\{ e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right\}, \text{ para } r \text{ grande.} \quad (2.16)$$

En la ecuación anterior $A(k)$ es un factor de normalización y la función $f(\theta, \phi)$ determina la distribución angular de las partículas dispersadas, por lo que es claro que existirá una relación importante entre ésta y la sección eficaz. Para encontrar precisamente la relación que existe, notemos que la probabilidad de que una partícula viajando a velocidad promedio v pase por un área $d\sigma$ en un tiempo dt es

$$dP = |\psi_{\text{incidente}}|^2 dV = |A(k)|^2 (v dt) d\sigma. \quad (2.17)$$

Sin embargo, esto es igual a la probabilidad de que la partícula sea desviada posteriormente hacia un ángulo sólido $d\Omega$ con velocidad promedio \tilde{v} , de tal manera que

$$dP = |\psi_{\text{dispersada}}|^2 dV = \frac{|A(k)|^2 |f|^2}{r^2} (\tilde{v} dt) r^2 d\Omega. \quad (2.18)$$

Como estamos considerando una dispersión elástica, lejos de la zona de interacción se tiene que $v = \tilde{v}$, por lo que $d\sigma = |f|^2 d\Omega$. De aquí se sigue que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2. \quad (2.19)$$

La expresión anterior es fundamental pues relaciona el concepto teórico de la función de onda con una cantidad medible que es la sección eficaz diferencial. Debido a la relación (2.19) se le llama *amplitud de dispersión* a la función $f(\theta, \phi)$ que determina la distribución angular de las partículas dispersadas. Por lo tanto, el problema de encontrar la sección eficaz de una dispersión cuántica se reduce a determinar la amplitud de dispersión².

Dispersión de partículas idénticas

Decimos que dos partículas son idénticas cuando no podemos distinguir entre ellas por medio de alguna propiedad intrínseca. El hecho de que las partículas fundamentales en la mecánica cuántica sean indistinguibles resulta en profundas consecuencias nunca antes vistas en la física clásica. En particular, el tratamiento del problema de dispersión debe ser modificado para analizar colisiones entre partículas idénticas pues en la discusión anterior se supuso implícitamente que es posible distinguir entre la partícula *dispersada* y *dispersora*.

La Figura (2.4) ilustra una colisión elástica directa entre dos partículas indistinguibles. Inicialmente ambas partículas tienen momentos opuestos \vec{p}_i y $-\vec{p}_i$, además de que sus paquetes de onda están separados (Fig. 2.4a). Cuando colisionan, sus paquetes de onda se traslapan (Fig. 2.4b) y, posteriormente se separan. Describiremos un evento de dispersión en una dirección a un ángulo θ respecto a la dirección original, que corresponde al caso en el que las partículas tienen momentos finales \vec{p}_f y $-\vec{p}_f$ (Fig. 2.4b). Nótese que, como la colisión es elástica, $|\vec{p}_i| = |\vec{p}_f|$. El traslape de los paquetes de onda mostrado en la Figura 2.4a y la naturaleza “borrosa” de la mecánica cuántica imposibilitan identificar los paquetes de onda iniciales con los finales.

¹Hacemos el análisis de dispersión para una partícula con momento perfectamente bien definido. Sin embargo, usando el principio de superposición es posible extender este análisis al caso de paquetes de onda.

²Para una derivación más formal de (2.19) véase [Joa87].

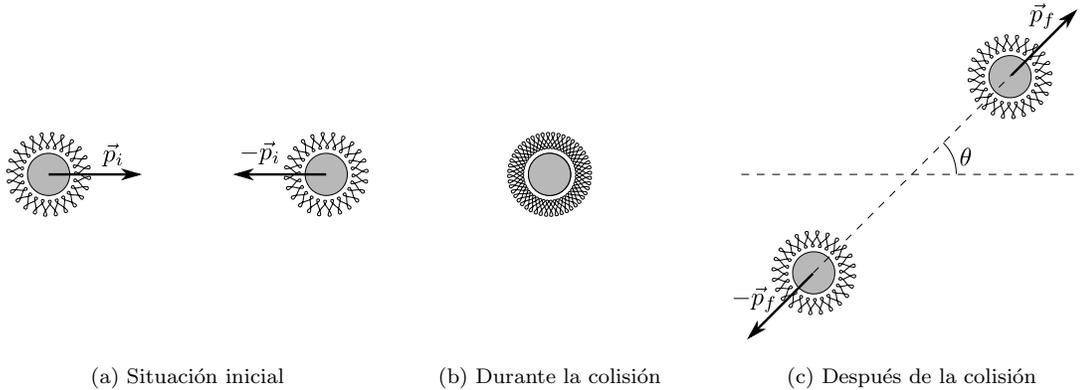


Figura 2.4: Colisión entre dos partículas idénticas.

De esta forma, para analizar el proceso es necesario representar el estado físico del sistema por medio de un ket que evoluciona en el tiempo. Es natural escribir el estado inicial como $|\vec{p}_i, -\vec{p}_i\rangle$. Sin embargo, es igualmente posible expresar esta configuración por $|\vec{p}_i, \vec{p}_i\rangle$. En el reino de la física clásica se puede pasar de una expresión a otra sin ningún problema, pues el etiquetamiento es una cuestión de convención. Sin embargo, en física cuántica simplemente no es posible, ya que si ambos kets fueran representaciones legítimas del mismo estado físico, entonces cualquier superposición

$$\alpha |\vec{p}_i, -\vec{p}_i\rangle + \beta |-\vec{p}_i, \vec{p}_i\rangle \quad (2.20)$$

sería también una representación legítima, derivando en lo que se conoce como *degeneración de intercambio*. Esta falta de unicidad en la definición del estado del sistema no es aceptable, pues resultaría en predicciones ambiguas dependiendo de la elección que se toma respecto a α y β .

El Postulado de Simetrización elimina la degeneración de intercambio determinando que *los kets deben ser simétricos (bosones) o antisimétricos (fermiones) respecto al intercambio de dos partículas*. La simetría o antisimetría de la función de onda altera la estadística de las partículas, y esto es algo que puede medirse experimentalmente. Los experimentos muestran que partículas con espín semi-entero tales como electrones, neutrinos, quarks, etc. son fermiones, mientras que partículas con espín entero como fotones, partículas W y Z son bosones. Una de las consecuencias más importantes de que los electrones sean fermiones es que esto da pie a la estructura de la tabla periódica. Sistemas compuestos como núcleos o átomos se comportan en un experimento como bosones o fermiones siempre y cuándo su energía de amarre sea suficientemente grande como para que no se puedan separar. Los sistemas compuestos por un número impar de fermiones son fermiones, mientras que sistemas que constan de un número par de fermiones son bosones. Si un sistema cuántico está compuesto por partículas con varios grados de libertad como pueden ser posición, espín, etc, entonces la función de onda del sistema completo debe estar simetrizada (o antisimetrizada) respecto al intercambio de partículas para cada uno de esos grados de libertad.

Dispersión bosón-bosón A continuación aplicaremos la discusión anterior para describir la dispersión de dos bosones idénticos. Por simplicidad consideraremos únicamente el caso de bosones sin espín, por lo que la parte de espín de la función de onda estará automáticamente simetrizada. Para tener una función de onda completa simetrizada es necesario asegurar que su parte espacial sea simétrica respecto al intercambio de partículas. Sin embargo, la función (2.16) no cumple las condiciones de simetría, por lo que consideramos una combinación lineal

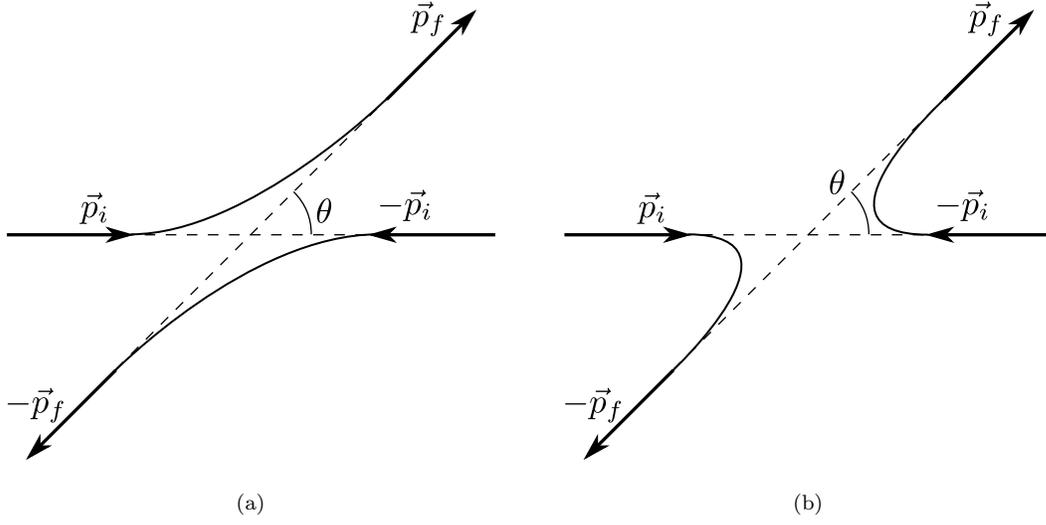


Figura 2.5: Amplitudes que interfieren en una colisión entre partículas idénticas.

simetrizada de la forma

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\vec{k}, \vec{r}) + \psi(\vec{k}, -\vec{r})] \approx \frac{1}{\sqrt{2}} A(k) \left\{ [e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}] + [f(\theta, \phi) + f(\pi - \theta, \phi + \pi)] \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \quad (2.21)$$

En ausencia de dispersión, la función de onda es proporcional al primer término entre corchetes, de tal manera que, por un argumento similar al que se usó para obtener (2.19) obtenemos que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi) + f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2. \quad (2.22)$$

La dispersión de partículas idénticas exhibe interferencia entre dos trayectorias clásicas mostradas en la Figura (2.5). Es importante notar que con esta definición de sección eficaz diferencial, la sección eficaz total

$$\sigma = \int |f(\theta, \phi) + f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 d\Omega \quad (2.23)$$

equivale a dos veces el número de partículas removidas del haz incidente por unidad de tiempo por unidad de flujo incidente, debido a que no se puede determinar si una partícula proviene del haz incidente o del blanco.

Dispersión fermión-fermión La dispersión de fermiones idénticos es más complicada de tratar que la de bosones (sin espín) pues con el espín surgen varias complicaciones. Consideraremos únicamente el caso de dos fermiones con espín $\frac{1}{2}$ cuya interacción es central. La función de estado que describe este sistema debe ser antisimétrica respecto al intercambio de partículas. Además, si las partículas se encuentran en un estado singlete, la función es antisimétrica respecto al intercambio de espines por lo que debe ser simétrica respecto al intercambio de posiciones. En este caso, la amplitud de dispersión y sección eficaz toman la misma forma que la ecuación (2.22). Si, por el contrario, las partículas se encuentran en un estado triplete de espín, la función de onda es simétrica respecto al intercambio de espines y

la antisimetría debe presentarse en la parte espacial. En este caso, mediante un procedimiento análogo al utilizado para bosones se obtiene que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi) - f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2. \quad (2.24)$$

2.2.3. Método de Ondas Parciales

En la Sección 2.2.2 mostramos que para encontrar la sección eficaz es necesario determinar la amplitud de dispersión. El método de ondas parciales que describiremos a continuación ofrece una manera de calcular ésta cuando el potencial es central.

Observamos que, de acuerdo con la ecuación (2.12), el hamiltoniano del sistema está dado por

$$\hat{\mathbb{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r). \quad (2.25)$$

Con ayuda del operador de momento angular, lo anterior puede ser reescrito como

$$\hat{\mathbb{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r), \quad (2.26)$$

de tal manera que como $[\hat{\mathbb{L}}^2, \hat{\mathbb{L}}_z] = 0$,

$$[\hat{\mathbb{H}}, \hat{\mathbb{L}}^2] = [\hat{\mathbb{H}}, \hat{\mathbb{L}}_z] = 0. \quad (2.27)$$

Dado que los operadores $\hat{\mathbb{H}}$, $\hat{\mathbb{L}}^2$ y $\hat{\mathbb{L}}_z$ conmutan, podemos encontrar eigenfunciones comunes a los tres operadores. Así, es posible entonces escribir la función de onda de dispersión ψ como un desarrollo de ondas parciales correspondientes a distintos valores de los números cuánticos l y m , de tal manera que

$$\psi(k, \vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(k) R_{lm}(k, r) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (2.28)$$

donde $Y_{lm}(\theta, \phi)$ son los armónicos esféricos, $c_{lm}(k)$ son los coeficientes del desarrollo y $R_{lm}(k, r)$ son las funciones radiales. El problema central del método de ondas parciales radica en tomar ventaja del desarrollo (2.28) para obtener una expresión conveniente para la amplitud de dispersión.

Así, al sustituir el desarrollo (2.28) en la ecuación de Schrödinger obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(k, r) + V(r) R_l(k, r) = E R_l(k, r). \quad (2.29)$$

Hemos escrito $R_l(k, r)$ a diferencia de $R_{lm}(k, r)$ pues en la ecuación se observa que no hay dependencia en m . Por otro lado, resulta conveniente hacer la sustitución

$$R_l(k, r) = \frac{u_l(k, r)}{r} \quad (2.30)$$

además de introducir el potencial reducido $U = 2\mu V/\hbar^2$ y el número de onda $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$. De esta forma, la nueva ecuación radial resulta en

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l(k, r) = 0. \quad (2.31)$$

Partícula libre

A continuación estudiaremos el caso de partícula libre en el que no hay potencial. En este caso, la ecuación (2.31) se reduce a

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_l(k, r) = 0, \quad (2.32)$$

donde se ha llamado $y_l(k, r)$ a la solución de partícula libre. Haciendo el cambio de variable $\rho = kr$ y la sustitución $f_l(\rho) = y_l/\rho$, obtenemos que

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] f_l(\rho) = 0. \quad (2.33)$$

Esta ecuación es conocida como la *ecuación diferencial esférica de Bessel*. La solución general se puede escribir como combinación lineal de funciones esféricas de Bessel j_l con funciones esféricas de Neumann n_l . Por lo tanto,

$$y_l(k, r) = kr [\eta_l(k) j_l(kr) + \xi_l(k) n_l(kr)], \quad (2.34)$$

donde η_l y ξ_l son los coeficientes de la combinación lineal, los cuales pueden depender de k . Como la función $n_l(\rho)$ tiene un polo de orden $l+1$ en $\rho = 0$, ξ_l debe de ser cero para que la solución sea regular y, por tanto, físicamente posible. Entonces, salvo por una constante multiplicativa dependiente de k , se tiene que

$$y_l(k, r) \sim r j_l(kr). \quad (2.35)$$

Además, como

$$j_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin(x - \frac{1}{2}l\pi) \quad (2.36)$$

y

$$n_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} -\frac{1}{x} \cos(x - \frac{1}{2}l\pi), \quad (2.37)$$

podemos concluir que

$$y_l(k, r) \underset{kr \rightarrow \infty}{\sim} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi). \quad (2.38)$$

Condiciones de Frontera

En esta sección analizaremos el comportamiento asintótico en presencia del potencial. Cuando r es suficientemente grande (mayor que el “rango” a del potencial) la ecuación (2.31) toma la forma

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(k, r) = 0. \quad (2.39)$$

Siguiendo el razonamiento que se utilizó en el caso de partícula libre, se tiene que

$$u_l(k, r) = kr [B_l(k) j_l(kr) + C_l(k) n_l(kr)] \quad \text{si } r \gg a. \quad (2.40)$$

Por otro lado, de acuerdo con las ecuaciones (2.36) y (2.37),

$$u_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} B_l(k) \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) - C_l(k) \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi), \quad (2.41)$$

o bien,

$$u_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_l(k) \sin[kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(k)], \quad (2.42)$$

donde

$$A_l(k) = (B_l^2(k) + C_l^2(k))^{1/2} \quad (2.43)$$

y

$$\tan \delta_l(k) = -\frac{C_l(k)}{B_l(k)}. \quad (2.44)$$

Al comparar las expresiones (2.42) y (2.38) notamos que la interacción es claramente la responsable de la aparición de las cantidades $\delta_l(k)$ llamadas *desfasamientos*. Cabe destacar que los desfasamientos están determinados por el comportamiento asintótico de las soluciones. Además, en caso de que el potencial fuera nulo en todo el espacio $C_l(k) \equiv 0$, sin embargo, la presencia del potencial en la región $r < a$ resulta en un $C_l(k) \neq 0$ en la región asintótica.

Por otro lado, en el origen es necesario que $u_l(k, 0) = 0$ para que la función radial $R_l(k, r)$ sea normalizable.

Amplitud de Dispersión y Sección Eficaz

A continuación estudiaremos la relación que existe entre los desfasamientos, la amplitud de dispersión y la sección eficaz. En este punto, resulta conveniente recordar la fórmula de Rayleigh dada por

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta). \quad (2.45)$$

Por otro lado, dado que

$$P_l(\cos\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l,0}(\theta, \phi), \quad (2.46)$$

podemos reescribir lo anterior como

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \delta_{m,0}. \quad (2.47)$$

Ahora, usando (2.36) vemos que, para r grande,

$$e^{ikz} \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) Y_{lm}(\theta, \phi) \delta_{m,0}, \quad (2.48)$$

o bien,

$$e^{ikz} \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l \frac{e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2ikr} Y_{lm}(\theta, \phi) \delta_{m,0}. \quad (2.49)$$

Al aplicar esta fórmula en la expresión (2.16) obtenemos que, para r grande,

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) \approx A(k) \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l \frac{e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2ikr} Y_{lm}(\theta, \phi) \delta_{m,0} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \quad (2.50)$$

Por otro lado, podemos usar la ecuación (2.42) para encontrar una forma asintótica para la igualdad dada en (2.28), obteniendo así,

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(k) A_l(k) \frac{\sin[kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(k)]}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.51)$$

o bien

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) \xrightarrow{kr \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(k) A_l(k) \frac{e^{i(kr-l\pi/2+\delta_l(k))} - e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l(k))}}{2ir} Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (2.52)$$

Al comparar las ecuaciones (2.50) y (2.52) notamos que ambas expresiones son combinación lineal de una onda esférica entrante y una saliente. Así, al igualar los coeficientes de la onda entrante obtenemos que

$$c_{lm} = \frac{A(k)}{kA_l(k)} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l e^{i\delta_l} \delta_{m,0}. \quad (2.53)$$

Del mismo modo, al igualar los coeficientes de la onda saliente y usar la expresión anterior obtenemos

$$f(\theta, \phi) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_{l,0}(\theta, \phi) (e^{2i\delta_l} - 1). \quad (2.54)$$

Haciendo uso de la ecuación (2.46) notamos que f no depende de ϕ , por lo que

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta), \quad (2.55)$$

que podemos escribir finalmente como

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l(k) P_l(\cos \theta), \quad (2.56)$$

donde

$$a_l(k) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l(k)} - 1) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k). \quad (2.57)$$

El desarrollo anterior establece que *el conocer los desfases nos permite obtener la amplitud de dispersión*. Los coeficientes $a_l(k)$ son llamados *amplitudes de onda parcial*.

De acuerdo con la ecuación fundamental (2.19), podemos calcular la sección eficaz diferencial dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k, \theta) = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta). \quad (2.58)$$

Cuando la sección eficaz diferencial no depende de ϕ , la sección eficaz total se obtiene mediante la expresión

$$\sigma_{tot}(k) = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega}(k, \theta) \sin \theta d\theta. \quad (2.59)$$

Además, como

$$\int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}, \quad (2.60)$$

la ecuación (2.58) toma la forma

$$\sigma_{tot}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (2.61)$$

Esta última ecuación relaciona los desfases $\delta_l(k)$, que son propiedades de la función de onda, con la sección eficaz total que es una cantidad medible experimentalmente. El conocer los desfases nos permite calcular la sección eficaz. Sin embargo, no es posible en general obtener los desfases a partir de la sección eficaz.

Amplitud de dispersión de partículas indistinguibles Las formas obtenidas para la sección eficaz y la amplitud de dispersión son válidas sólo para partículas distinguibles. A continuación se analizan las consecuencias de la indistinguibilidad de las partículas.

De la ecuación (2.56) y del hecho de que

$$P_l(\cos(\pi - \theta)) = (-1)^l P_l(\cos \theta), \quad (2.62)$$

se sigue que para el caso simétrico en el que se usa la ecuación (2.22),

$$f_{tot}(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta) = 2 \sum_{l \text{ par}}^{\infty} (2l + 1) a_l(k) P_l(\cos \theta). \quad (2.63)$$

Por el contrario, en el caso antisimétrico se utiliza la ecuación (2.24), y $f_{tot}(\theta)$ toma la forma

$$f_{tot}(\theta) = f(\theta) - f(\pi - \theta) = 2 \sum_{l \text{ impar}}^{\infty} (2l + 1) a_l(k) P_l(\cos \theta). \quad (2.64)$$

Lo anterior tiene como consecuencia que la contribución a la sección eficaz de aquellas ondas parciales que tienen amplitud distinta de cero es cuatro veces más grande que si las partículas fueran distinguibles. La mitad de este factor cuatro surge porque las partículas del haz incidente no pueden distinguirse de las del blanco. El factor de dos restante no tiene una explicación tan sencilla y se debe más bien a un comportamiento puramente cuántico.

2.2.4. Comportamiento a bajas energías

En las secciones anteriores desarrollamos aspectos generales de la teoría de dispersión. A continuación presentamos consideraciones que resultan relevantes cuando se trata de dispersión a baja energía. En particular destacaremos que en este caso es posible caracterizar el proceso de dispersión mediante muy pocos parámetros.

Consideremos el caso donde las velocidades de las partículas dispersadas son tan pequeñas que sus longitudes de onda, proporcionales a $1/k$, son grandes comparadas con el rango a del potencial $U(r)$ (i.e. $ka \ll 1$). Analizaremos la ecuación (2.31), cuya forma es

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l(k, r) = 0, \quad (2.65)$$

en tres regiones distintas: $r < a$, $a \ll r \ll 1/k$ y $1/k < r$. Cuando $r < a \ll 1/k$ podemos despreciar el término k^2 , pues los términos restantes son más significativos, con lo que la ecuación toma la forma

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l(k, r) = 0 \text{ si } r < a \ll 1/k. \quad (2.66)$$

Nótese que la solución a esta ecuación debe satisfacer la condición de frontera $u_l|_{r=0} = 0$ la cual es independiente de k además de la condición de normalización que únicamente modifica la escala vertical de la solución. Por lo tanto, la solución en esta región no depende de k . En el caso en que $a \ll r \ll 1/k$ se sigue teniendo $r \ll 1/k$ además de que $r > a$ por lo que también el potencial es despreciable y se obtiene

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(k, r) \approx 0 \text{ si } a \ll r \ll 1/k. \quad (2.67)$$

La solución general para esta ecuación es

$$u_l(k, r) \approx b_l r^{l+1} + c_l r^{-l}, \quad (2.68)$$

donde las constantes b_l y c_l únicamente dependen de l pues se determinan con la condición de frontera en $r = a$, dada por la solución de la ecuación (2.66), y la condición normalización. A mayores distancias, $r > 1/k$, el término $U(r)$ sigue siendo despreciable pero k^2 ya es significativo por lo que tenemos

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(k, r) = 0 \text{ si } r > 1/k. \quad (2.69)$$

La solución general a esta ecuación tiene la forma mostrada en la ecuación (2.34) que en este caso resulta en

$$u_l(k, r) = kr \left[b_l \frac{(2l+1)!!}{k^{l+1}} j_l(kr) - c_l \frac{k^l}{(2l-1)!!} n_l(kr) \right]. \quad (2.70)$$

Los coeficientes de la ecuación anterior han sido escogidos para que cuando $r \sim a$, las funciones (2.70) y (2.68) se “peguen” bien.

Por otro lado, si $r > 1/k$ entonces la solución (2.70) toma la forma

$$u_l(k, r) = \left[b_l \frac{(2l+1)!!}{k^{l+1}} \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) + c_l \frac{k^l}{(2l-1)!!} \cos\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) \right]. \quad (2.71)$$

que a partir de las relaciones (2.41-2.44) resulta en

$$\tan \delta_l(k) = \frac{k^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{c_l}{b_l} \text{ cuando } b_l \neq 0. \quad (2.72)$$

La ecuación (2.72) implica que si k es pequeño, entonces los desfases $\delta_l(k)$ también son pequeños. Por otro lado, las amplitudes de onda parcial dadas en la ecuación (2.57) pueden reescribirse como

$$a_l(k) = \frac{1}{k \cot \delta_l(k) - ik} \quad (2.73)$$

o bien

$$a_l(k) = \frac{1}{k} \frac{\tan \delta_l(k)}{1 + \tan^2 \delta_l(k)} (1 + i \tan \delta_l(k)). \quad (2.74)$$

En el límite de bajas energías

$$a_l(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_l(k)}{k} \approx \bar{c}_l k^{2l}, \quad (2.75)$$

donde queda claro que a bajas energías la dispersión de onda- s es particularmente importante.

Por el contrario, si en la ecuación (2.72) se tiene que $b_l = 0$ entonces $\delta_l(k) = \frac{\pi}{2}$. En este caso, la sección eficaz resulta infinita. El comportamiento anómalo está directamente relacionado con la existencia de estados ligados en el potencial. Consideremos un potencial al que no le cabe ningún estado ligado. Al ir aumentando su profundidad, llega un punto de transición entre que no le cabe ningún estado ligado a que le quepa un primer estado ligado. En este punto de transición es cuando aparece lo que se llama *resonancia de energía cero*. Si se sigue aumentando la profundidad, aparecerá una resonancia cada vez que el potencial esté en el umbral de aceptar un nuevo estado ligado con energía cero.

Las amplitudes parciales de dispersión están íntimamente relacionadas con la $\cot \delta_l(k)$ como lo muestra la ecuación (2.73). Por esto, es conveniente introducir el siguiente desarrollo para k pequeña:

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) = -\frac{1}{\alpha_l} + \frac{1}{2} r_e^{(l)} k^2 + \dots \quad (2.76)$$

donde α_l y $r_e^{(l)}$ son constantes que sólo dependen de los parámetros del potencial. Más adelante discutiremos sus interpretaciones para cada caso.

Onda-s ($l = 0$)

Fuera de las resonancias, cuando k es suficientemente chico, se puede notar de la ecuación (2.75) que únicamente el término con $l = 0$ es importante en la expresión (2.56) y la dispersión es isotrópica. Se define la *longitud de dispersión* a partir de (2.76) como

$$\alpha = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k} \quad (2.77)$$

de tal manera que

$$f(\theta) \xrightarrow{k \rightarrow 0} -\alpha \quad (2.78)$$

y

$$\sigma \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi\alpha^2. \quad (2.79)$$

La longitud de dispersión tiene una relación geométrica sencilla con la función de onda radial de energía cero. Llamando $u_0(r) = \lim_{k \rightarrow 0} u_0(k, r)$, se tiene que

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - U(r) \right] u_0(r) = 0. \quad (2.80)$$

Además, cuando $r > a$,

$$\frac{d^2}{dr^2} u_0(r) \approx 0, \quad (2.81)$$

por lo que

$$u_0(r) = Br + C \quad \text{para } r > a. \quad (2.82)$$

Por otra parte, como la expresión dada en (2.42) debe corresponder con la (2.82) cuando $k \rightarrow 0$,

$$u_0(r) = A(r - \alpha) \quad \text{para } r > a. \quad (2.83)$$

Entonces, α es la intersección de la asíntota de $u_0(r)$ con el eje r , como se muestra en la Figura (2.6).

Haciendo uso de esta interpretación geométrica y notando de qué manera la curvatura y la concavidad en la función de onda son resultado de $U(r)$ en (2.80) podemos deducir que:

1. Un potencial repulsivo ($U > 0$) la curvatura de u_0 siempre se aleja del eje r por lo que $\alpha > 0$;
2. Un potencial atractivo
 - a) incapaz de producir un estado ligado de onda-s: $\alpha < 0$ (Fig. 2.7a);
 - b) a punto de poder tener un estado ligado de onda-s: $\alpha = \pm\infty$ (Fig. 2.7b);
 - c) capaz de albergar un estado ligado de onda-s: $\alpha > 0$ (Fig. 2.7c).

Estas consideraciones pueden generalizarse fácilmente para el caso de varios estados ligados.

Como ejemplo, para un potencial de la forma de pozo cuadrado finito dado por

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2\mu} & \text{si } r_0 > r \geq 0 \\ 0 & \text{si } r \geq r_0 \end{cases} \quad (2.84)$$

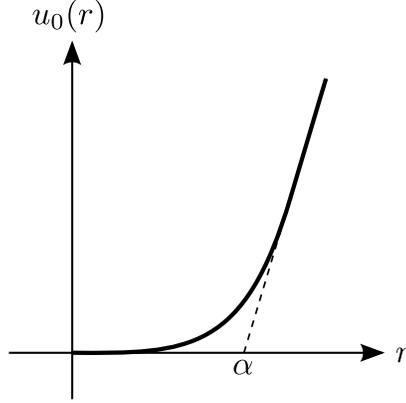


Figura 2.6: Interpretación geométrica de α .

la longitud de dispersión toma la forma[Joa87]

$$\alpha = \left[1 - \frac{\tan \kappa_0 r_0}{\kappa_0 r_0} \right] r_0. \quad (2.85)$$

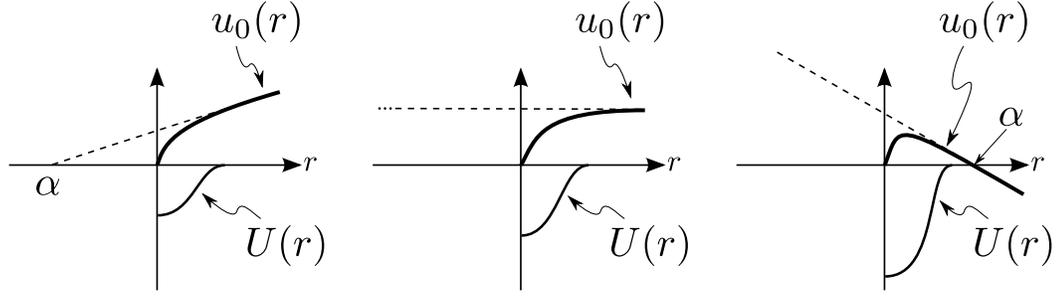
El comportamiento de α para este caso se muestra en la Figura (4.9a).

Potencial Modelo En la sección anterior vimos que el proceso de colisión está determinado por α para bajas energías. Esto tiene como consecuencia que cualquier potencial de interacción con la misma longitud de dispersión resulta en los mismos estados dispersivos asintóticos que el potencial interatómico real. Por lo tanto, conocer a detalle la interacción no es necesario pues toda la información necesaria está contenida en la longitud de dispersión. Con el fin de aprovechar que la descripción del sistema se simplifica de este modo resulta conveniente encontrar una manera de vaciar esta y sólo esta información y así, olvidarnos de los potenciales complicados y sus soluciones. Primero Bethe y Peierls[BP35] mostraron que se pueden encontrar numerosas propiedades de dispersión para el núcleo del deuterio reemplazando la fuerza neutrón-protón por una condición de frontera, dependiente de la longitud de dispersión, en la función de onda para $l = 0$. Un año después, Fermi[Fer36] introdujo la idea de un pseudopotencial de contacto, proporcional a una delta de Dirac para describir sistemas semejantes. Finalmente Breit[Bre47] muestra la equivalencia de ambos formalismos siempre y cuando la interacción se escriba en términos de un potencial delta regularizado U_m definido por

$$U_m(\vec{r})\psi(\vec{r}) = C_m \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} (r\psi(\vec{r})). \quad (2.86)$$

Siendo $\delta(\vec{r})$ una distribución, $U_m(\vec{r})\psi(\vec{r})$ es también una distribución cuyas propiedades merecen ser estudiadas por sí mismas[Tan08]. Nótese que

$$\delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} (r\psi(\vec{r})) = \delta(\vec{r}) \left(\psi(\vec{r}) + r \frac{\partial \psi}{\partial r}(\vec{r}) \right) \quad (2.87)$$



(a) Potencial atractivo incapaz de albergar algún estado ligado de onda-s. (b) Potencial atractivo en el umbral de poder albergar un nuevo estado ligado de onda-s. (c) Potencial atractivo capaz de albergar un estado ligado de onda-s.

Figura 2.7: Ilustración de la longitud de dispersión α para distintos potenciales atractivos.

por lo que si $\psi(\vec{r})$ es regular en el origen entonces

$$U_m(\vec{r})\psi(\vec{r}) = C_m\delta(\vec{r})\psi(0). \quad (2.88)$$

Por otro lado, si $\psi(\vec{r}) \sim 1/r$ cerca del origen el efecto del laplaciano en la ecuación de Schrödinger sobre esta función dará una singularidad precisamente proporcional a $\delta(\vec{r})$. Es decir, si escribimos la función de onda como

$$\psi(\vec{r}) = \frac{u(0)}{r} + \frac{u(\vec{r}) - u(0)}{r} \quad (2.89)$$

obtenemos que

$$\nabla^2\psi(\vec{r}) = -4\pi u(0)\delta(\vec{r}) + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\mathbb{L}}^2\psi(\vec{r}). \quad (2.90)$$

Considerando la dispersión de onda-s debida al pseudopotencial (2.86), la ecuación radial de Schrödinger (2.29) toma la forma

$$\frac{u''(r)}{r} - 4\pi u(0)\delta(\vec{r}) - g\delta(\vec{r})u'(0) + k^2\frac{u}{r} = 0. \quad (2.91)$$

Separando los términos regulares en $r = 0$ y los proporcionales a $\delta(\vec{r})$ obtenemos

$$u''(r) + k^2 u(r) = 0 \text{ si } r > 0, \text{ y } u(0) = -\frac{g}{4\pi}u'(0). \quad (2.92)$$

Nótese que el haber utilizado la delta regularizada se traduce en una condición de frontera. La solución entonces, toma la forma

$$u(r) = A \left(\sin kr + \frac{gk}{4\pi} \cos kr \right), \quad (2.93)$$

por lo que

$$\tan \delta_0(k) = -\frac{gk}{4\pi} \text{ de donde } \alpha = \frac{g}{4\pi}. \quad (2.94)$$

Como no hay dispersión en ondas parciales con $l \neq 0$ entonces, usando las ecuaciones (2.56-2.57) obtenemos

$$f(k) = -\frac{\alpha}{1 + ik\alpha} \quad (2.95)$$

Por lo tanto, la función de onda de dispersión está dada por

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{\alpha}{1 + ik\alpha} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.96)$$

Nótese que para ondas parciales distintas de $l = 0$, la divergencia en el potencial efectivo garantiza que $\psi(\vec{r})$ es regular y tiende a cero cuando $r \rightarrow 0$. Usando la ecuación (2.88) notamos que en este caso el pseudopotencial no tiene efecto para estas ondas parciales. Es decir, el pseudopotencial contiene la información representada por la longitud de dispersión y además, es la única información que contiene.

Ecuación de Gross-Pitaevskii Una de las aplicaciones más importantes de modelar la interacción entre átomos mediante un potencial de contacto caracterizado por la longitud de dispersión es estudiar los efectos de la interacción en condensados de Bose-Einstein. El hamiltoniano para un sistema de N partículas idénticas de masa m sometidas a un potencial externo $V(\vec{r})$ y que interactúan por medio de un potencial de dos cuerpos $W(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ es

$$\hat{\mathbb{H}} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i + \sum_{i<j}^N W(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad (2.97)$$

donde

$$\hat{h}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \quad (2.98)$$

son los hamiltonianos que corresponden a la energía cinética y potencial de cada partícula. Usando el método de Hartree-Fock podemos encontrar la función de onda del estado base del sistema. De esta manera, suponemos que la función de onda del estado base de todo el sistema Ψ se construye a partir del producto de funciones de onda de una partícula. Es decir,

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \hat{\mathcal{S}} \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i), \quad (2.99)$$

donde $\hat{\mathcal{S}}$ es un operador de simetrización de la función de onda. Las funciones de onda de una partícula se normalizan de la manera usual,

$$\int |\psi_i(\vec{r})|^2 d^3r = 1. \quad (2.100)$$

Como Ψ es la función del estado base de muchas partículas para un sistema de bosones, podemos suponer que todas las partículas ocupan el mismo estado de una partícula $\psi_i(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ con $i = 1, \dots, N$, de tal manera que el requerimiento de simetrización de la función de onda se satisface automáticamente y, por lo tanto, $\hat{\mathcal{S}}$ es la identidad. Haciendo uso del método variacional encontraremos una ecuación para ψ . Encontrando cuándo el valor esperado del hamiltoniano no cambia respecto a una variación pequeña de ψ , obtenemos una ecuación para ψ cuya solución resulta en un valor extremo del valor esperado de $\hat{\mathbb{H}}$ (Véase A). El resultado de este procedimiento es una “ecuación de Schrödinger” con el hamiltoniano de una partícula dado por

$$\hat{h} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + W_{\text{mf}}(\vec{r}), \quad (2.101)$$

donde

$$W_{\text{mf}}(\vec{r}) = (N - 1) \int |\psi(\vec{r}')|^2 W(\vec{r}_m - \vec{r}') d^3r' \quad (2.102)$$

es una contribución de campo promedio.

Modelando la interacción entre las partículas por un potencial de contacto $W(\vec{r}) = g\delta(\vec{r})^3$, con $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}\alpha$, caracterizado por la longitud de dispersión vemos que

$$W_{\text{mf}}(\vec{r}) = g \int |\psi(\vec{r}')|^2 \delta(\vec{r}_m - \vec{r}') d^3r' = (N-1)g |\psi(\vec{r})|^2, \quad (2.103)$$

con lo que obtenemos a la ecuación de *Gross-Pitaevskii*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + (N-1)g |\psi(\vec{r})|^2 \right) \psi(\vec{r}, t), \quad (2.104)$$

la cual es una ecuación no lineal. El efecto de las interacciones binarias en un condensado de Bose-Einstein está determinada en una primera aproximación por la longitud de dispersión del potencial binario.

Rango Efectivo Para el caso de onda- s , los parámetros α y r_e que aparecen en (2.76) son *la longitud de dispersión* y el *rango efectivo* respectivamente. El rango efectivo se puede usar cuando se requiere una aproximación de mayor orden para la amplitud de dispersión. A continuación desarrollaremos una expresión para r_e que da lugar al nombre de rango efectivo y que originalmente fue desarrollada por Bethe[Bet49]. Empezamos considerando dos soluciones a la ecuación radial de onda- s con energía distinta

$$u_1(r) = u_0(k_1, r); \quad u_2(r) = u_0(k_2, r). \quad (2.105)$$

De aquí se sigue que

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_1^2 - U(r) \right] u_1(r) = 0 \quad (2.106)$$

y

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_2^2 - U(r) \right] u_2(r) = 0. \quad (2.107)$$

Multiplicando la ecuación (2.106) por u_2 , la (2.107) por u_1 y restándolas obtenemos

$$\frac{d}{dr} (u_1 u_2' - u_2 u_1') = (k_1^2 - k_2^2) u_1 u_2, \quad (2.108)$$

donde la prima indica derivada respecto a r .

Por otro lado, sean v_1 y v_2 las soluciones a la ecuación radial sin potencial

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_1^2 \right] v_1(r) = 0, \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + k_2^2 \right] v_2(r) = 0 \quad (2.109)$$

con la condición de que

$$u_i(r) = v_i(r) \quad \text{cuando } r \gg a \text{ para } i = 1, 2. \quad (2.110)$$

Además, elegimos una normalización donde $v_i(0) = 1$. De aquí se sigue que

$$v_i(r) = \frac{\sin(k_i r + \delta_0(k))}{\sin \delta_0(k)}. \quad (2.111)$$

³El utilizar una interacción no regularizada supone la aplicación de este potencial a funciones no singulares en el origen.

De manera análoga a como obtuvimos la expresión (2.108) tenemos que

$$\frac{d}{dr} (v_1 v_2' - v_2 v_1') = (k_1^2 - k_2^2) v_1 v_2. \quad (2.112)$$

Así, restando (2.112) a (2.108) e integrando respecto a r de 0 a ∞ , obtenemos que

$$[u_1 u_2' - u_2 u_1' - v_1 v_2' + v_2 v_1']_0^\infty = (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty (u_1 u_2 - v_1 v_2) dr. \quad (2.113)$$

Finalmente, a partir de las propiedades (2.111), (2.110) y las condiciones de frontera, tenemos que

$$k_1 \cot \delta_0(k_1) - k_2 \cot \delta_0(k_2) = (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty (v_1 v_2 - u_1 u_2) dr. \quad (2.114)$$

Cabe destacar que no se utilizó ninguna aproximación para encontrar la ecuación anterior.

Para el caso particular en el que $k = k_1$ y $k_2 \rightarrow 0$, la ecuación toma la forma

$$k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{\alpha} + k^2 \int_0^\infty (v_k v_0 - u_k u_0) dr. \quad (2.115)$$

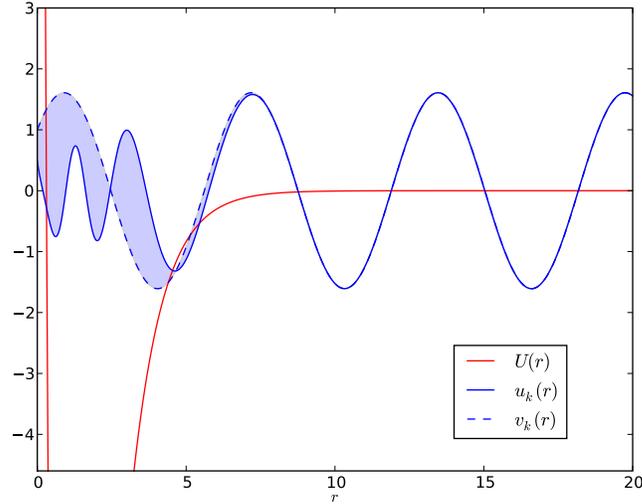


Figura 2.8: Contribución a la integral de rango efectivo (2.115).

El punto importante es que la contribución del integrando en la ecuación (2.115) será distinta de cero únicamente en la región “interna”, es decir, dentro del “rango” del potencial, donde es posible aproximar a u_k por u_0 y a v_k por v_0 ⁴. Entonces, la ecuación (2.115) se vuelve la *ecuación de rango efectivo*

$$k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{2} r_e k^2 + \dots, \quad (2.116)$$

⁴Este reemplazo se justifica por el hecho que en $r = 0$ se tiene $u_k = u_0 = 0$ y $v_k = v_0 = 1$. Además $|U| \gg k^2$ en (2.106-2.107).

donde

$$r_e = 2 \int_0^\infty (v_0^2 - u_0^2) dr. \quad (2.117)$$

El factor de dos que antecede a la integral ha sido elegido de esa manera para que un potencial de esferas duras de radio a se tenga que $r_e = a$.

Por ejemplo, para el potencial de pozo cuadrado definido por la función (2.84) el rango efectivo está dado por[Cas07]

$$r_e = r_0 - \frac{r_0^3}{3\alpha^2} - \frac{1}{\kappa_0^2\alpha}. \quad (2.118)$$

La Figura (4.9a) muestra el comportamiento de r_e en función de κ^2 . Cabe destacar que, en general, el rango efectivo puede tomar valores de $-\infty$ a ∞ . En particular, en resonancia puede ser negativo o positivo[JLPC08].

Onda- p ($l = 1$)

Las colisiones de onda- s son suficientes para describir colisiones entre átomos bosónicos a muy bajas energías. Sin embargo, el Principio de Exclusión de Pauli únicamente permite colisiones con l impar entre fermiones idénticos, por lo que es necesario estudiar las colisiones polarizadas (de onda- p) para describirlas. Un enfoque ingenuo para describir estas colisiones consiste en hacer una analogía al caso de onda- s , es decir, caracterizar las colisiones con un único parámetro llamado *volumen de dispersión* definido a partir del desarrollo(2.76) y que está dado por

$$\alpha_p^3 = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_p(k)}{k^3} \quad (2.119)$$

y definir un potencial de contacto que resulte en el mismo volumen de dispersión. Sin embargo, este enfoque no es adecuado según [JLPC08]. Tanto la energía de un estado ligado como su normalización, además de depender del volumen de dispersión, dependen del siguiente término en el desarrollo (2.76). Así, en contraste con el caso de onda- s donde $r_e^{(s)}$ puede tomar cualquier signo cerca de una resonancia, $r_e^{(p)}$ necesariamente es negativo[JLPC08]. Además, de acuerdo con [JLPC08], para potenciales de soporte compacto de radio a se tiene que

$$r_e^{(p)} \leq -\frac{2}{a} \quad (2.120)$$

cerca de donde $|\alpha_p| \rightarrow \infty$. De hecho, mientras más chico sea el rango real del potencial a , más importante será $r_e^{(p)}$.

Potencial Modelo Debido a que tanto α_p como $r_e^{(p)}$ son necesarios para hacer una descripción correcta del proceso de dispersión, un potencial modelo simplificado análogo al discutido para el caso de onda- s debe, por lo menos, contener la información de ambos parámetros. Huang y Yang[HY57] propusieron una generalización para el método de pseudopotenciales utilizados en onda- s , sin embargo se han encontrado errores en su método y una formulación general es actualmente motivo de discusión[Pri06][IC06]. En [IC06] se propone un pseudopotencial de la forma

$$V_p(\vec{r}) = \frac{\pi \hbar^2 a_p(k)^3}{\mu} \overleftarrow{\nabla} \delta(\vec{r}) \overrightarrow{\nabla} r \frac{\partial^3}{\partial r^3} r^2, \quad (2.121)$$

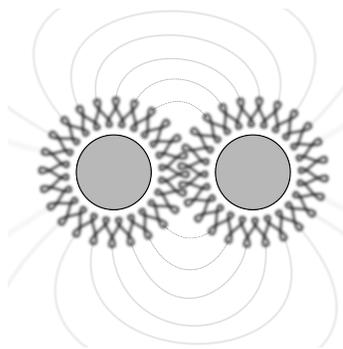
donde el símbolo $\overleftarrow{\nabla}$ denota el operador gradiente que actúa hacia la izquierda, mientras que $\overrightarrow{\nabla}$ actúa hacia la derecha. Además,

$$a_p(k)^3 = -\frac{\tan \delta_p(k)}{k^3}, \quad (2.122)$$

incorporando así la información completa del desarrollo (2.76) y, en particular, los parámetros α_p y $r_e^{(p)}$.

Hemos expuesto cómo el proceso de dispersión a bajas energías puede caracterizarse por muy pocos parámetros. En particular, para describir colisiones entre fermiones idénticos, la dispersión de onda- p juega un papel central. Entender este tipo de sistemas resulta cada vez más importante [TFMK01][RTBJ03][SZS⁺05] y es en el contexto de estos trabajos que hacemos el estudio de colisiones polarizadas.

CAPÍTULO 3



POTENCIAL DE MORSE

Un potencial isotrópico que modele la interacción entre dos átomos neutros capaces de formar una molécula debe tender asintóticamente a cero cuando la distancia relativa entre estos tienda a infinito, tener una distancia de equilibrio y reflejar la repulsión entre los núcleos a cortas distancias. En este capítulo utilizaremos el potencial de Morse para modelar la interacción entre los átomos. Este potencial cumple con las primeras dos características que hemos dado. Sin embargo, sólo satisface la tercera de manera aproximada. A pesar de esto, utilizar este potencial nos permitirá obtener expresiones analíticas para parámetros de dispersión de onda- s discutidos en el Capítulo 2.

Para encontrar las soluciones analíticas es necesario incorporar al problema matemático la región no física $r \in (-\infty, 0)$. Este hecho, junto con la ausencia de una singularidad en el potencial, tendrá como efecto que las soluciones no se anulen en el origen. Sin embargo, para valores realistas de los parámetros del potencial, éste toma valores tan grandes en $r = 0$ que, en lo que respecta a las funciones de onda y los niveles de energía, los errores debidos a la aproximación suelen ser despreciables [Mor29]. Cabe destacar que para las soluciones no ligadas, entre mayor sea la energía, menos adecuado es el tratamiento a base del potencial de Morse. Dado que el interés principal en este trabajo es estudiar el comportamiento a baja energía, esto no representa un problema importante.

El potencial de Morse está definido por

$$V(r) = D \left[\left(1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right)^2 - 1 \right] \quad r > 0. \quad (3.1)$$

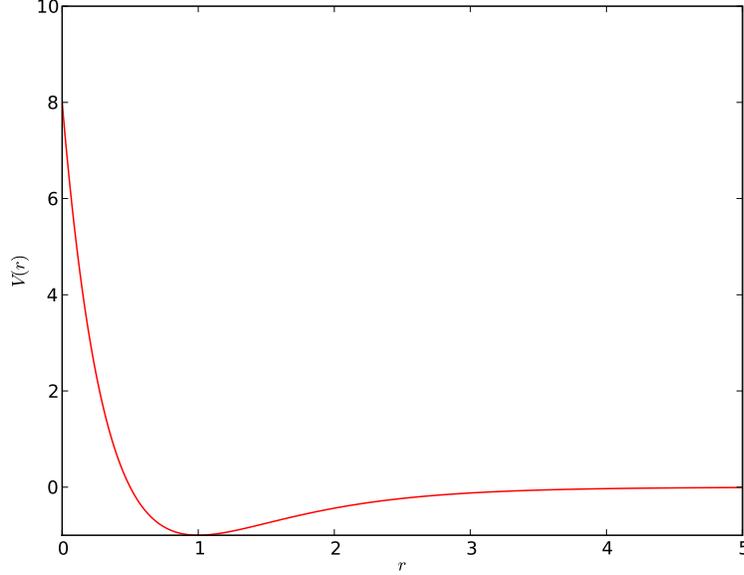


Figura 3.1: Forma típica del potencial de Morse ($\beta = \ln 4$, $r_0 = 1$, $D = 1$).

Para encontrar las soluciones radiales a la ecuación de Schrödinger con este potencial es necesario resolver la ecuación (2.31):

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + q - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l(q, r) = 0, \quad (3.2)$$

donde $U = \frac{2\mu V}{\hbar^2}$, $U_0 = \frac{2\mu D}{\hbar^2}$, $q = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$ y $R_l(k, r) = \frac{u_l(k, r)}{r}$ es la solución radial que se busca. Para el caso en el que $l = 0$ la ecuación (3.2) queda de la siguiente forma para el potencial (3.1):

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + q - U_0 \left[\left(1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right)^2 - 1 \right] \right] u_0(q, r) = 0. \quad (3.3)$$

A partir de esto, procedemos haciendo el cambio de variable $s = e^{-\beta(r-r_0)}$, con lo que se obtiene,

$$\left[\beta^2 s \frac{d}{ds} + \beta^2 s^2 \frac{d^2}{ds^2} + q - U_0 \left[(1-s)^2 - 1 \right] \right] u_0(q, s) = 0. \quad (3.4)$$

Por otra parte, si definimos $d^2 = U_0/\beta^2$ y $\epsilon = q/\beta^2$, la expresión anterior se puede reescribir como

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{d}{ds} + \frac{\epsilon}{s^2} + \frac{2d^2}{s} - d^2 \right] u_0(\epsilon, s) = 0. \quad (3.5)$$

Analizamos las soluciones en los casos límite. Si $s \gg 1$, la ecuación toma la forma

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} - d^2 \right] u_0(\epsilon, s) = 0, \quad (3.6)$$

por lo que $u_0(\epsilon, s) \propto e^{-ds}$. Por otra parte, si $s \ll 1$,

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{d}{ds} + \frac{\epsilon}{s^2} \right] u_0(\epsilon, s) = 0, \quad (3.7)$$

de manera que proponemos una solución de la forma s^σ y, al sustituir en la ecuación (3.7), se obtiene la siguiente relación algebraica

$$\sigma(\sigma - 1) + \sigma + \epsilon = 0. \quad (3.8)$$

Habiendo llegado a este punto se desprenden dos casos dependiendo del signo de ϵ . El caso $\epsilon < 0$ corresponde a estados de energía negativa por lo que son estados ligados. Por otro lado, si $\epsilon > 0$ se tienen estados de energía positiva, es decir, estados no ligados.

3.1. Estados ligados

Los estados ligados están determinados por tener energía negativa. Para éstos, definimos $b^2 = -4\epsilon$ con $b > 0$. En este caso, la ecuación (3.8) queda de la forma

$$\sigma(\sigma - 1) + \sigma - \frac{b^2}{4} = 0, \quad (3.9)$$

la cual tiene como soluciones $\sigma_+ = b/2$ y $\sigma_- = -b/2$. Debido a la simetría de las soluciones, podemos suponer sin pérdida de generalidad que $b > 0$. Por otro lado, podemos observar que la solución correspondiente a σ_- no es aceptable pues diverge en el origen. Así, a partir de este análisis se propone una solución a la ecuación (3.5) aprovechando las soluciones asintóticas, es decir, proponemos una solución de la forma $u_0(b, s) = e^{-ds}(2ds)^{b/2}f(s)$, haciendo el cambio de variable $z = 2ds$, obtenemos que

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (1 + b - z) \frac{d}{dz} + \left(d - \frac{b}{2} - \frac{1}{2} \right) \right] f(z) = 0. \quad (3.10)$$

La ecuación obtenida es la *ecuación de Kummer*, cuya solución general está dada por [AS64, ecs. 13.1.1,13.1.11]

$$f(z) = C_1 M(-n, 1 + b_n, z) + C_2 U(-n, 1 + b_n, z), \quad (3.11)$$

con $M(-n, 1 + b_n, z)$ y $U(-n, 1 + b_n, z)$ funciones confluentes hipergeométricas del primer y segundo tipo respectivamente. En esta ecuación C_1 y C_2 son constantes por determinar y se ha llamado $n = d - \frac{b_n}{2} - \frac{1}{2}$. Además, como $U(-n, 1 + b_n, z)$ no está acotada cuando $z \rightarrow 0$, $C_2 = 0$. Así, llamando $C = C_1$ tenemos que

$$f(z) = CM(-n, 1 + b_n, z). \quad (3.12)$$

Por otra parte, si pedimos que $u_0 \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow -\infty$ entonces obtenemos que n debe ser un entero no negativo. Así, como $b_n > 0$, $0 \leq n < d - \frac{1}{2}$. Por otro lado, el número de estados N que caben en el potencial es el mayor entero que satisface

$$N \leq d + \frac{1}{2}. \quad (3.13)$$

De este modo, el hecho que n sea entero determina la cuantización de los niveles de energía, los cuales quedan dados por

$$b_n = d - n - \frac{1}{2} \text{ con } n \in 0, 1, 2, \dots \quad (3.14)$$

o bien

$$E_n = -D + \hbar\beta\sqrt{\frac{2D}{m}} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2\beta^2}{2m} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (3.15)$$

En este caso, la función M se reduce a un polinomio generalizado de Laguerre con lo que la solución queda como

$$u_0(b_n, s) = C e^{-ds} (2ds)^{b_n/2} L_n^{(b_n)}(2ds). \quad (3.16)$$

La ventaja que tiene agregar la región no física de $r < 0$ al planteamiento del problema radica en que las expresiones obtenidas para las funciones de onda y las energías son sencillas. De no hacerlo, los valores cuantizados que tomaría n serían las raíces de la ecuación en n dada por

$$M(-n, 1 + b_n, 2de^{\beta r_0}) = 0, \quad (3.17)$$

que proviene de pedir que $u_0|_{r=0} = 0$. Como se puede ver en la Figura (3.2), donde se grafican las soluciones obtenidas, el precio que se paga por estas expresiones sencillas no es significativo, pues en $r = 0$ el valor que toma la función radial u_0 es prácticamente cero.

Para determinar la constante de normalización usaremos que [Sag78]

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} R_0^2 r^2 dr = \int_{-\infty}^{\infty} u_0^2 dr = \int_0^{\infty} \frac{u_0^2}{s\beta} ds \quad (3.18)$$

$$= \frac{C^2}{\beta} \int_0^{\infty} e^{-z} z^{b_n-1} \left(L_n^{(b_n)}(z) \right)^2 dz \quad (3.19)$$

$$= \frac{C^2}{\beta} \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(1 + b_n + n)}{k!} \quad (3.20)$$

$$= \frac{C^2}{\beta} \frac{\Gamma(1 + b_n + n)}{n! b_n} \quad (3.21)$$

Por lo tanto,

$$C = \left(\frac{\beta b_n n!}{\Gamma(b_n + n + 1)} \right)^{1/2}, \quad (3.22)$$

con lo cual, las soluciones ligadas han quedado completamente determinadas.

Recordemos que a partir de la ecuación (3.3) trabajamos con el caso $l = 0$. Para valores mayores de l no se ha encontrado una solución analítica, sin embargo, hemos resuelto numéricamente las soluciones de onda- p . En la figura (3.3) se muestra un ejemplo de las soluciones obtenidas.

3.2. Estados no-ligados

Análogamente al caso anterior, se define $b^2 = 4\epsilon$. Ahora la ecuación (3.8) toma la forma

$$\sigma(\sigma - 1) + \sigma + \frac{b^2}{4} = 0, \quad (3.23)$$

con soluciones $\sigma_+ = ib/2$ y $\sigma_- = -ib/2$. Elegimos σ_+ arbitrariamente para proponer una solución basada en el comportamiento asintótico. Dicha solución tiene la forma $u_0(b, s) = e^{-ds} (2ds)^{ib/2} f(s)$. A continuación hacemos el cambio de variable $z = 2ds$, con lo que obtenemos la ecuación

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (1 + ib - z) \frac{d}{dz} + \left(d - \frac{ib}{2} - \frac{1}{2} \right) \right] f(z) = 0. \quad (3.24)$$

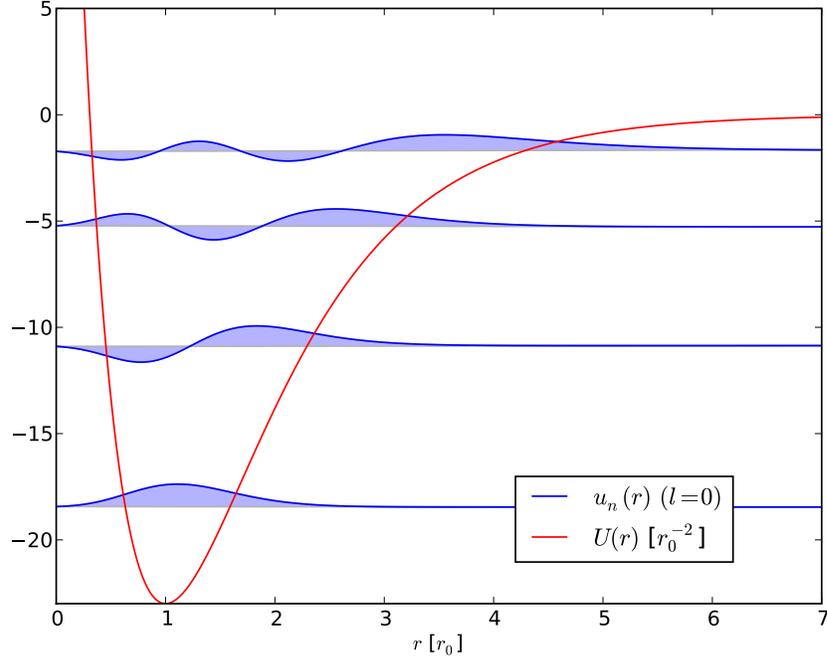


Figura 3.2: Forma de las soluciones radiales ligadas de onda- s para un potencial de Morse con cuatro estados ligados. Las funciones radiales son adimensionales mientras que el potencial reducido está graficado en unidades de r_0^{-2} .

La ecuación obtenida es nuevamente la *ecuación de Kummer*. Podemos escribir la solución general como [AW05, p. 863]

$$f(z) = C_1 M\left(\frac{1}{2} + \frac{ib}{2} - d, 1 + ib, z\right) + C_2 z^{-ib} M\left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d, 1 - ib, z\right), \quad (3.25)$$

donde C_1 y C_2 son constantes por determinar y $M(a, c, z) = {}_1F_1(a; c; z)$ es la función de Kummer del primer tipo. De esta manera,

$$u_0(b, s) = e^{-ds} C_1 (2ds)^{ib/2} M\left(\frac{1}{2} + \frac{ib}{2} - d, 1 + ib, 2ds\right) + e^{-ds} C_2 (2ds)^{-ib/2} M\left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d, 1 - ib, 2ds\right) \quad (3.26)$$

De forma análoga a como se hizo en el caso ligado, hacemos uso de la condición en $r \rightarrow -\infty$ para obtener una solución sencilla. Queremos que cuando $r \rightarrow -\infty$, suceda que $u_0 \rightarrow 0$. Como $s = e^{-\beta(r-r_0)}$, tenemos que si $r \rightarrow -\infty$, $s \rightarrow \infty$ por lo que [AS64, ec. 13.1.4]

$$u_0(b, s) \xrightarrow{r \ll 0} e^{ds} (2ds)^{-d-\frac{1}{2}} \left[C_1 \frac{\Gamma(1+ib)}{\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{ib}{2} - d)} + C_2 \frac{\Gamma(1-ib)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d)} \right]. \quad (3.27)$$

Como $e^{ds} (2ds)^{-d-\frac{1}{2}} \rightarrow \infty$ cuando $r \rightarrow -\infty$, es necesario pedir en la en (3.27) que lo que

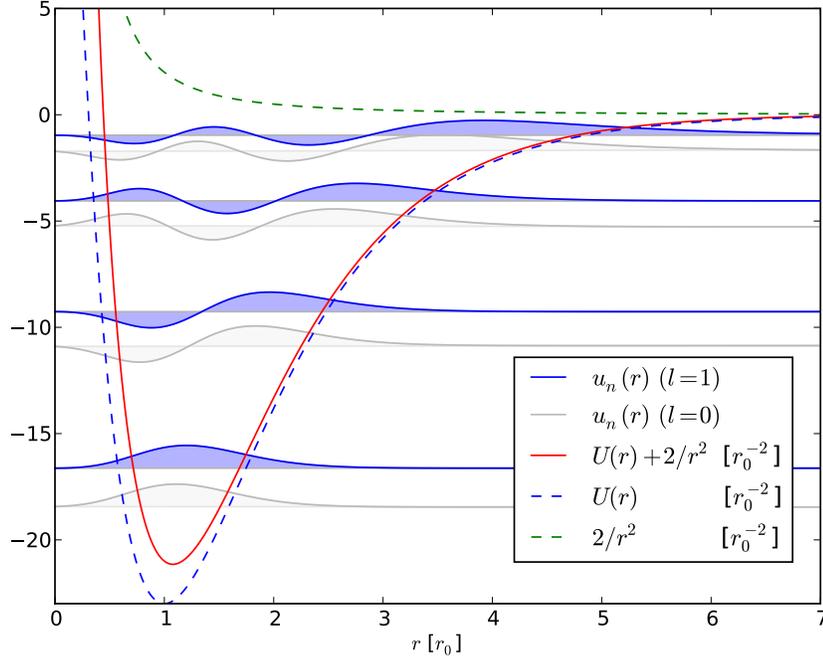


Figura 3.3: Forma de las soluciones radiales ligadas de onda- p para un potencial de Morse con cuatro estados ligados. Mostramos el potencial efectivo $U(r) + \frac{2}{r^2}$ además de cada una de sus componentes por separado.

está entre corchetes se anule, es decir,

$$\frac{C_1}{C_2} = -\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{ib}{2} - d\right) \Gamma(1 - ib)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d\right) \Gamma(1 + ib)} = \frac{\Gamma(-ib)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d\right)} \overline{\left(\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d\right)}{\Gamma(-ib)}\right)}. \quad (3.28)$$

Así, si definimos $A(b) = \Gamma(-ib) / \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d\right)$, se satisface la condición buscada con $C_1 = C_k A(b)$ y $C_2 = C_k \overline{A(b)}$, donde C_k es una constante de normalización que depende de k . Las soluciones quedan dadas por

$$u_0(b, s) = 2e^{-ds} C_k \Re \left\{ A(b) (2ds)^{ib/2} M\left(\frac{1}{2} + \frac{ib}{2} - d, 1 + ib, 2ds\right) \right\}. \quad (3.29)$$

Nótese que de haber elegido σ_- para proponer la solución, la simetría con la que aparecen $ib/2$ y $-ib/2$ en la solución nos llevaría a obtener el mismo resultado. En la Figura 3.4 se muestra la forma de las soluciones.

3.2.1. Comportamiento asintótico

Es importante analizar el comportamiento asintótico de la solución pues tanto el desfase como la constante de normalización C_E dependen de esto. Cuando $r \rightarrow \infty$ se

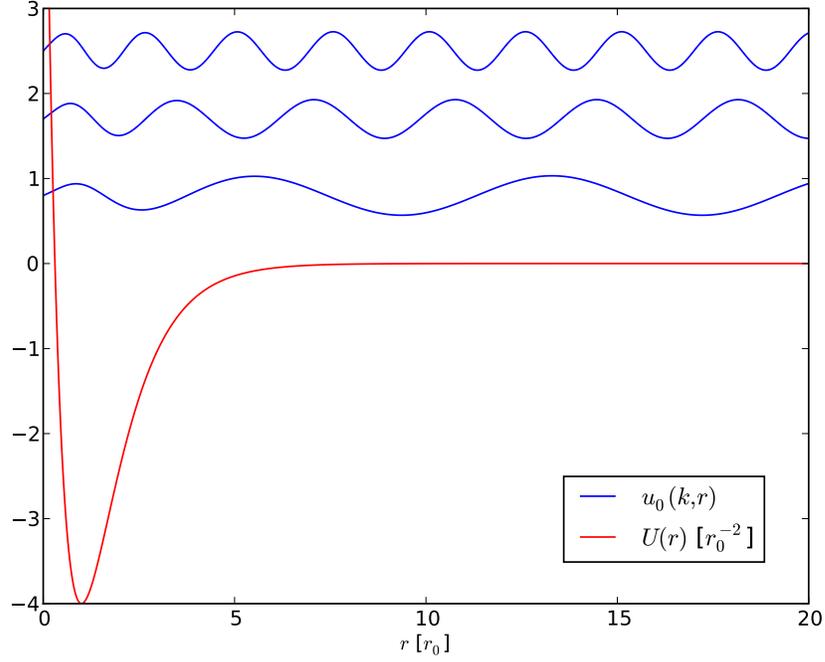


Figura 3.4: Forma de las soluciones no-ligadas con $l = 0$ para distintas energías.

tiene que $s \rightarrow 0$ de tal manera que (3.29) queda de la forma

$$u_0(b, s) \xrightarrow{s \rightarrow 0} 2C_k \Re \left\{ A(b)(2ds)^{ib/2} \right\}. \quad (3.30)$$

En términos de r la expresión anterior se ve como

$$u_0(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 2C_k \Re \left\{ A(k)(2d)^{ik/\beta} e^{-ik(r-r_0)} \right\}, \quad (3.31)$$

donde $k = \frac{\beta b}{2} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Equivalentemente, podemos escribir

$$u_0(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 2C_k \left(\Re \left\{ A(k)(2d)^{ik/\beta} e^{ikr_0} \right\} \cos(kr) - \Im \left\{ A(k)(2d)^{ik/\beta} e^{ikr_0} \right\} \sin(kr) \right) \quad (3.32)$$

Ya que conocemos el comportamiento asintótico podemos obtener el desfaseamiento y la normalización.

Desfaseamiento

Podemos calcular el desfaseamiento a partir de la ecuación (3.32) haciendo uso de (2.44)

$$\tan \delta_0(k) = \frac{\Re \left\{ A(k)(2d)^{ik/\beta} e^{ikr_0} \right\}}{\Im \left\{ A(k)(2d)^{ik/\beta} e^{ikr_0} \right\}}. \quad (3.33)$$

Por otro lado, $\tan(\arg(i\bar{z})) = \frac{\Re\{z\}}{\Im\{z\}}$, por lo que

$$\delta_0(k) = \arg\left(i \overline{(A(k)(2d)^{ik/\beta} e^{ikr_0})}\right) \quad (3.34)$$

$$= \frac{\pi}{2} - \arg A(k) - \frac{k}{\beta} \log(2d) - kr_0. \quad (3.35)$$

Además

$$\arg A(b) = \arg \Gamma(-ib) - \arg \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d\right). \quad (3.36)$$

Por otro lado[AS64, ecs. 6.1.27,6.3.16]

$$\arg \Gamma(x + iy) = -\gamma y + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{y}{n} - \arctan \frac{y}{x+n-1} \right) \quad (x + iy \neq 0, -1, -2, \dots), \quad (3.37)$$

donde γ la constante de Euler-Mascheroni. Para el caso en el que $x = 0$ se obtiene la expresión

$$\arg \Gamma(iy) = -\gamma y - \text{sign}(y) \frac{\pi}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{y}{n} - \arctan \frac{y}{n} \right), \quad (3.38)$$

y ,finalmente,

$$\delta_0(k) = -\frac{k}{\beta} (\gamma + \ln(2d) + \beta r_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{k}{\beta n} - \arctan \frac{2k}{\beta n} + \arctan \frac{k}{\beta(n-d-\frac{1}{2})} \right). \quad (3.39)$$

Normalización

Utilizando el desfaseamiento podemos reescribir la solución (3.32) como

$$u_0(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 2C_k |A(k)| \sin(kr + \delta_0(k)). \quad (3.40)$$

Para normalizar las soluciones no-ligadas es necesario que, asintóticamente, la solución tome la forma [Fri98]

$$u_0(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta_0(k)). \quad (3.41)$$

Por lo tanto, la ecuación que determina el valor de C_k es

$$C_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi} |A(k)|} \quad (3.42)$$

$$= \frac{1}{\pi} \left(\frac{\frac{k}{\beta} \sinh 2\pi \frac{k}{\beta}}{\nu^2 + \frac{k^2}{\beta^2}} \right)^{1/2} e^{\gamma\nu} \prod_{n=1}^{\infty} \left[\left(1 - \frac{\nu}{n} \right)^2 + \left(\frac{k}{\beta n} \right)^2 \right]^{-1/2} e^{-\nu/n}, \quad (3.43)$$

con $\nu = d - \frac{1}{2}$.

Comportamiento a Baja Energía

Concluimos este capítulo calculando la longitud de dispersión y el rango efectivo que resultan del potencial de Morse. Para esto, calculamos primero el comportamiento de $\delta_0(k)$ a baja energía. Luego, escribiendo el desarrollo (2.76) podemos identificar los coeficientes con los parámetros buscados.

Comenzaremos utilizando el hecho de que $\arctan x = x - \frac{x^3}{3} + O(x^5)$ para reescribir la serie que aparece en (3.39) como

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{k}{\beta n} - \frac{2k}{\beta n} + \frac{1}{3} \left(\frac{2k}{\beta n} \right)^3 + \frac{k}{\beta (n-d-\frac{1}{2})} - \frac{1}{3} \left(\frac{k}{\beta (n-d-\frac{1}{2})} \right)^3 + O(k^5), \quad (3.44)$$

cuando $k/\beta \ll 1$. O bien, podemos escribirla como

$$- [\psi(\frac{1}{2}-d) + \gamma] \frac{k}{\beta} + \left[\frac{1}{6} \psi^{(2)}(\frac{1}{2}-d) + \frac{8}{3} \zeta(3) \right] \left(\frac{k}{\beta} \right)^3 + O(k^5), \quad (3.45)$$

donde $\psi^{(n)}$ es la función poligama[AS64]. Así, si definimos

$$\eta = \frac{1}{\beta} (2\gamma + \ln(2d) + \beta r_0 + \psi(\frac{1}{2}-d)) \quad (3.46)$$

y

$$\xi = \frac{1}{\beta^3} \left(\frac{1}{6} \psi^{(2)}(\frac{1}{2}-d) + \frac{8}{3} \zeta(3) \right), \quad (3.47)$$

el desfaseamiento (3.39) toma la forma

$$\delta_0 = -k\eta + k^3\xi + O(k^5). \quad (3.48)$$

Por otro lado,

$$k \cot \delta_0 = \frac{k}{\delta_0} - \frac{k\delta_0}{3} + O(\delta_0^3), \quad (3.49)$$

con lo que llegamos a que

$$k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{\eta} + k^2 \left(\frac{\eta}{3} - \frac{\xi}{\eta^2} \right) + O(k^3). \quad (3.50)$$

Identificando los términos del desarrollo (2.76) notamos que la longitud de dispersión está dada por

$$\alpha = r_0 + \frac{1}{\beta} [2\gamma + \ln(2d) + \psi(\frac{1}{2}-d)], \quad (3.51)$$

mientras que el rango efectivo resulta ser

$$r_e = \frac{2}{3}\alpha - \frac{\psi^{(2)}(\frac{1}{2}-d) + 16\zeta(3)}{3\beta^3\alpha^2} \quad (3.52)$$

Es importante destacar que cuando $d \rightarrow 0$, en α se tiene una divergencia logarítmica y no se recupera el límite libre. El origen de este problema yace en considerar la región $r \in (-\infty, 0)$ como parte del problema para obtener las soluciones analíticas. Observando la figura (3.5) notamos que, en efecto, el potencial no tiene influencia en la región $r > 0$. Sin embargo, como las soluciones se definieron en términos de condiciones de frontera (3.27) en $r \rightarrow -\infty$ el potencial sigue teniendo efecto sobre las funciones de onda sin importar qué tan pequeño sea d . No es posible recuperar el límite libre pues en términos estrictos se está tratando un problema diferente al de una partícula libre dominada por la ecuación de Schrödinger. En la Sección (4.3.2) discutimos este problema a mayor profundidad y se elabora respecto a cómo encontrar las soluciones para el potencial de Morse sin incorporar la región $r \in (-\infty, 0)$.

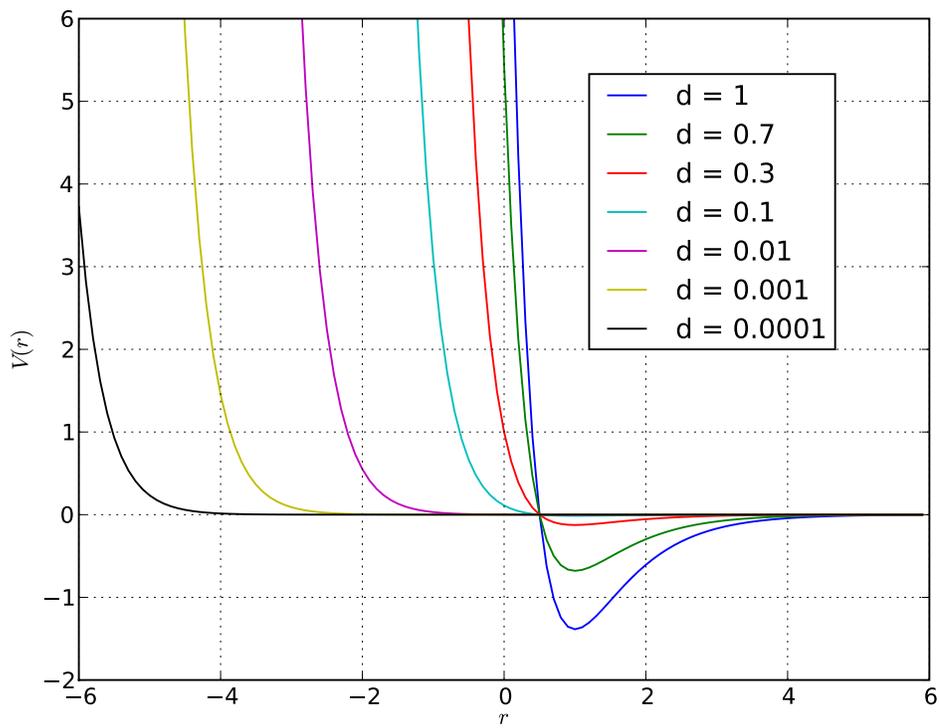
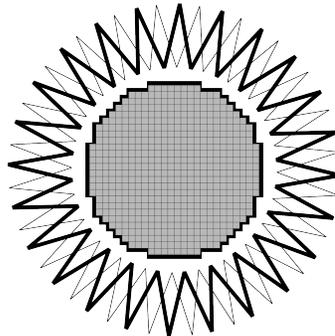


Figura 3.5: Forma del potencial de Morse para valores cada vez más chicos de d . Todos los demás parámetros se mantienen fijos.

CAPÍTULO 4



CÁLCULO NUMÉRICO DE LOS PARÁMETROS DE DISPERSIÓN A BAJAS ENERGÍAS

En este capítulo discutimos e implementamos métodos para calcular los parámetros necesarios para describir la dispersión a bajas energías por los potenciales:

- Potencial de pozo cuadrado

$$V(r) = \begin{cases} -D & \text{si } r_0 > r \geq 0 \\ 0 & \text{si } r \geq r_0 \end{cases} \quad (4.1)$$

- Potencial de Morse

$$V(r) = D \left[\left(1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right)^2 - 1 \right] \quad r > 0. \quad (4.2)$$

En particular para el potencial de Morse calculamos numéricamente los parámetros de onda- s para verificar los obtenidos en el capítulo (3) y posteriormente calculamos los parámetros de onda- p .

Además obtenemos resultados clásicos de la sección eficaz diferencial para el potencial de Morse para ejemplificar la teoría expuesta en el capítulo (2) discutiendo consideraciones específicas que deben hacerse para tratar este potencial.

Recordemos que en la Sección 2.2.4, mostramos que para el caso cuántico, las colisiones pueden ser caracterizadas por muy pocos parámetros a bajas energías. En este capítulo discutiremos el cálculo de la longitud de dispersión, el volumen de dispersión y el rango efectivo de onda- s y onda- p . Comenzamos por describir el método usualmente utilizado para calcular estos parámetros y posteriormente, discutiremos el método de Calogero que fue utilizado para obtener los resultados numéricos que presentaremos. Cabe destacar que la finalidad de ambos métodos es únicamente calcular los desfases $\delta_l(k)$ a partir de los cuales se puede calcular la longitud de dispersión y el volumen de dispersión mediante el límite

$$\alpha_l = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_l(k)}{k^{2l+1}}. \quad (4.3)$$

Consideramos el caso de dos átomos de ${}^6\text{Li}$ en el estado ${}^3\Sigma_u^+$ al que se le asocian, como parámetros del potencial de Morse, $r_0 = 4.15\text{\AA}$, $\beta = 1\text{\AA}^{-1}$ y $D = 40\text{meV} = 10.2 \frac{\hbar^2}{2\mu} r_0^{-2}$ [JS06]. Los resultados son reportados en función de la profundidad de los potenciales debido a que este trabajo tiene como finalidad sentar las bases para describir gases de interacción sintonizable mediante resonancias de Feshbach [RTBJ03][CFH⁺98][SZS⁺05]. Dado un alcance y una posición de equilibrio, la profundidad del potencial es la cantidad que determina los parámetros de dispersión.

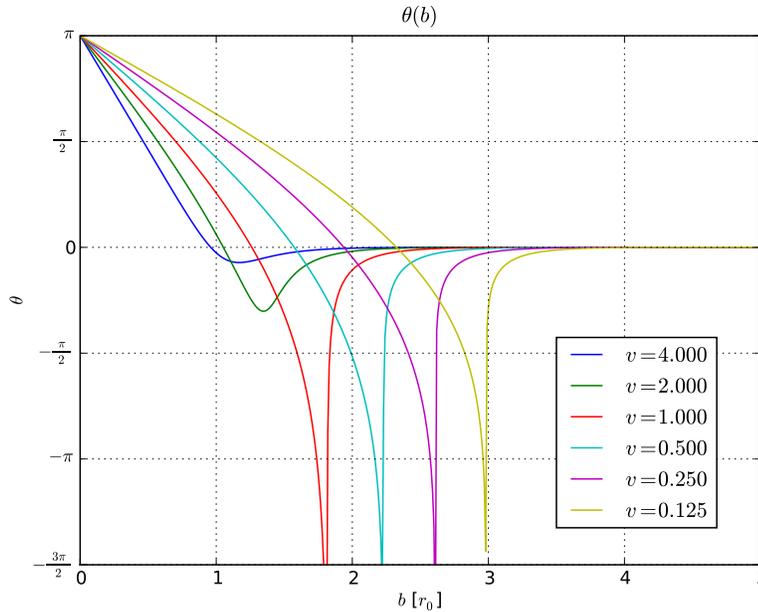


Figura 4.1: Ángulo de desviación θ en función del parámetro de impacto b y la velocidad inicial v como consecuencia de dispersión clásica por un potencial de Morse.

4.1. Sección Eficaz Clásica

Como discutimos en la sección (2.2.1), para describir un proceso de dispersión clásicamente, el primer paso es calcular el ángulo de desviación θ en función del parámetro de impacto b por medio de la integral (2.11). En la figura (4.1) mostramos la forma que toma esta función para distintos valores de la velocidad. En esta sección utilizamos las unidades $m = D = 1$.

Notemos que, a diferencia del caso del potencial de Coulomb, la función $\theta(b)$ no es inyectiva para el potencial de Morse, además de que θ puede tomar cualquier valor en $[\pi, -\infty)$. Estos hechos dificultan el tratamiento del problema usando la teoría estándar descrita usualmente en los libros de mecánica pues tan sólo la función $b(\theta)$, necesaria para calcular la sección eficaz, no está bien definida.

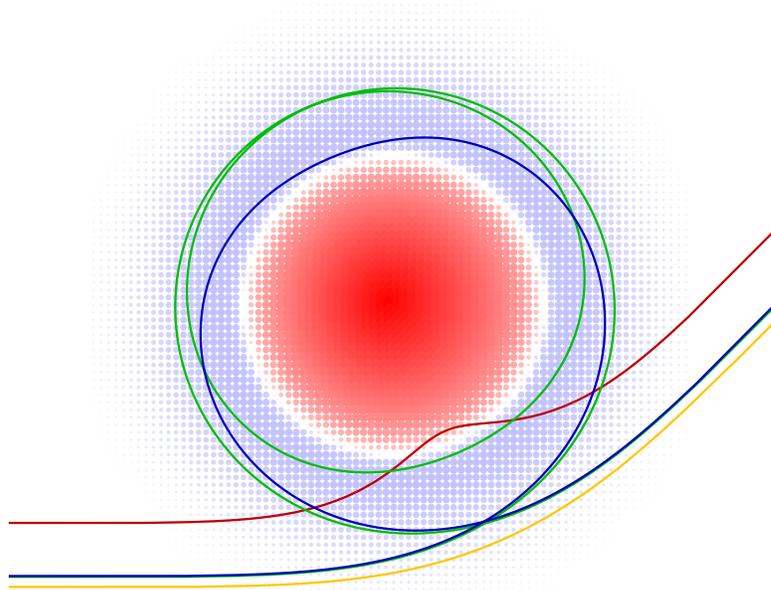


Figura 4.2: Ejemplos de comportamiento anómalo en dispersión clásica por el potencial de Morse. Tres partículas con distinto parámetro de impacto se aproximan al potencial desde el lado izquierdo. La zona azul es la región atractiva del potencial mientras que la roja es repulsiva.

En la figura (4.2) ilustramos casos anómalos que se presentan en el caso de dispersión por el potencial de Morse. Se tienen tres partículas con distinto parámetro de impacto, las cuales salen dispersadas en la misma dirección. Nótese que algunas de estas partículas dan vueltas antes de salir dispersadas. Debido a la discontinuidad que aparece en las gráficas de velocidad más baja en la figura (4.1) es posible que una partícula dé tantas vueltas como se quiera antes de continuar su camino. Además, las partículas dispersadas cuyos parámetros de impacto son cercanos a la discontinuidad tendrán una gran dispersión angular como se muestra en la figura (4.3).

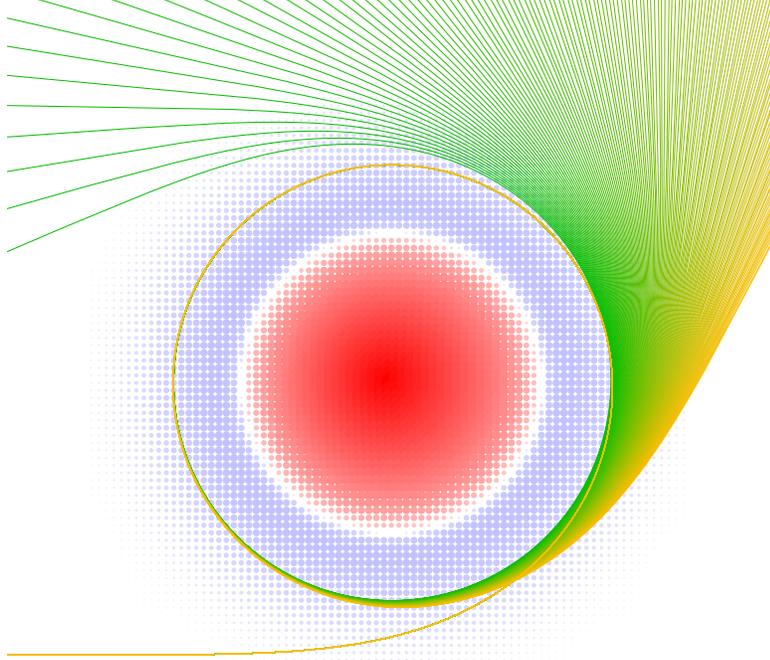


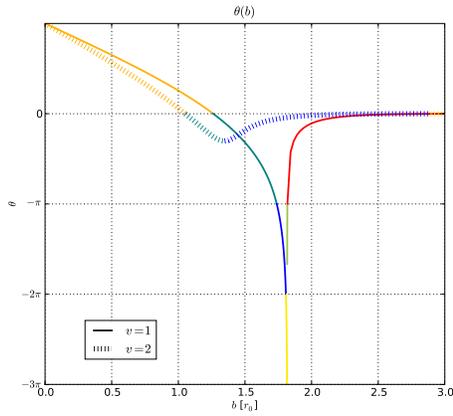
Figura 4.3: Partículas que se aproximan del lado izquierdo con parámetros de impacto muy similares salen dispersadas clásicamente en ángulos muy distintos. La zona azul es la región atractiva del potencial de Morse mientras que la roja es repulsiva. Esta figura ilustra el resultado de tener un haz de partículas con parámetro de impacto muy cercana a la discontinuidad mostrada en la Figura (4.1).

Para entender la relación que tiene $\theta(b)$ con σ en este caso, es necesario replantear la ecuación (2.4). Consideremos primero una función $\tilde{\theta}$ definida por $\tilde{\theta}(b) \equiv \theta(b)$ módulo 2π . Luego, partimos $\tilde{\theta}(b)$ en varias funciones inyectivas $\theta_1(b), \dots, \theta_n(b)$. Dado que son inyectivas podemos calcular sus inversas $b_1(\theta), \dots, b_n(\theta)$. Las partículas dispersadas a un ángulo entre θ y $\theta + d\theta$ son aquellas que provienen de los anillos con radios $b_1(\theta), \dots, b_n(\theta)$ y áreas $2\pi b_1(\theta) db_1, \dots, 2\pi b_n(\theta) db_n$ respectivamente. Por lo tanto

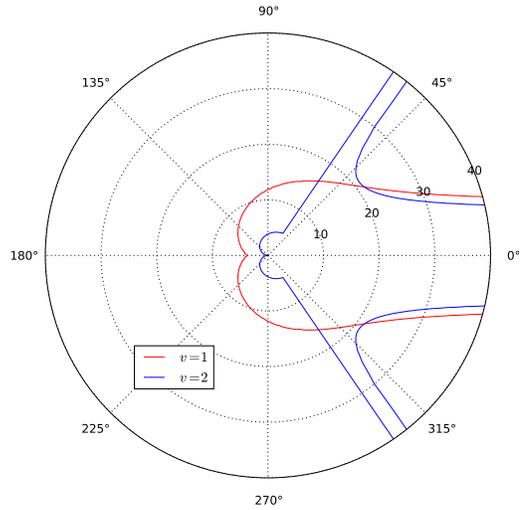
$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \sum_{i=1}^n 2\pi b_i \frac{db_i}{d\theta} = \sum_{i=1}^n \frac{d\sigma_i}{d\theta}. \quad (4.4)$$

En la figura (4.4) ejemplificamos detalladamente la definición de las θ_i 's y mostramos de qué manera éstas contribuyen a la sección eficaz diferencial.

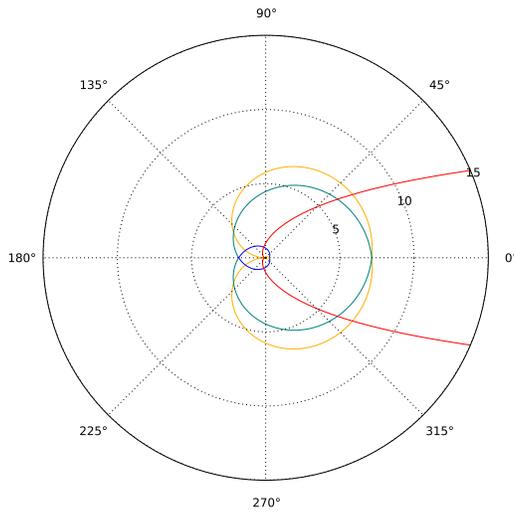
Resulta poco adecuado hacer una comparación entre el caso clásico y el cuántico de baja energía pues en este régimen el comportamiento de la materia es más bien ondulatorio. Cuando se trata de dispersión de onda-s el momento angular es nulo. De acuerdo con la integral (2.11), cuando el momento angular $L = m v b$ es cero entonces $\theta = \pi$ sin importar el valor de v . Nótese que si el potencial es siempre constante entonces el punto de retorno a no está bien definido por lo que si $L = 0$, $\theta = \pi$ sólo cuando el potencial no es constante.



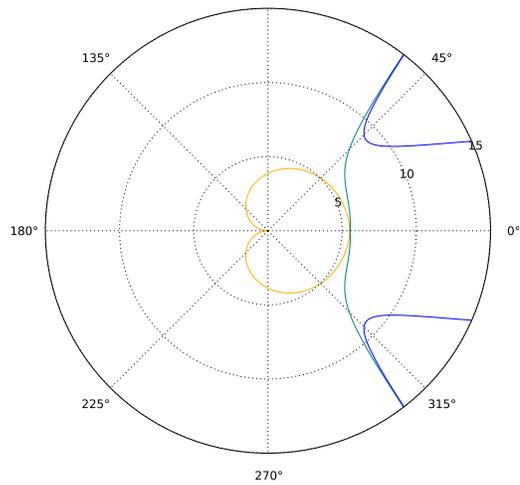
(a) $\theta(b)$ para $v = 1, 2$.



(b) $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $v = 1, 2$



(c) $\frac{d\sigma_i}{d\theta}$ con $v = 1$



(d) $\frac{d\sigma_i}{d\theta}$ con $v = 2$

Figura 4.4: (a) Se muestra $\theta(b)$ dividido en colores, donde cada color identifica una función $\theta_i(b)$; (b) sección eficaz diferencial resultante de sumar las contribuciones de todas las θ_i 's; (c) y (d) muestran cada contribución a $\frac{d\sigma}{d\theta}$ en distinto color. Los colores corresponden a los de la figura (a).

El punto de vista de la mecánica cuántica es esencial para describir la dispersión de átomos a baja energía. A continuación describimos el método usual para calcular los desfases de la parte radial de la función de onda cuántica. Posteriormente describiremos el método de Calogero que resulta más eficiente y conveniente que el método usual.

4.2. Amplitud de Dispersión Cuántica

Cuando el potencial tiene un *rango finito* a , ya sea estricto (para $r > a$ es nulo) o aproximado (para $r > a$ es despreciable), uno puede dividir el dominio de la variable r en una región interna ($r < a$) y una región externa ($r > a$). Las condiciones de frontera en $r = a$ son tales que tanto R_l como $\frac{dR_l}{dr}$ resulten continuas. Por medio de una manipulación algebraica, la solución exterior (2.42) puede ser escrita como

$$R_l(k, r) = \hat{A}_l(k) [j_l(kr) - \tan \delta_l n_l(kr)]. \quad (4.5)$$

Si denotamos por

$$\gamma_l = \left[\frac{1}{R_l} \frac{dR_l}{dr} \right]_{r=a} \quad (4.6)$$

a la derivada logarítmica de la solución exterior evaluada en $r = a$, encontramos que

$$\gamma_l(k) = \frac{k [j_l'(ka) - \tan \delta_l n_l'(ka)]}{j_l(ka) - \tan \delta_l n_l(ka)}, \quad (4.7)$$

donde $j_l'(ka) = \left[\frac{dj_l(x)}{dx} \right]_{x=ka}$ y $n_l'(ka) = \left[\frac{dn_l(x)}{dx} \right]_{x=ka}$. Por lo tanto,

$$\tan \delta_l(k) = \frac{kj_l'(ka) - \gamma_l(k)j_l(ka)}{kn_l'(ka) - \gamma_l(k)n_l(ka)}. \quad (4.8)$$

A partir de la ecuación (4.8) es posible calcular los desfases conociendo las funciones radiales en un punto a fuera del efecto del potencial. Esto requiere resolver la ecuación de Schrödinger que es de segundo orden. Existe un método alternativo que involucra resolver ecuaciones de primer orden y se describe a continuación.

4.3. Método de Calogero

El principal método que utilizamos en este trabajo es el presentado por Calogero en [Cal67]. Dicho método tiene varias ventajas sobre el enfoque tradicional ya que en el enfoque tradicional, es necesario primero, integrar la ecuación radial de Schrödinger (una ecuación diferencial lineal de segundo orden) desde el origen hasta la región asintótica donde el potencial es despreciable y, posteriormente comparar la fase de esta solución con la de una solución libre. En el enfoque de Calogero se integra una ecuación no lineal de primer orden desde el origen hasta la región asintótica y se obtiene directamente el valor del desfase. Para derivar este método, consideramos la forma integral de la ecuación radial de Schrödinger la cual está dada por [Cal67, eq. 2.15]:

$$u_l(k, r) = krj_l(kr) - \int_0^r [j_l(kr)n_l(ks) - j_l(ks)n_l(kr)] U(s)u_l(k, s)rs ds \quad (4.9)$$

Consideramos un valor fijo de k y definimos dos funciones auxiliares

$$s_l(r) = - \int_0^r U(s)j_l(ks)u_l(s)s ds \quad (4.10)$$

y

$$c_l(r) = 1 - \int_0^r U(s)n_l(ks)u_l(s)s ds. \quad (4.11)$$

Así, podemos escribir la ecuación (4.9) como

$$u_l(r) = kr [c_l(r)j_l(kr) - s_l(r)n_l(kr)]. \quad (4.12)$$

De acuerdo con la ecuación (4.12) y las expresiones (2.36-2.37), el comportamiento asintótico de u_l es de la forma

$$u_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} c_l(\infty) \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) + s_l(\infty) \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi). \quad (4.13)$$

Como $V(r) \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$ más rápido que r^{-1} , s_l y c_l tienen un valor finito cuando $r \rightarrow \infty$. Por otro lado, a partir de las expresiones (2.41-2.44) notamos que

$$\tan \delta_l = \frac{s_l(\infty)}{c_l(\infty)}. \quad (4.14)$$

Esto sugiere definir una función $t_l(r)$, dada por

$$t_l(r) = \frac{s_l(r)}{c_l(r)}. \quad (4.15)$$

donde

$$\lim_{r \rightarrow \infty} t_l(r) = \tan \delta_l. \quad (4.16)$$

Claramente $s_l(0) = 0$ y $c_l(0) = 1$ por lo que

$$t_l(0) = 0 \quad (4.17)$$

Por otro lado, calcularemos la derivada de $t_l(r)$. Primero, usando las ecuaciones (4.10) y (4.12), tenemos que

$$s_l'(r) = -U(r)j_l(kr)k [c_l(r)j_l(kr) - s_l(r)n_l(kr)] r^2 \quad (4.18)$$

y de las ecuaciones (4.11) y (4.12) obtenemos

$$c_l'(r) = -U(r)n_l(kr)k [c_l(r)j_l(kr) - s_l(r)n_l(kr)] r^2, \quad (4.19)$$

de tal manera que

$$t_l'(r) = -U(r)kr^2 [j_l(kr) - t_l(r)n_l(kr)]^2. \quad (4.20)$$

Tenemos ahora una ecuación diferencial de primer orden (4.20) y una condición inicial dada por la ecuación (4.17) de una función cuyo comportamiento asintótico nos da la tangente de los desfases.

La ecuación (4.20) es una *ecuación de Riccati* y sus soluciones no necesariamente están acotadas. Por tanto, hacemos un paso más, introduciendo la función de fase $\delta_l(r)$ definida por

$$t_l(r) = \tan \delta_l(r) \quad (4.21)$$

donde $\delta_l(0) = 0$. Es claro por (4.16) que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \delta_l(r) = \delta_l. \quad (4.22)$$

La ecuación diferencial resultante para $\delta_l(r)$ es

$$\delta_l'(r) = -U(r)kr^2 [\cos \delta_l(r)j_l(kr) - \sin \delta_l(r)n_l(kr)]^2 \quad (4.23)$$

y es llamada *ecuación de fase*. El valor asintótico de la función de fase puede ser identificado con el desfaseamiento. Sin embargo, para cada valor de r podemos identificar la función de fase con un desfaseamiento de dispersión. Así, podemos notar de la estructura de la ecuación de fase que el valor de la función de fase $\delta_l(\tilde{r})$ a una distancia \tilde{r} fija, es el desfaseamiento de dispersión producido por el potencial $V(r)H(\tilde{r} - r)$, donde $H(x)$ es la función escalón de Heaviside. Esto significa que $\delta_l(\tilde{r})$ es el desfaseamiento de dispersión asociado al potencial truncado a partir de \tilde{r} . Queda claro por lo anterior que $\delta_l(0) = 0$, pues corresponde al desfaseamiento de dispersión producido por un potencial completamente truncado, es decir, al de una partícula libre.

Adimensionalización

Para trabajar numéricamente con la ecuación de fase, lo ideal es trabajar con una versión adimensionalizada de la ecuación pues de esta manera sólo es necesario lidiar con las cantidades indispensables. La ecuación de fase en la forma (4.23) tiene unidades de L^{-1} , donde L es longitud. Por lo tanto, para adimensionalizar únicamente se requiere una “distancia natural” del sistema. Las cantidades que directamente tienen unidades de distancia son r_0 y β^{-1} para el potencial de Morse y r_0 en el caso del pozo cuadrado. En ambas situaciones, la cantidad elegida para adimensionalizar es r_0 . Así, definimos las cantidades $\rho = r/r_0$, $\kappa = kr_0$, $\mathcal{U}(\rho) = U(\rho r_0)/r_0^2$ con lo que la ecuación (4.23) toma la forma

$$\delta_l'(\rho) = -\mathcal{U}(\rho)\kappa\rho^2 [\cos \delta_l(\rho)j_l(\kappa\rho) - \sin \delta_l(\rho)n_l(\kappa\rho)]^2, \quad (4.24)$$

la cual es adimensional.

4.3.1. Implementación

La cantidad a calcular es la longitud generalizada de dispersión dada por

$$\alpha_l = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_l(k)}{k^{2l+1}}. \quad (4.25)$$

En términos prácticos, el límite de la expresión anterior se calcula evaluando $\tan \delta_l(k)/k^{2l+1}$ para valores “muy pequeños” de k . Para esto, primero es necesario calcular $\delta_l(k)$ integrando la ecuación (4.23) a partir de $r = 0$ con la condición inicial $\delta_l(0) = 0$ hasta $r \rightarrow \infty$. Como no es posible integrar numéricamente hasta $r \rightarrow \infty$, necesitamos considerar un valor de corte R_c “suficientemente grande” hasta el cual llevar a cabo la integración.

Comenzamos por integrar la ecuación (4.23) utilizando el método de Runge-Kutta convencional de cuarto orden (RK4)[Pan06]. Sin embargo, por la forma escalonada que tienen las soluciones mostradas en la Figura (4.5) cuando $k \rightarrow 0$, el método RK4 convencional no es adecuado, ya que si se usa un tamaño de paso muy grande, donde la pendiente de la función es grande, se obtendrán resultados con errores muy grandes, mientras que si se usa un tamaño de paso muy pequeño, se desperdiciará mucho poder de cómputo al avanzar lentamente por regiones de poco interés. A causa de esto, no fue posible obtener soluciones con apariencia continua en un tiempo de cómputo razonable, de modo que es necesario usar un método en el que el tamaño del paso se adapte a lo largo del proceso de integración. Con este motivo, utilizamos los paquetes para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de la librería científica de GNU[Gou03] (GSL) para implementar este método. Como función de paso se utilizó nuevamente el método RK4,

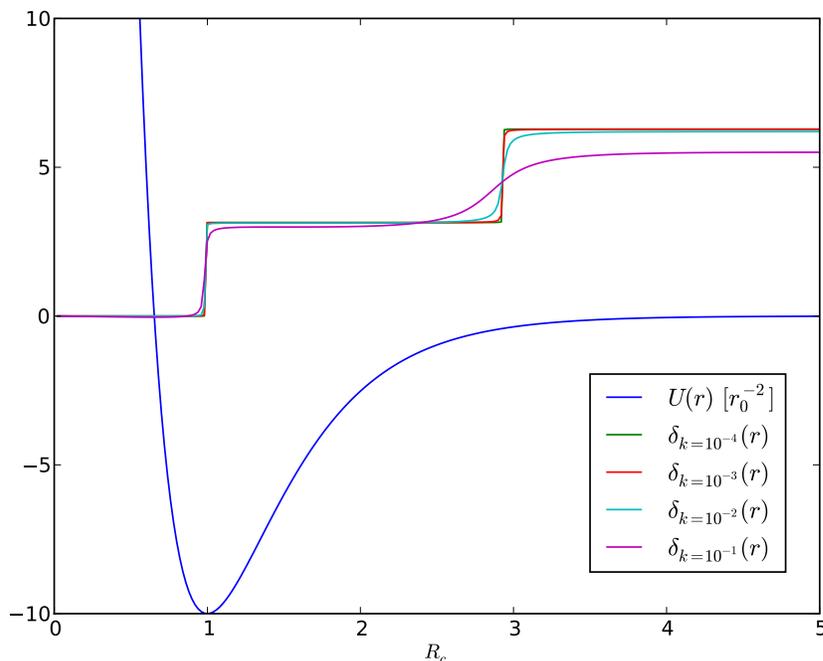


Figura 4.5: Comportamiento de $\delta_0(r)$ con el potencial de Morse para distintos valores de k .

de la GSL llamado `gsl_odeiv_step_rk4`. Sin embargo, en este caso se utilizó el evolucionador adaptativo `gsl_odeiv_control_y_new`, que mantiene el error local respecto a la solución en cada paso menor a una cota definida.

El valor elegido de R_c , la distancia de corte de las integrales, será “suficientemente grande” siempre que a partir de R_c el cambio en los desfases sea menor a la precisión numérica. Es claro por la estructura de la ecuación (4.23) que si el potencial tiene un rango finito estricto, fuera de este rango, los desfases no cambian.

El significado de valores “muy pequeños” de k es más sutil. El límite (4.25) que se quiere calcular es de la forma $0/0$. En este tipo de límites, la información está guardada en la manera en que se comporta el cociente y no en cómo se comportan el numerador y el denominador por separado. En este caso, el límite del cociente no equivale al cociente de los límites, por lo que si elegimos un valor de k demasiado chico, el numerador y denominador serán tan parecidos a cero que el cociente ya no será significativo. En la Figura (4.6) se muestra el resultado de elegir una k demasiado chica en este contexto. Por el contrario, si elegimos un valor de k muy grande, el valor obtenido será una aproximación burda de lo que se quiere obtener pues el límite (4.25) no se habrá alcanzado numéricamente.

Otro aspecto a considerar para la elección de k , es que entre más grande es el valor de l , más grande será un valor “demasiado chico” de k . A bajas energías, debido a la relación (2.72) se tiene que $\delta_l(k) \sim k^{2l+1}$, por lo que entre mayor es l , el numerador y denominador en (4.25) tienden más rápido a cero.

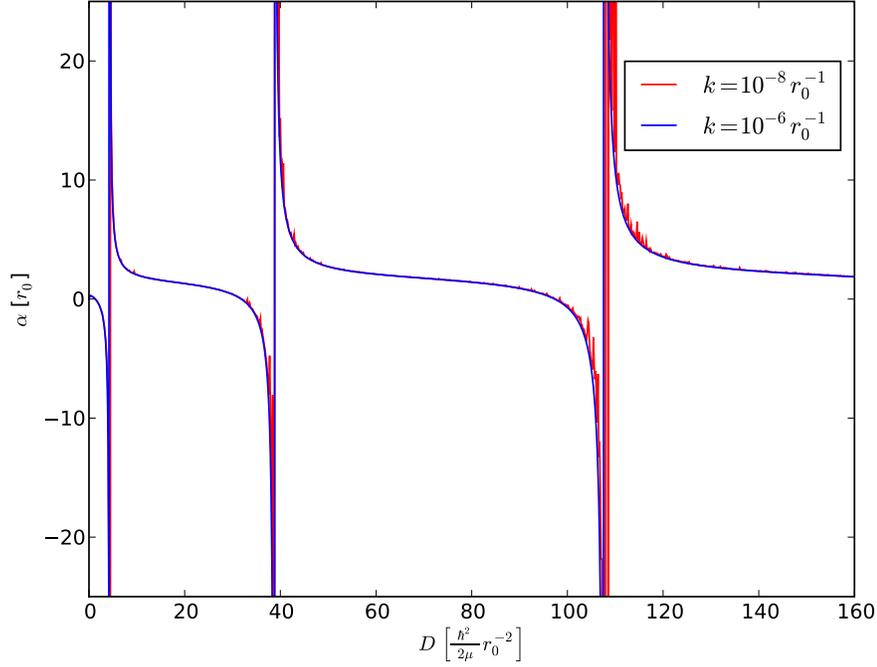


Figura 4.6: Longitud de dispersión en función de la profundidad del pozo D calculado con distintos valores de k .

Cálculo del rango efectivo

El rango efectivo es el segundo coeficiente en el desarrollo para k pequeña (2.76) que reescribimos aquí como

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) = -\frac{1}{\alpha_l} + \frac{1}{2} r_e^{(l)} k^2 + O(k^4) \quad (4.26)$$

Se utilizó un método ingenuo para calcular el rango efectivo a partir de los desfases ya conocidos. De la ecuación (4.26) se puede obtener

$$r_e = \lim_{k \rightarrow 0} 2 \frac{k^{2l+1} \cot \delta_l(k) + \frac{1}{\alpha_l}}{k^2}. \quad (4.27)$$

Para llevar a cabo este cálculo de manera numérica, calculamos primero α_l a partir del límite (4.25) usando un cierto valor k lo más pequeño posible. Posteriormente, calculamos r_e mediante el límite (4.27) usando un valor k' . Obsérvese que, necesariamente $k' > k$, pues si $k' = k$, el numerador en (4.27) sería cero. Por otro lado, si $k' < k$ no se estaría calculando (4.27).

En [Cal67] y [OJ] se presentan métodos más precisos y sofisticados para calcular r_e . Sin embargo, para los fines de este trabajo el “método ingenuo” fue suficiente.

4.3.2. Resultados

Presentamos a continuación los resultados obtenidos al analizar el potencial de Morse y el potencial de pozo cuadrado con los métodos antes mencionados.

Onda-s

En esta sección aprovechamos que contamos con resultados analíticos de onda-s para ambos potenciales para evaluar la eficacia del método numérico.

Evaluación del método numérico El primer análisis que llevamos a cabo fue comparar las soluciones obtenidas numéricamente con aquellas obtenidas analíticamente para el potencial de pozo cuadrado definido por la función (2.85) y el potencial de Morse cuya forma se muestra en la ecuación (3.51). En las Figuras (4.7a) y (4.7b) se muestran los resultados de longitud de dispersión junto con el error porcentual para cada caso. Es notable que, salvo cuando la longitud de dispersión vale cero o infinito, el error es del orden de 10^{-5} %, por lo que podemos concluir que el método numérico utilizado es adecuado y está correctamente implementado.

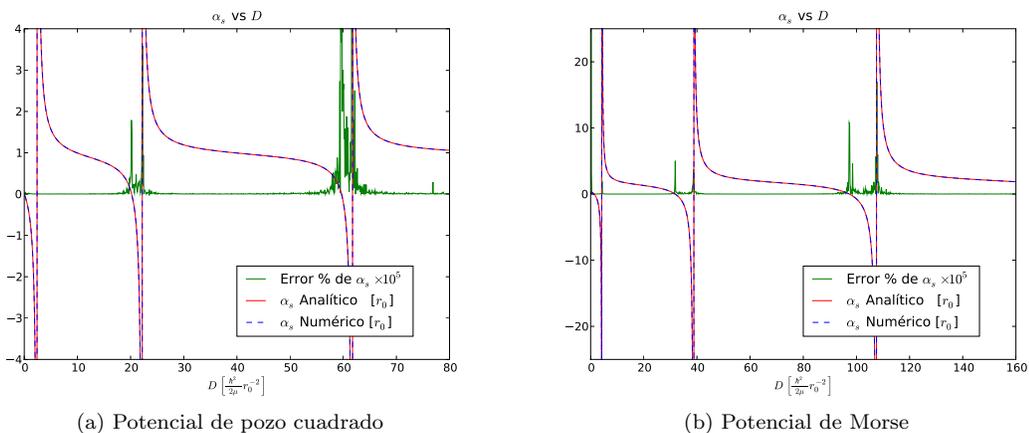


Figura 4.7: Comparación del resultado analítico y numérico de α_s para los potenciales.

A continuación comparamos los resultados analíticos y los numéricos para el rango efectivo. En primer lugar, para el potencial de Morse utilizamos la expresión (3.52) y el resultado se muestra en la Figura (4.8b). Para el pozo cuadrado recurrimos a la expresión (2.118) y los resultados se muestran la Figura (4.8a). La precisión de este cálculo es mucho menor a la obtenida para α_s pues, cerca de donde $r_e^{(s)}$ tiende a infinito, el error porcentual es del orden de 1 %, mientras que lejos de estas regiones el error es del orden de 10^{-2} %.

Análisis Cualitativo Es destacable de la Figura (4.9a) que la longitud de dispersión presenta singularidades. Estas singularidades son las resonancias de energía cero y, de hecho, sus posiciones coinciden con los valores de energía dados por la expresión (3.14). Además, en la Figura (4.9a) se ve que $r_e^{(s)}$ puede tomar cualquier valor en $(-\infty, \infty)$. Sin embargo, la Figura (4.9b) nos permite ver que para el potencial de Morse, $r_e^{(s)} > r > 0$ para algún $r \in \mathbb{R}$. Por otro lado, es común a ambos potenciales que cuando α_s se anula entonces se tiene que $|r_e^{(s)}|$ tiende a infinito.

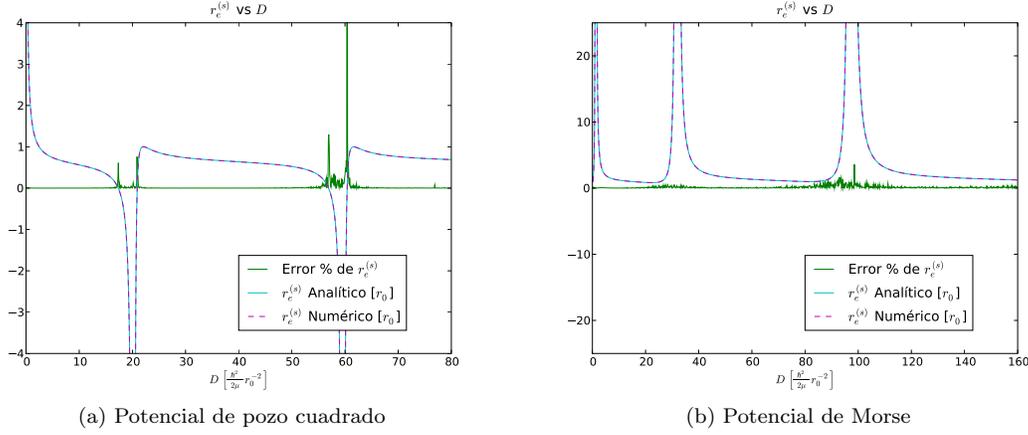


Figura 4.8: Comparación del resultado analítico y numérico de $r_e^{(s)}$ para los potenciales.

Para el potencial de Morse existe una diferencia importante entre la solución analítica y numérica cerca del origen. En la Figura (4.10) y en la ecuación (3.51) podemos ver que, cuando $D \rightarrow 0$, α_s (analítico) diverge de manera logarítmica. El problema matemático que se resuelve numéricamente es directamente el que resulta del problema físico, mientras que la expresión analítica proviene en realidad de otro problema como se discutió en la Sección (3.2.1).

Con el fin de poder hacer la comparación, es necesario regresar a la expresión (3.26) y aplicar la condición de frontera en $r = 0$ y no en $r \rightarrow -\infty$. Así, de manera análoga a como se hace para la condición $r \rightarrow -\infty$, obtenemos una solución de la forma

$$u_0(b, s) = 2iC_k e^{-ds} \Im \left\{ \tilde{A}(b) (2ds)^{ib/2} M \left(\frac{1}{2} + \frac{ib}{2} - d, 1 + ib, 2ds \right) \right\}, \quad (4.28)$$

donde

$$\tilde{A}(b) = (2ds_0)^{-ib/2} M \left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d, 1 - ib, 2ds_0 \right) \text{ con } s_0 = e^{\beta r_0}. \quad (4.29)$$

De nuevo, haciendo un desarrollo análogo al de la Sección (3.2) obtenemos que

$$\delta_0(b) = -\arg \left[(2ds_0)^{ib/2} \tilde{A}(b) \right] = -\arg M \left(\frac{1}{2} - \frac{ib}{2} - d, 1 - ib, 2ds_0 \right). \quad (4.30)$$

Nótese que debido a la estructura de $\tilde{A}(b)$, el factor $(2ds_0)^{ib/2}$ que aparece en la expresión para el desfaseamiento, del cual se obtiene el logaritmo responsable de la divergencia, es cancelado. A partir de la ecuación (4.30) es posible obtener α_s de manera semi-analítica calculando el límite (4.25) como ya fue mencionado. En la Figura (4.10) se muestra el resultado y observamos que de esta manera la solución numérica y la semi-analítica coinciden.

Agregando la región $r \in (-\infty, 0)$ al problema matemático se pueden obtener resultados sin sentido físico. Sin embargo, la región donde esto ocurre es $d \ll 1$ la cual no es de interés físico. Para valores tan pequeños del parámetro d el potencial de Morse ya no es un modelo adecuado de la interacción entre dos átomos. En la Figura (4.7b) se refleja que, excepto cuando $d \ll 1$, el tratamiento analítico que llevamos a cabo es una muy buena aproximación al problema físico.

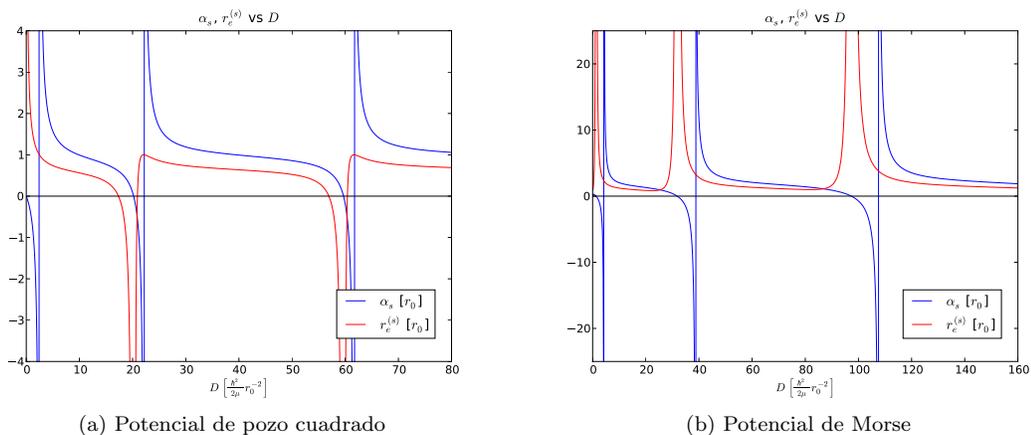


Figura 4.9: Resultados de α_s y $r_e^{(s)}$ para los potenciales.

Onda- p

A continuación presentamos los resultados de onda- p . En este caso no contamos con soluciones analíticas por lo que dependemos de resultados numéricos para llevar a cabo el análisis.

En las Figuras (4.11) y (4.12) mostramos los resultados obtenidos para α_p y $r_e^{(p)}$. Los resultados de onda- s se muestran en el fondo para comparar. Estas gráficas pueden ser útiles experimentalmente para conocer la cercanía entre resonancias con distinto valor de l y de esta manera, distinguir si se está estudiando un sólo tipo de resonancia o si hay traslape entre resonancias de onda- s y onda- p . Sin embargo, tratándose de ${}^6\text{Li}$, esto sólo será importante en caso de que el estado hiperfino de los átomos permita las colisiones de onda- s y onda- p .

Cabe destacar que en la Figura (4.11) la condición (2.120) se satisface. Para el caso del potencial de Morse el rango del potencial a no está bien definido, sin embargo, si se considera $r_0 \left(1 + \frac{\sqrt{D}}{\beta}\right)$ como el alcance a también se satisface la condición. Esta expresión para el alcance tiene el comportamiento esperado en el caso límite $\beta \rightarrow \infty$.

Para obtener las Figuras (4.11) y (4.12) fue necesario aplicar una plétora de conceptos. A partir de la ecuación de Schrödinger se obtienen soluciones dispersivas y al estudiar su comportamiento asintótico resultan los desfases de dispersión para cada onda parcial. Analizando el comportamiento a baja energía de estos desfases se definen los parámetros que se muestran en las Figuras. Además, para calcular numéricamente estos parámetros utilizamos una ecuación diferencial que aísla la información de los desfases.

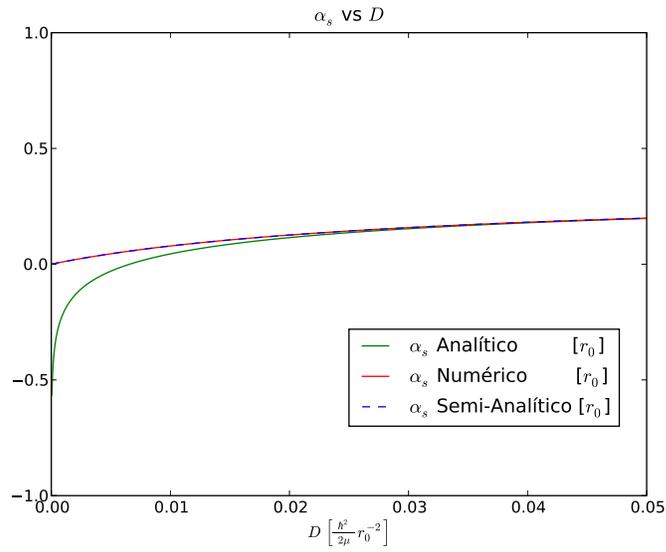


Figura 4.10: Detalle de resultados analítico y numérico de α_s para potencial Morse cerca del origen. Se observa una divergencia logarítmica en la solución analítica.

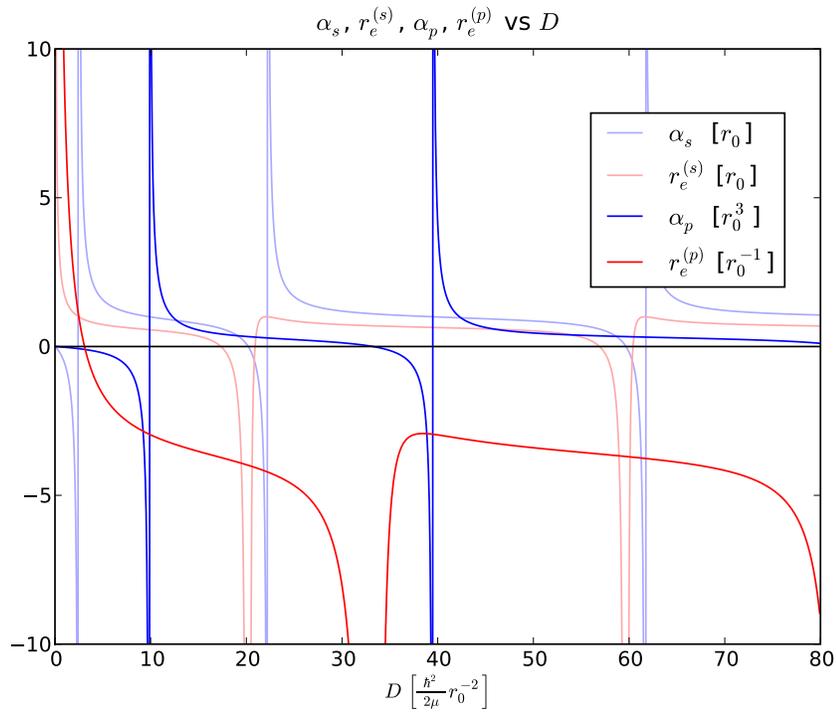


Figura 4.11: Resultado de α_p y $r_e^{(p)}$ para el potencial de pozo cuadrado.

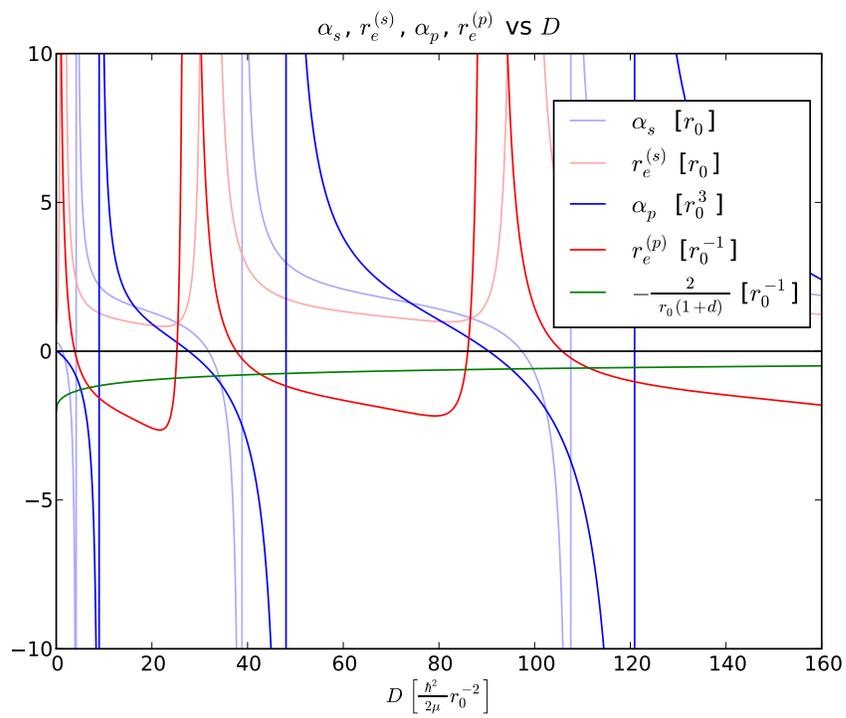
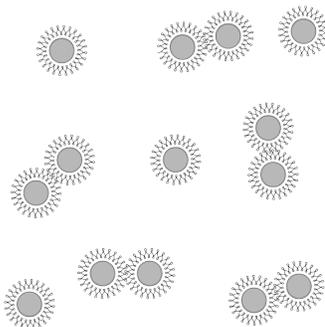


Figura 4.12: Resultado de α_p y $r_e^{(p)}$ para el potencial de Morse.

CAPÍTULO 5



CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Entender las colisiones ultrafrías es la pieza básica para describir gases en los que sus componentes, ya sean átomos, moléculas o partículas nucleares tienen una longitud de onda de Broglie mucho mayor que su espaciamento. En el caso atómico y molecular estos sistemas son realizables en el laboratorio. Afortunadamente, en este régimen el tratamiento se simplifica enormemente pues la amplitud de dispersión, función que contiene toda la información de la dispersión, puede ser completamente determinada por muy pocos parámetros. Cuando el Principio de Exclusión de Pauli no impide que dos átomos ocupen el mismo punto en el espacio, éstos son dispersados por medio de una colisión de onda- s . En este caso una sola cantidad llamada longitud de dispersión determina la amplitud de dispersión. Por el contrario, si el Principio de Exclusión impide la dispersión de onda- s , entonces el proceso que se lleva a cabo es una dispersión de onda- p . Para este tipo de colisión es necesario caracterizar la amplitud de dispersión por dos parámetros, el volumen de dispersión y el rango efectivo de onda- p .

Usando el Potencial de Morse como un modelo factible de la interacción entre dos átomos neutros estudiamos los estados ligados y no ligados de onda- s . La función de onda radial de los estados ligados tiene la forma

$$u_0(b_n, s) = C e^{-ds} (2ds)^{b_n/2} L_n^{(b_n)}(2ds), \quad (5.1)$$

mientras que los estados no ligados tienen como función de onda radial

$$u_0(b, s) = 2e^{-ds} C_k \Re \left\{ A(b) (2ds)^{ib/2} M \left(\frac{1}{2} + \frac{ib}{2} - d, 1 + ib, 2ds \right) \right\}. \quad (5.2)$$

Una vez teniendo las soluciones no ligadas fue posible estudiar su comportamiento asintótico a partir del cual obtuvimos la longitud de dispersión y el rango efectivo de onda- s asociado a este potencial. La longitud de dispersión tiene la forma

$$\alpha = r_0 + \frac{1}{\beta} \left[2\gamma + \ln(2d) + \psi \left(\frac{1}{2} - d \right) \right], \quad (5.3)$$

y el rango efectivo

$$r_e = \frac{2}{3}\alpha - \frac{\psi^{(2)} \left(\frac{1}{2} - d \right) + 16\zeta(3)}{3\beta^3\alpha^2}. \quad (5.4)$$

El haber obtenido expresiones analíticas para los parámetros de dispersión nos permitió entender con mayor claridad las virtudes y fallas de tratar con el potencial de Morse de distintas maneras. La manera usual de tratarlo, acudiendo a un problema matemático auxiliar, permite obtener expresiones analíticas sencillas para las funciones radiales y los niveles de energía. La desventaja en este método radica en que cuando $d \rightarrow 0$, el problema físico y el matemático auxiliar difieren cada vez más. Por otro lado, no es posible resolver analíticamente el problema matemático que resulta directamente del problema físico. Estudiar el caso $d \rightarrow 0$ nos permitió entender mejor la aplicabilidad del potencial de Morse. Además, es un ejemplo concreto de cómo una condición en el origen puede tener efecto sobre los desfases definidos por el comportamiento asintótico, hecho en el que se basa el tratamiento con pseudopotenciales.

Para llevar a cabo este trabajo desarrollamos programas para calcular numéricamente soluciones ligadas y no ligadas de onda- s y onda- p . Por otra parte, implementamos programas que utilizan el método de Calogero con los que calculamos numéricamente la longitud de dispersión, el volumen de dispersión y el rango efectivo de onda- s y onda- p para el potencial de pozo cuadrado y el potencial de Morse. Fue importante utilizar un esquema de integración de paso adaptable para lograr implementar el método de Calogero.

Utilizamos el caso particular de ${}^6\text{Li}$ para ejemplificar la aplicación de los conceptos y métodos desarrollados. Sin embargo, estos mismos métodos pueden aplicarse de manera completamente análoga para otros átomos de interés. El énfasis en este trabajo radica más bien en el método y no tanto en el resultado final.

La descripción teórica de gases atómicos ultrafríos se basa en una primera aproximación en la ecuación de Gross-Pitaevskii (véase Apéndice A) para sistemas bosónicos. Esta ecuación puede ampliarse para tomar en cuenta potenciales de atrapamiento estructurados siendo el caso de redes ópticas el ejemplo más utilizado en la actualidad. Los sistemas fermiónicos exhiben una riqueza fenomenológica muy particular. Así, por ejemplo, un sistema ultra frío inicial conformado por un gas quasi ideal atómico fermiónico (BCS) se puede transformar en un gas quasi ideal molecular bosónico (BEC) mediante el control de la interacción entre las partículas que componen al gas. Este mecanismo ha permitido muy recientemente la formación de condensados de Bose-Einstein moleculares.

Los resultados obtenidos en esta tesis son un eslabón importante en el tratamiento teórico de esta clase de gases atómicos con interacciones realistas entre sus componentes. Hasta el momento todas las simulaciones numéricas reportadas en la literatura para analizar el cruce BCS-BEC consideran potenciales modelo muy simplificados que son netamente atractivos. Esto ha impedido:

- verificar a detalle las interacciones efectivas entre moléculas del lado BEC.
- verificar a detalle la hipótesis de universalidad según la cual sistemas fermiónicos muy diversos tienen un comportamiento muy similar cerca de resonancia para interacciones de onda s .

Hemos ya iniciado cálculos de colisiones atómicas dentro de trampas armónicas para entender la dependencia de la energía del sistema respecto a los parámetros de dispersión y, así, analizar la hipótesis de universalidad.

APÉNDICE A

ECUACIÓN DE GROSS-PITAEVSKII

En este apéndice se desarrolla una derivación de la ecuación de Gross-Pitaevskii utilizando el método variacional. El Hamiltoniano para un sistema de N partículas idénticas de masa m sometidas a un potencial externo $V(\vec{r})$ que interactúan por medio de un potencial de dos cuerpos $W(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ es

$$\hat{\mathbb{H}} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i + \sum_{i < j}^N W(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (\text{A.1})$$

donde

$$\hat{h}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \quad (\text{A.2})$$

son los Hamiltonianos que corresponden a la energía cinética y potencial de cada partícula. Usando el método de Hartree-Fock podemos encontrar la función de onda del estado base del sistema. De esta manera, suponemos que la función de onda del estado base de todo el sistema Ψ se construye a partir del producto de funciones de onda de una partícula. Es decir

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \hat{\mathcal{S}} \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i), \quad (\text{A.3})$$

donde $\hat{\mathcal{S}}$ es un operador de simetrización de la función de onda. Las funciones de onda de una partícula se normalizan de la manera usual,

$$\int |\psi_i(\vec{r})|^2 d^3r = 1. \quad (\text{A.4})$$

Como Ψ es la función del estado base de muchas partículas para un sistema de bosones, podemos asumir que todas las partículas ocupan en mismo estado de una partícula $\psi_i(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ con $i = 1, \dots, N$, de tal manera que el requerimiento de simetrización de la función de onda se satisface automáticamente y por lo tanto $\hat{\mathcal{S}}$ es la identidad. A continuación, haciendo uso del método variacional encontraremos una ecuación para ψ . Encontrando cuándo el valor esperado del Hamiltoniano no cambia respecto a una variación pequeña de ψ , obtenemos una ecuación

para ψ cuya solución resulta en un valor extremo del valor esperado de $\hat{\mathbb{H}}$. Si ψ cambia a $\psi + \delta\psi$, Ψ obtiene una nueva forma Ψ' dada por

$$\Psi' = \prod_{i=1}^N (\psi(\vec{r}_i) + \delta\psi(\vec{r}_i)) = \prod_{i=1}^N \psi(\vec{r}_i) + \sum_{j=1}^N \delta\psi(\vec{r}_j) \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi(\vec{r}_i) + O(\delta\psi^2). \quad (\text{A.5})$$

Debido a que $\delta\psi$ es una variación pequeña, únicamente nos interesan los términos mostrados en la expresión anterior. Además, imponemos la restricción $\psi \perp \delta\psi$, es decir,

$$\int \psi^* \delta\psi d^3r = 0, \quad (\text{A.6})$$

pues las variaciones paralelas a ψ no tienen efecto en la energía. Escribiendo $\psi(\vec{r}_i) = |\psi_i\rangle$ tenemos que el cambio en el valor esperado del Hamiltoniano debido a la variación $\psi \rightarrow \psi + \delta\psi$ tiene la forma

$$\langle \Psi' | \hat{\mathbb{H}} | \Psi' \rangle - \langle \Psi | \hat{\mathbb{H}} | \Psi \rangle = \sum_{j=1}^N \left\langle \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \left| \hat{\mathbb{H}} \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.7})$$

$$+ \sum_{j=1}^N \left\langle \prod_{i=1}^N \psi_i \left| \hat{\mathbb{H}} \right| \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.8})$$

$$+ \sum_{j=1}^N \left\langle \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \left| \hat{\mathbb{H}} \right| \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.9})$$

Notemos que los bra-kets no depende de j pues para calcular el valor esperado se integra respecto a \vec{r}_j . Por tanto, la ecuación nos define el punto crítico es

$$N \left\{ \left\langle \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \left| \hat{\mathbb{H}} \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle + \left\langle \prod_{i=1}^N \psi_i \left| \hat{\mathbb{H}} \right| \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \right\rangle + \left\langle \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \left| \hat{\mathbb{H}} \right| \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \right\rangle \right\} = 0 \quad (\text{A.10})$$

Donde el primer término en (A.10) se puede desarrollar como

$$\left\langle \delta\psi_j \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \psi_i \left| \hat{\mathbb{H}} \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle = \left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \sum_{i=1}^N \hat{h}_i \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.11})$$

$$+ \left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \sum_{i < j}^N W(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.12})$$

Analicemos el primer término (A.11) :

$$\left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \sum_{i=1}^N \hat{h}_i \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle = \left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \hat{h}_i \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.13})$$

$$+ \left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \hat{h}_m \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.14})$$

$$= \left\langle \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \hat{h}_i \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \xrightarrow{\langle \delta\psi_m | \psi_m \rangle = 0} 0 \quad (\text{A.15})$$

$$+ \left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \hat{h}_m \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.16})$$

$$= \left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \hat{h}_m \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.17})$$

$$= \langle \delta\psi_m \left| \hat{h}_m \right| \psi_m \rangle \left\langle \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \prod_{i=1}^N \psi_i \right. \right\rangle \xrightarrow{1} \quad (\text{A.18})$$

$$= \langle \delta\psi_m \left| \hat{h}_m \right| \psi_m \rangle \quad (\text{A.19})$$

La expresión obtenida es una integral respecto a \vec{r}_m y como las variables de integración son mudas nos podemos quitar el sub-índice m . Luego, desarrollamos la suma en el término (A.12) y de manera análoga al término que se acaba de analizar, los términos donde ninguno de los índices coincide con m desaparecen, con lo que obtenemos ($W(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ se abrevia como W_{ij})

$$\left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \sum_{i < j}^N W_{ij} \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle = \left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq m}}^N W_{mj} \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.20})$$

$$= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq m}}^N \left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| W_{mj} \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle \quad (\text{A.21})$$

$$= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq m}}^N \langle \delta\psi_m \psi_j \left| W_{mj} \right| \psi_j \psi_m \rangle \quad (\text{A.22})$$

Además

$$\langle \psi_j \left| W_{mj} \right| \psi_j \rangle = \int |\psi(\vec{r}_j)|^2 W(\vec{r}_m - \vec{r}_j) d^3 r_j. \quad (\text{A.23})$$

Como la variable de integración es muda, la expresión anterior no puede depender de j por lo

que definimos

$$W_{\text{mf}}(\vec{r}) = (N - 1) \int |\psi(\vec{r}')|^2 W(\vec{r}_m - \vec{r}') d^3 r', \quad (\text{A.24})$$

de tal manera que

$$\left\langle \delta\psi_m \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \psi_i \left| \sum_{i < j}^N W_{ij} \right| \prod_{i=1}^N \psi_i \right\rangle = \langle \delta\psi_m | W_{\text{mf}} | \psi_m \rangle, \quad (\text{A.25})$$

donde nuevamente nos podemos librar del sub-índice m . El segundo término en (A.10) se simplifica exactamente de la misma manera. Para el tercer término se procede de una manera similar, con la diferencia de que para los dos primeros términos, el factor $\langle \delta\psi | \psi \rangle = 0$ por ortogonalidad y en este caso $\langle \delta\psi | \delta\psi \rangle \ll 1$ pues la variación es pequeña. Así, la igualdad (A.10) se reduce a

$$\langle \delta\psi | \hat{h} + W_{\text{mf}} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{h} + W_{\text{mf}} | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | \hat{h} + W_{\text{mf}} | \delta\psi \rangle = 0, \quad (\text{A.26})$$

que podemos reescribir como

$$\langle \psi + \delta\psi | \hat{h} + W_{\text{mf}} | \psi + \delta\psi \rangle - \langle \psi | \hat{h} + W_{\text{mf}} | \psi \rangle = 0. \quad (\text{A.27})$$

La expresión anterior tiene la forma del cambio en el valor esperado de $\hat{h} + W_{\text{mf}}$ respecto a un cambio en ψ . Por lo tanto, encontrar un valor extremo de $\langle \Psi | \hat{\mathbb{H}} | \Psi \rangle$ respecto a ψ es equivalente a encontrar un valor extremo para $\langle \psi | \hat{h} + W_{\text{mf}} | \psi \rangle$ respecto a ψ y por esto, podemos ver a $\hat{h} + W_{\text{mf}}$ como un Hamiltoniano efectivo para la función de onda de una partícula.

Modelando la interacción entre las partículas por un potencial de contacto $W(\vec{r}) = g\delta(\vec{r})$, con $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}\alpha$, caracterizado por la longitud de dispersión vemos que

$$W_{\text{mf}}(\vec{r}) = g \int |\psi(\vec{r}')|^2 \delta(\vec{r}_m - \vec{r}') d^3 r' = (N - 1)g |\psi(\vec{r})|^2, \quad (\text{A.28})$$

con lo que finalmente obtenemos la ecuación de *Gross-Pitaevskii*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + (N - 1)g |\psi(\vec{r})|^2 \right) \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{A.29})$$

ÍNDICE

- amplitud
 - de dispersión, 10
 - de onda parcial, 16
- bosones, 11
- condensado
 - de Bose-Einstein, 22
- desfasamientos, 15
- dispersión
 - longitud de, 19
 - volumen de, 25
- ecuación de
 - Gross-Pitaevskii, 23, 60
- fase
 - ecuación de, 44
 - función de, 43
- fermiones, 11
- método variacional, 22, 57
- parámetro de impacto, 7
- Postulado de Simetrización, 11
- potencial
 - de Morse, 27
 - desfasamientos, 34
 - solución ligada, 30
 - solución no-ligada, 32
- rango efectivo
 - onda-s, 23
- resonancia de energía cero, 18
- sección eficaz, 5
 - diferencial, 6

BIBLIOGRAFÍA

- [AS64] MILTON ABRAMOWITZ Y IRENE A. STEGUN. “Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables”. Dover, New York, 9a edición (1964).
- [AW05] GEORGE B. ARFKEN Y HANS J. WEBER. “Mathematical Methods for Physicists”. Elsevier Academic Press, 6a edición (2005).
- [Bet49] H. A. BETHE. Theory of the effective range in nuclear scattering. *Phys. Rev.* **76**(1), 38–50 (Jul 1949).
- [Boh89] DAVID BOHM. “Quantum Theory”. Dover (1989).
- [BP35] H. BETHE Y R. PEIERLS. Quantum Theory of the Diplon. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences* **148**(863), 146–156 (1935).
- [Bre47] G. BREIT. The scattering of slow neutrons by bound protons. i. methods of calculation. *Phys. Rev.* **71**(4), 215–231 (Feb 1947).
- [Cal67] F. CALOGERO. “Variable Phase Approach to Potential Scattering”. Academic Press (1967).
- [Cas07] YVAN CASTIN. Basic theory tools for degenerate fermi gases (2007).
- [CFH⁺98] PH. COURTEILLE, R. S. FREELAND, D. J. HEINZEN, F. A. VAN ABEELLEN Y B. J. VERHAAR. Observation of a feshbach resonance in cold atom scattering. *Phys. Rev. Lett.* **81**(1), 69–72 (Jul 1998).
- [CTDL77] CLAUDE COHEN-TANNOUDJI, BERNARD DIU Y FRANCK LALOË. “Quantum mechanics”. Wiley, 2a edición (1977).
- [DJ99] B. DEMARCO Y D. S. JIN. Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas. *Science* **285**(5434), 1703–1706 (1999).
- [DMA⁺95] K. B. DAVIS, M. O. MEWES, M. R. ANDREWS, N. J. VAN DRUTEN, D. S. DURFEE, D. M. KURN Y W. KETTERLE. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.* **75**(22), 3969–3973 (Nov 1995).

- [EPR35] A. EINSTEIN, B. PODOLSKY Y N. ROSEN. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.* **47**(10), 777–780 (May 1935).
- [Fer36] E. FERMI. *Ricerca Sci.* **7** (1936).
- [FLS63] RICHARD P. FEYNMAN, ROBERT B. LEIGHTON Y MATTHEW SANDS. “The Feynman Lectures on Physics”, tomo 1. Addison-Wesley (1963).
- [Fri98] HARALD FRIEDRICH. “Theoretical Atomic Physics”. Springer, 2a edición (1998).
- [Gou03] BRIAN GOUGH. “GNU Scientific Library Reference Manual - 2nd Edition”. Network Theory Ltd. (2003).
- [Gri95] DAVID J. GRIFFITHS. “Introduction to Quantum Mechanics”. Prentice Hall, Inc., 1a edición (1995).
- [GRJ03] MARKUS GREINER, CINDY A. REGAL Y DEBORAH S. JIN. Emergence of a molecular bose-einstein condensate from a fermi gas. *Nature* **426**(6966), 537–540 (Dec 2003).
- [HR06] SERGE HAROCHE Y JEAN-MICHEL RAIMOND. “Exploring the Quantum”. Oxford University Press, 1a edición (2006).
- [HY57] KERSON HUANG Y C. N. YANG. Quantum-mechanical many-body problem with hard-sphere interaction. *Phys. Rev.* **105**(3), 767–775 (Feb 1957).
- [IC06] ZBIGNIEW IDZIASZEK Y TOMMASO CALARCO. Pseudopotential method for higher partial wave scattering. *Physical Review Letters* **96**(1), 013201 (2006).
- [JLPC08] M. JONA-LASINIO, L. PRICOUPENKO Y Y. CASTIN. Three fully polarized fermions close to a p-wave feshbach resonance. *Phys. Rev. A* **77**(4) (Apr 2008).
- [Joa87] CHARLES J. JOACHAIN. “Quantum Collision Theory”. North-Holland, 3a edición (1987).
- [JS06] P. JASIK Y J.E. SIENKIEWICZ. Calculation of adiabatic potentials of li2. *Chemical Physics* **323**(2-3), 563 – 573 (2006).
- [Leg80] A. LEGGETT. “Modern Trends in the Theory of Condensed Matter”, tomo 115, capítulo Diatomic molecules and cooper pairs, páginas 13–27. Springer-Verlag, Berlin (1980).
- [Mat88] AKIRA MATSUMOTO. Generalized matrix elements in discrete and continuum states for the morse potential. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 2863–2870 (1988).
- [Mor29] PHILIP M. MORSE. Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels. *Phys. Rev.* **34**(1), 57–64 (Jul 1929).
- [OJ] H OUERDANE Y M J JAMIESON. A note on the calculation of the effective range. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **37**(18), 3765.
- [Pan06] TAO PANG. “An Introduction to Computational Physics”. Cambridge University Press, 2a edición (2006).
- [Pri06] LUDOVIC PRICOUPENKO. Pseudopotential in resonant regimes. *Phys. Rev. A* **73**(1), 012701 (Jan 2006).

- [Rae02] ALASTAIR I. M. RAE. “Quantum Mechanics”. Institute of Physics Publishing, 4a edición (2002).
- [RCB+98] J. L. ROBERTS, N. R. CLAUSSEN, JAMES P. BURKE, CHRIS H. GREENE, E. A. CORNELL Y C. E. WIEMAN. Resonant magnetic field control of elastic scattering in cold ^{85}rb . *Phys. Rev. Lett.* **81**(23), 5109–5112 (Dec 1998).
- [RTBJ03] C. A. REGAL, C. TICKNOR, J. L. BOHN Y D. S. JIN. Tuning p -wave interactions in an ultracold fermi gas of atoms. *Phys. Rev. Lett.* **90**(5), 053201 (Feb 2003).
- [Sag78] MARTIN L. SAGE. Morse oscillator transition probabilities for molecular bond modes. *Chemical Physics* **35**, 375–380 (1978).
- [SZS+05] C. H. SCHUNCK, M. W. ZWIERLEIN, C. A. STAN, S. M. F. RAUPACH, W. KETTERLE, A. SIMONI, E. TIESINGA, C. J. WILLIAMS Y P. S. JULIENNE. Feshbach resonances in fermionic ^6Li . *Phys. Rev. A* **71**(4), 045601 (Apr 2005).
- [Tan08] SHINA TAN. Energetics of a strongly correlated fermi gas. *Annals of Physics* **323**(12), 2952 – 2970 (2008).
- [TFMK01] EDDY TIMMERMANS, KYOKO FURUYA, PETER W. MILONNI Y ARTHUR K. KERMAN. Prospect of creating a composite fermi-bose superfluid. *Physics Letters A* **285**(3-4), 228 – 233 (2001).