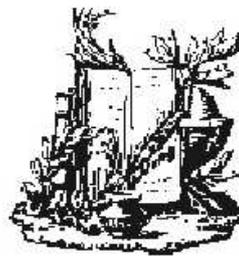




Teoría de colisiones

OBRA MUY NECESARIA A TODOS LOS INGENIOS
PERPICACES Y CURIOSOS, CON LA QUE TODO
ESTUDIOSO DE FÍSICA, INGENIERÍA U O-
TRAS DISCIPLINAS NATURALES O MA-
TEMÁTICAS CONSEGUIRÁ SUAVÍ-
SIMA, SUTIL Y ADMIRABLE DOC-
TRINA, Y SE DELEITARA CON
VARIAS CUESTIONES DE
SECRETÍSIMA CIENCIA

✣
VEINTISIETE LÁ-
MINAS EN
HUECO
GRAB-
ADO



Nihil Obstat:
W. L. Kitchend,
Lectur. Theol. Sacrae.

✣ *Imprimatur:*
Michael Augustine,
Archbishop of New York.

DECLARASE OFICIAL-
MENTE QUE EL PRESENTE
PANFLETO ESTA
LIBRE DE ERRORES
MORALES O DE DOC-
TRINA.

TEORÍA DE COLISIONES

Raúl Oscar Barrachina¹

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

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

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

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

Contenido

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

6	Teoría semiclásica de colisiones	33
6.1	Aproximación semiclásica	33
6.2	Interferencia cuántica en el efecto Arco Iris	35
7	Dispersión coulombiana	39
7.1	Condición asintótica	39
7.2	Operador de Møller coulombiano	39
7.3	Estados asintóticos coulombianos	41
7.4	Reconstrucción de la teoría de colisiones	42
7.5	Fórmula de Rutherford	43
8	Dispersión de partículas idénticas	45
8.1	Descripción de un proceso de dispersión elástica en el sistema de laboratorio	45
8.2	Dispersión de partículas idénticas	47
8.3	Colisión electrón - átomo	50
9	Colisión multicanal	53
9.1	Introducción	53
9.2	Operador de Møller	54
9.3	Vectores base del subespacio de canal	54
9.4	Estados estacionarios de dispersión multicanal	55
9.5	Sección eficaz diferencial	56
10	Colisiones inelásticas	57
10.1	Dispersión inelástica de partículas cargadas rápidas por átomos	57
10.2	Aproximación de onda distorsionada	58
10.3	Dispersión inelástica a energías intermedias	60
11	Captura electrónica	63
11.1	Introducción	63
11.2	Aproximación de Oppenheimer, Brinkman y Kramers	63
11.3	Captura a un estado excitado en la aproximación OBK	64
11.4	Mecanismo de Thomas	65
12	Emisión de electrones en colisiones de alta energía	69
12.1	Introducción	69
12.2	Ionización del blanco	72
12.3	Captura al continuo	74
A	Unidades Atómicas	77
B	Teorema óptico	79

Lista de figuras

1.1	Esquema de un experimento de colisiones	1
1.2	Dispersión de una partícula por un centro de fuerzas	2
1.3	Densidad de partículas en un potencial coulombiano	4
1.4	Potencial interatómico típico	5
1.5	Función de deflexión para un potencial interactómico típico	6
1.6	Parámetro de impacto como función del ángulo de dispersión	7
1.7	Sección eficaz diferencial mostrando el efecto Arco Iris	8
3.1	Primera aproximación de Born	14
3.2	Colisión elástica e + He	17
4.1	Desfasajes para un pozo cuadrado central	23
4.2	Secciones eficaces parciales para un pozo cuadrado central	24
4.3	Sección eficaz total para la colisión de electrones contra gases nobles	25
5.1	Estados ligados, virtuales y resonantes	28
5.2	Cuatro posibles resonancias	30
5.3	Desfasaje y sección eficaz parcial para $\ell = 3$	31
6.1	Función de deflexión clásica	35
6.2	Desfasaje obtenido con la condición de fase estacionaria	36
6.3	Sección eficaz diferencial para la colisión Na + Xe	37
8.1	Dos procesos indistinguibles en la dispersión de partículas idénticas	47
9.1	Sistemas de coordenadas para la descripción de una colisión multicanal	55
10.1	Colisión inelástica de electrones con Helio	59
10.2	Colisión inelástica de electrones con Helio, comparación con datos experimentales	62
10.3	Distribución angular de electrones dispersados por Argón	62

11.1 Colisión de captura $H^+ + H$, datos experimentales	67
11.2 1ra. y 2da. aproximación de Born para la colisión de captura $H^+ + H$	68
12.1 Sección eficaz para la ionización de Hidrógeno	70
12.2 Esquema de la ionización directa del blanco	71
12.3 Esquema de la ionización de blanco y proyectil	71
12.4 Ionización en la colisión $O^{5+} \rightarrow O_2$ a 30 MeV	73
12.5 Medición de la sección eficaz de ionización para la colisión $H^+ + He$ a 100 keV	75

Capítulo 1

Teoría clásica de colisiones

1.1 Sección eficaz diferencial

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

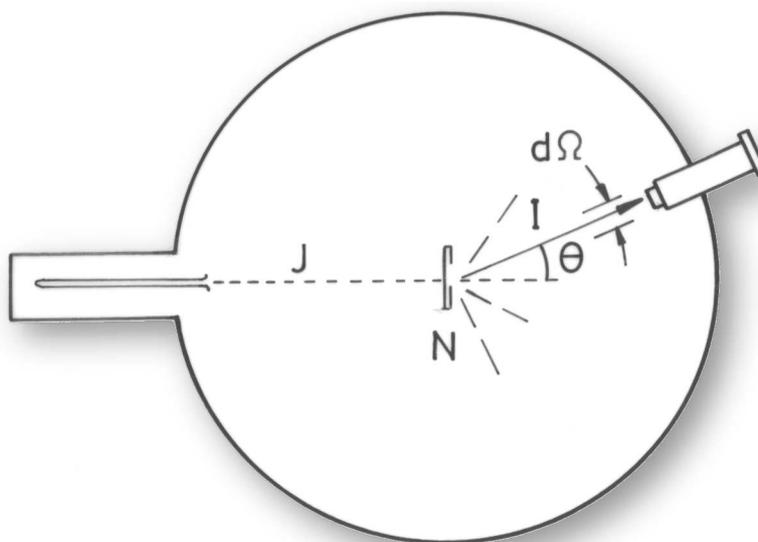


Figura 1.1: Esquema de un experimento de colisiones.

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

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

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

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

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

1.2 Definición clásica de la sección eficaz

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

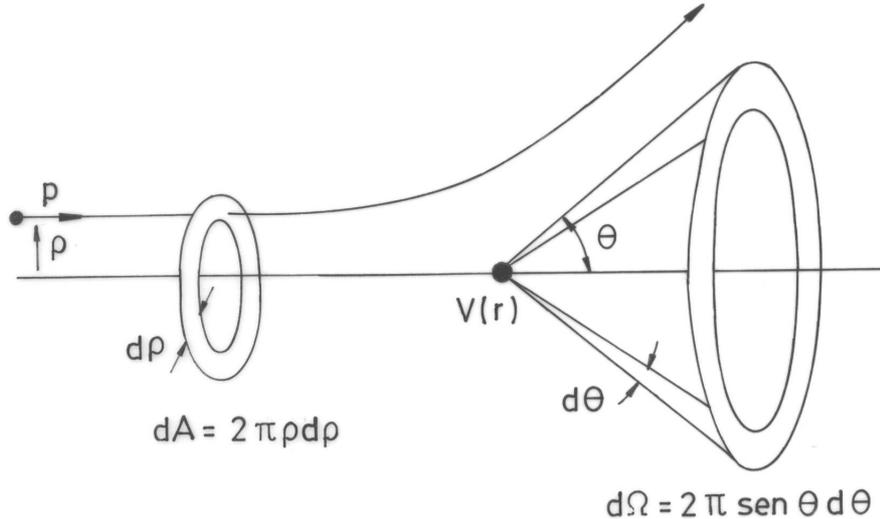


Figura 1.2: Dispersión de una partícula por un centro de fuerzas.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Eliminando dt de ambas ecuaciones resulta la ecuación de las órbitas

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

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

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

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

1.3 Descripción independiente del tiempo

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

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

donde

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

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

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

De esta manera, la sección eficaz diferencial está dada por

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

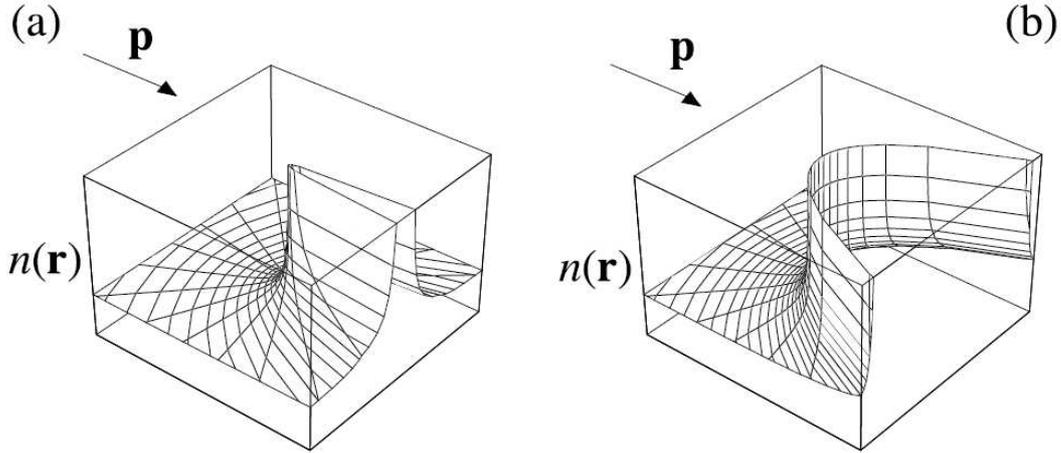


Figura 1.3: Densidad de partículas en la dispersión por un potencial $V(r) = Z/r$ atractivo (a) o repulsivo (b).

1.4 Dispersión de Rutherford

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

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

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

1.5 Efectos Gloria y Arco Iris

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

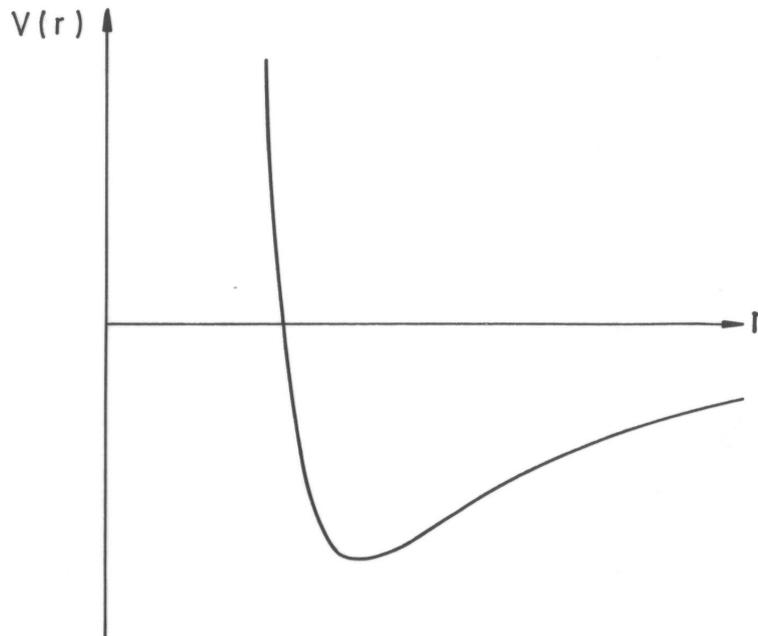


Figura 1.4: Potencial interatómico típico.

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

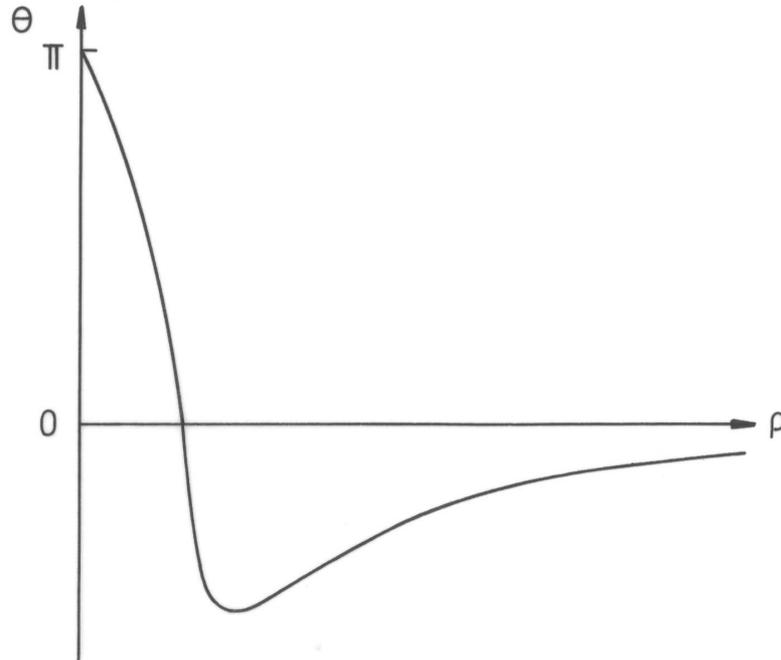


Figura 1.5: Función de deflexión $\theta(\rho)$ para un potencial interatómico típico.

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

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

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

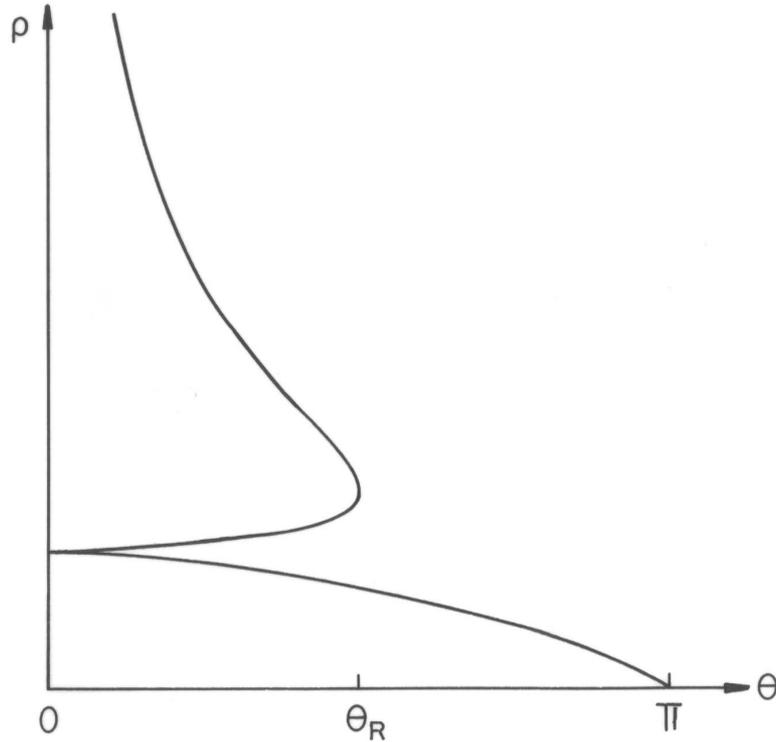


Figura 1.6: Parámetro de impacto ρ como función del ángulo de dispersión θ .

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

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

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

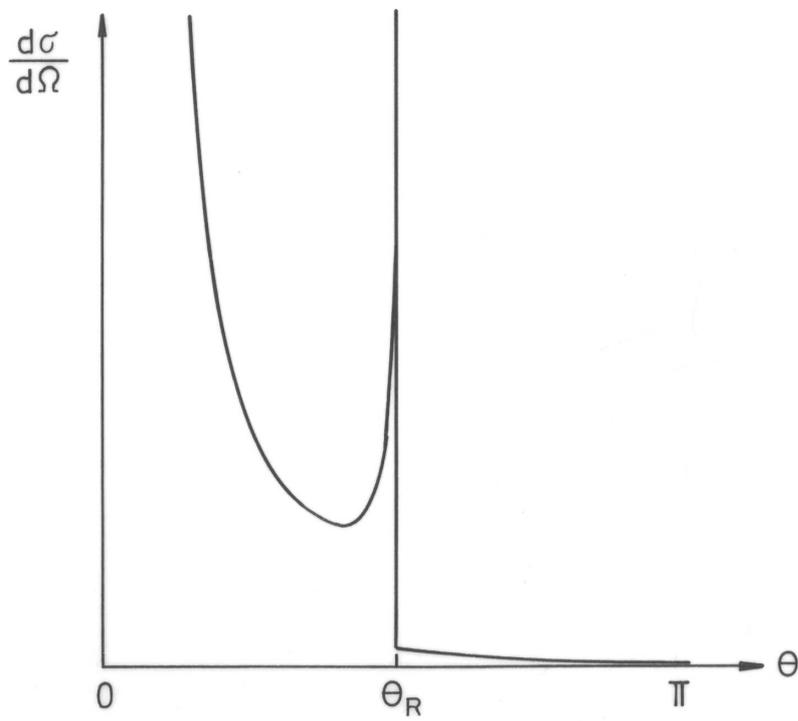


Figura 1.7: Sección eficaz diferencial correspondiente a la función de deflexión representada en la figura 1.5, θ_R es el ángulo de Arco Iris.

Capítulo 2

Teoría cuántica de colisiones

2.1 Operador de Green

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

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

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

2.2 Operador de Green libre

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

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

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

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

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

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

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

2.3 Ecuación de Lippmann-Schwinger

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

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

que resulta de

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

2.4 Estados estacionarios de dispersión

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

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

Estos estados son autovectores del Hamiltoniano total

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

y satisfacen la ecuación de Lippmann-Schwinger

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

2.5 Límite asintótico de los estados estacionarios de dispersión

De la ecuación de Lippmann-Schwinger resulta:

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

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

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

de tal forma que

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

2.6 Sección eficaz cuántica

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

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

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

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

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

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

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

2.7 Dispersión coulombiana

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Capítulo 3

Aproximación de Born

3.1 La serie de Born

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

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

Si iteramos en la ecuación de Lippmann–Schwinger ,

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

obtenemos la serie de Born

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

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

3.2 Primera aproximación de Born

El primer término de la serie es

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

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

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

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

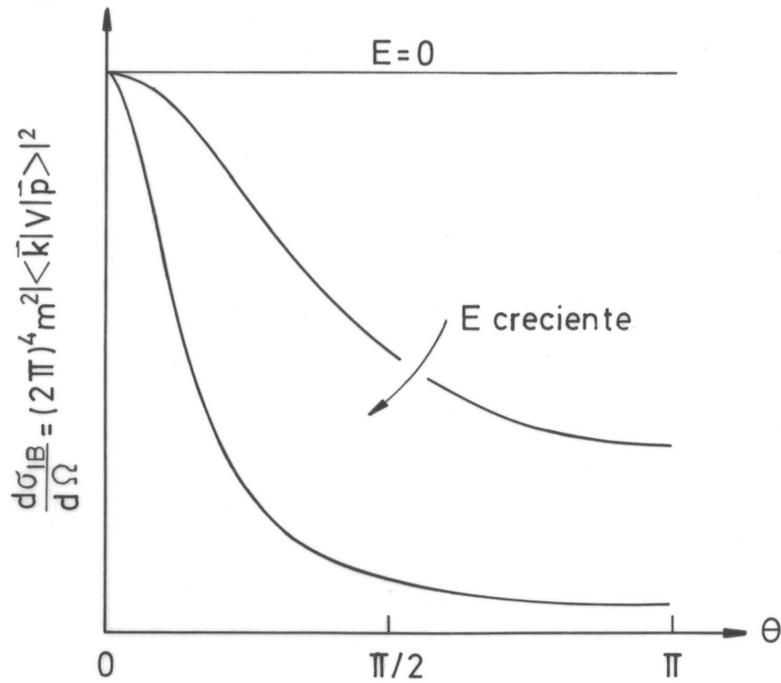


Figura 3.1: Comportamiento típico de la sección eficaz diferencial en la primera aproximación de Born.

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

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

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

3.3 Potencial de Yukawa

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

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

La sección eficaz

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

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

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

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

Vemos que, siendo

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

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

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

que se satisface con un proyectil suficientemente rápido.

3.4 Dispersión elástica de partículas cargadas rápidas por átomos

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

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

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

Reemplazando en la primera aproximación de Born, obtenemos

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

donde

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

es el llamado factor de forma atómico

Para átomos simples podemos describir la densidad de carga por

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

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

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

y la sección eficaz

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

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

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

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

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

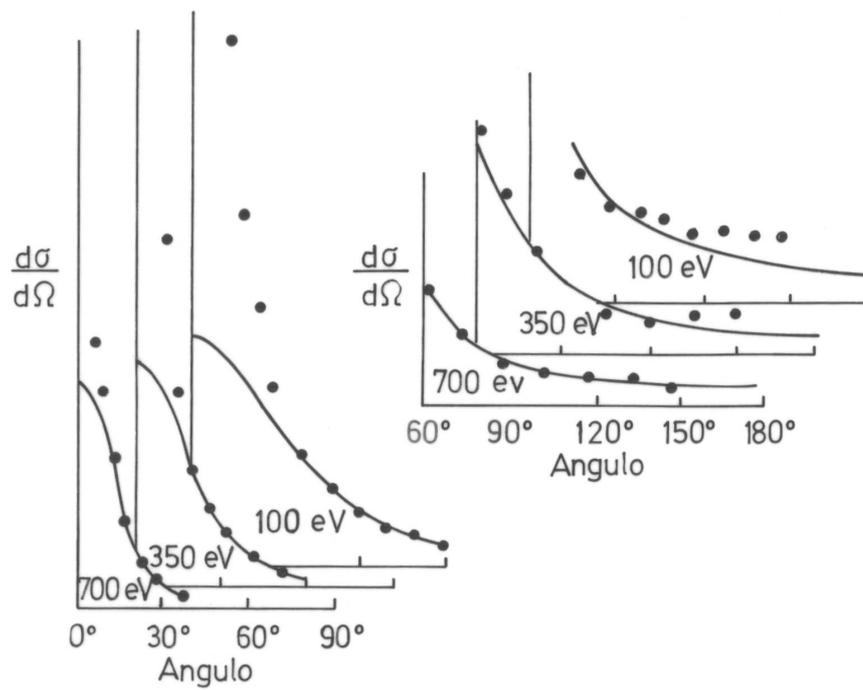


Figura 3.2: Sección eficaz diferencial para la colisión elástica de electrones con Helio¹, (●) datos experimentales, (—) Primera aproximación de Born.

Capítulo 4

Colisiones de baja energía

4.1 Desarrollo en ondas parciales

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

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

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

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

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

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

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

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

con

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

donde

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

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

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

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

A partir del teorema óptico,

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

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

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

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

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

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

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

por sus correspondientes desarrollos en ondas parciales, obtenemos

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

por lo cual

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

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

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

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

4.2 Corrección de la primera aproximación de Born

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

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

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

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

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

4.3 Propiedades de la amplitud de onda parcial

Para p pequeño podemos reemplazar en

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

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

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

o, equivalentemente,

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

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

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

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

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

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

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

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

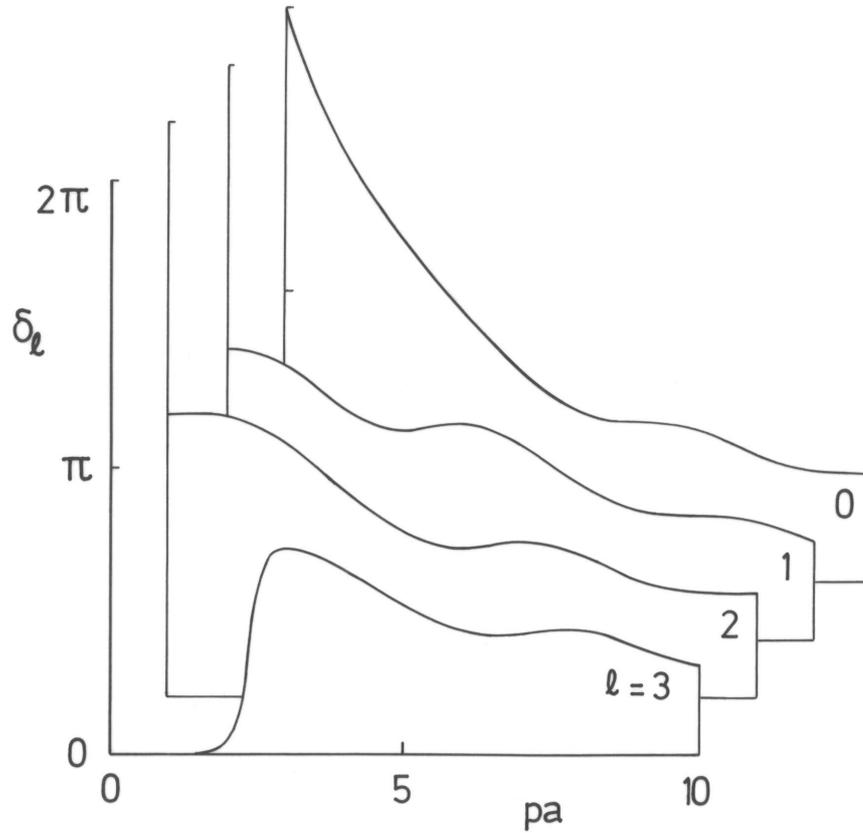


Figura 4.1: Desfasajes $\delta_\ell(p)$ para un pozo cuadrado central de radio a y profundidad $V_o = 12/ma^2$.

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

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

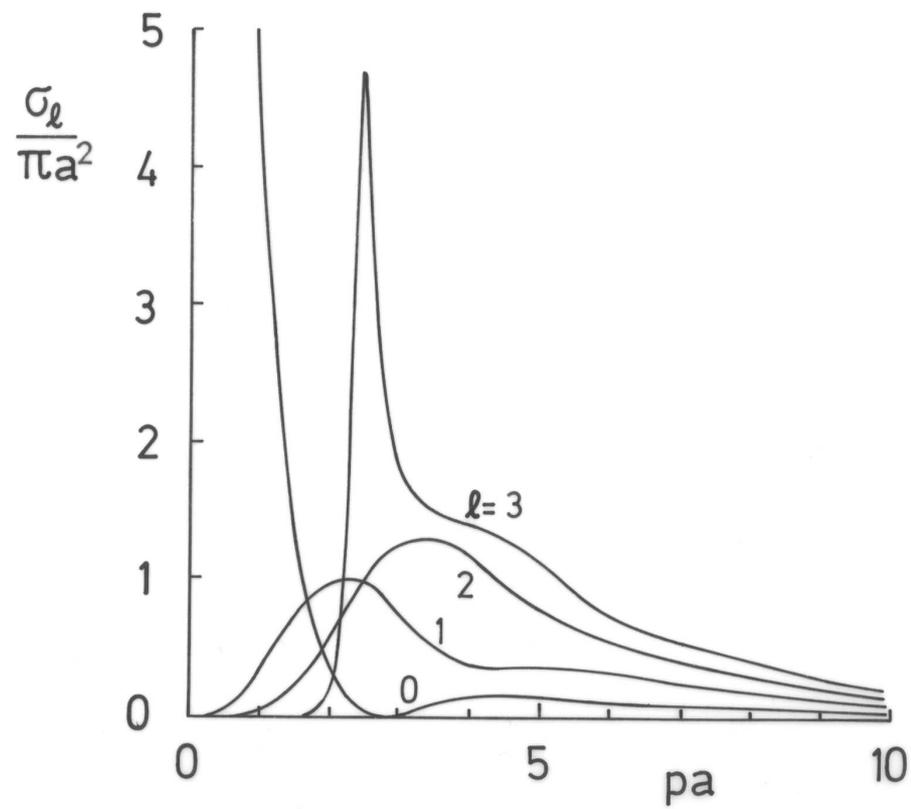


Figura 4.2: Secciones eficaces parciales $\sigma_\ell(p)$ para un pozo cuadrado central de radio a y profundidad $V_o = 12/ma^2$.

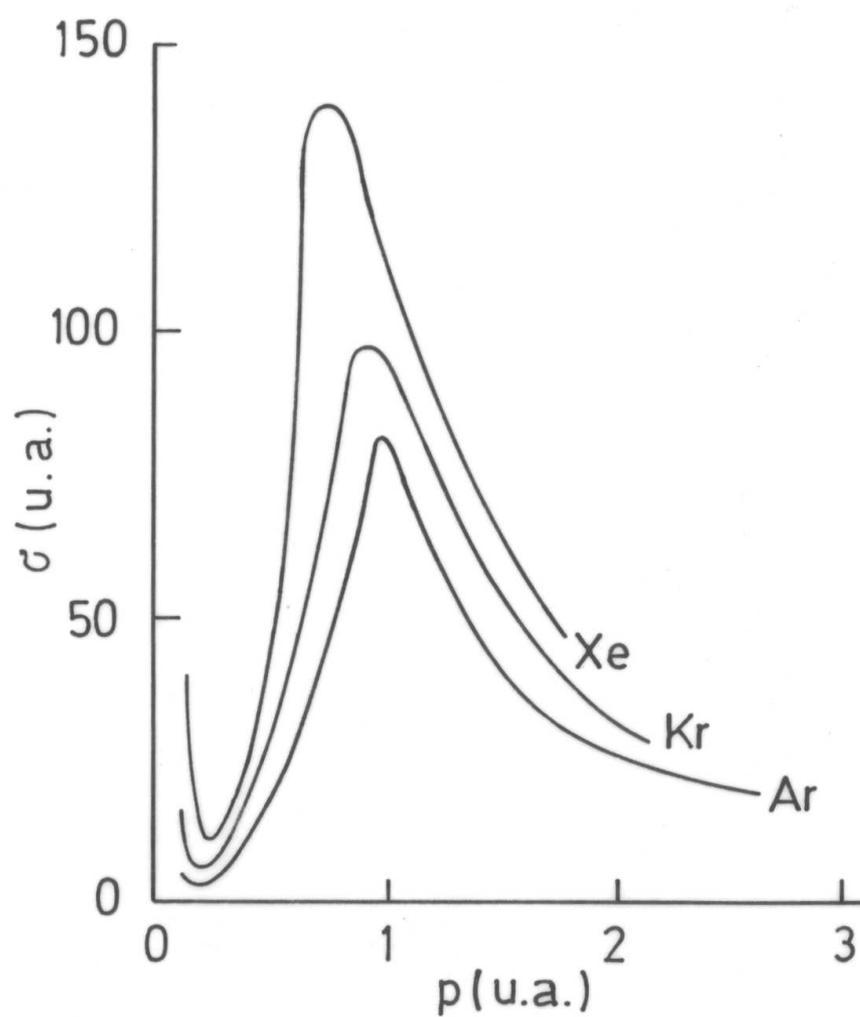


Figura 4.3: Sección eficaz total para la colisión de electrones contra gases nobles.²

Capítulo 5

Resonancias

5.1 La función de Jost

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

en módulo π

5.2 Ceros de la función de Jost y estados ligados

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

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

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

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

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

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

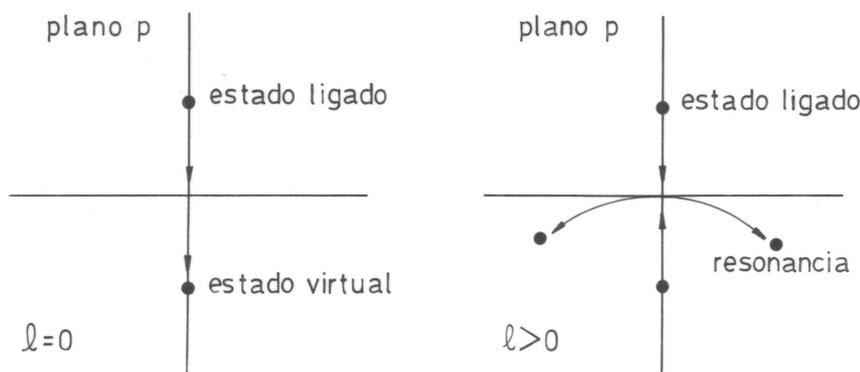


Figura 5.1: Transformación de un estado ligado en un estado virtual (cuando $\ell = 0$) o en una resonancia (cuando $\ell > 0$).

5.3 Resonancias

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

el eje real (zona física) donde la aproximación

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

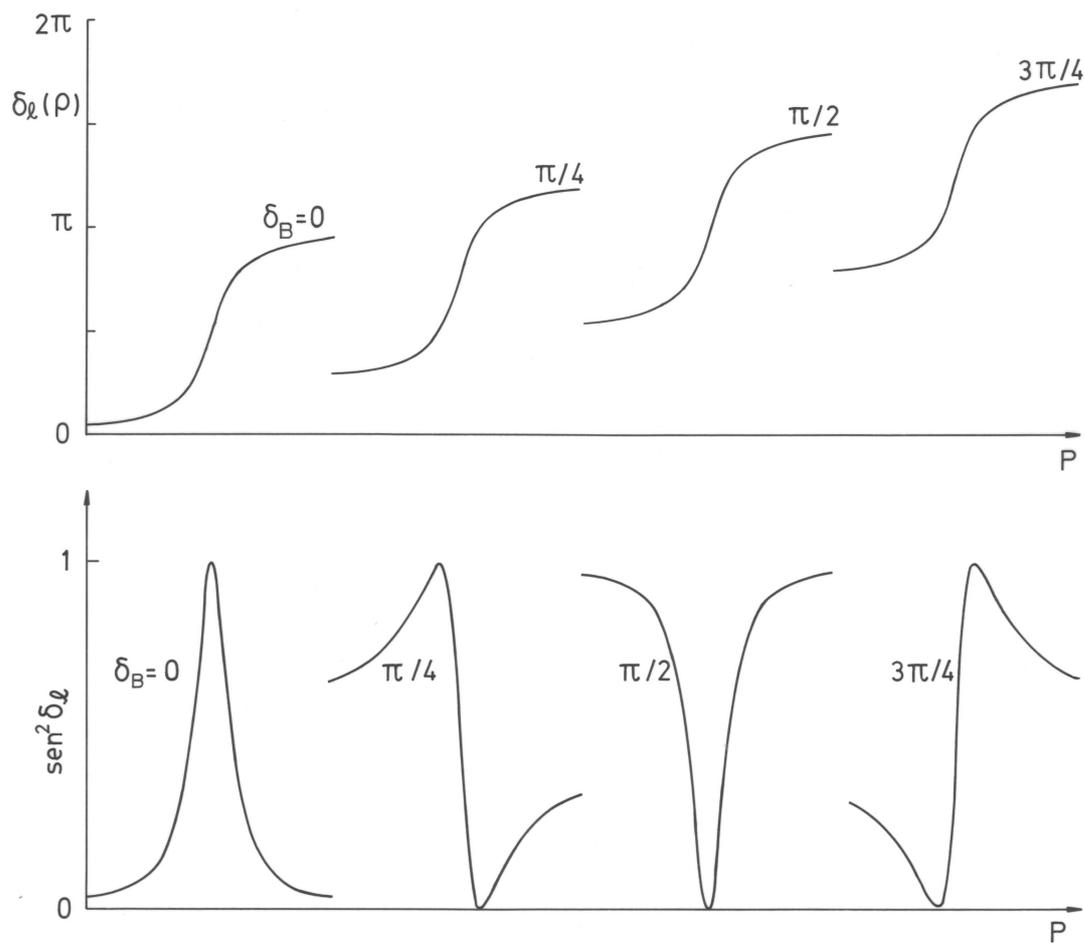


Figura 5.2: Desfasaje $\delta_\ell(p)$ y función $\text{sen}^2 \delta_\ell(p)$ (representativa del comportamiento de la sección eficaz parcial $\sigma_\ell(p) = 4\pi(2\ell + 1) \text{sen}^2 \delta_\ell / p^2$) en resonancia para distintos valores de δ_B .

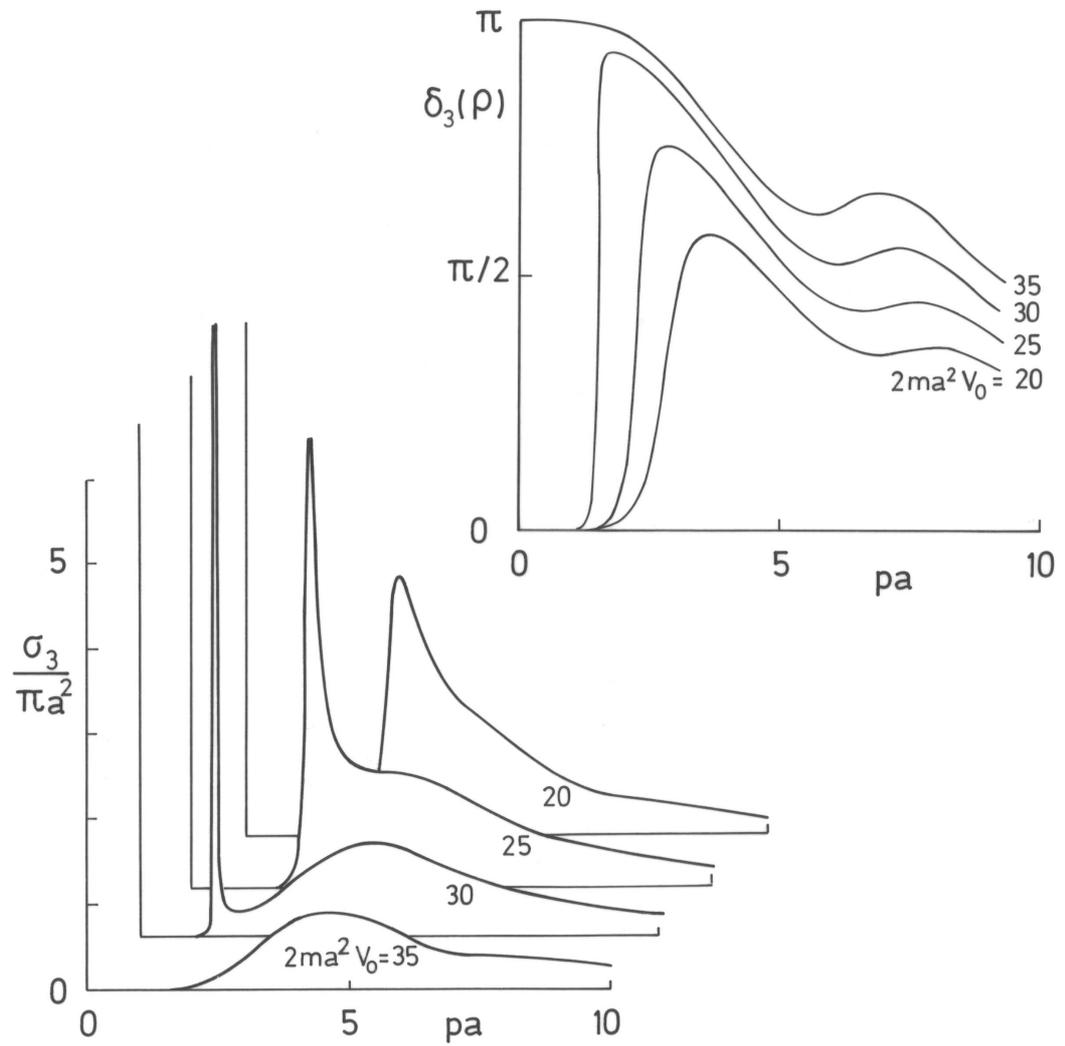


Figura 5.3: Desfasaje δ_ℓ y sección eficaz parcial σ_ℓ con $\ell = 3$ para cuatro pozos cuadrados de distintas profundidades.

5.4 Resonancia de energía cero

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

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

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

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

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

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

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

Capítulo 6

Teoría semiclásica de colisiones

6.1 Aproximación semiclásica

Volvamos al desarrollo en ondas parciales

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

De hecho si para cada punto estacionario ℓ_i aproximamos

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

obtenemos

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

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

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

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

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

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

y con ello la expresión clásica

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

donde r_o es un cero de

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

6.2 Interferencia cuántica en el efecto Arco Iris

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

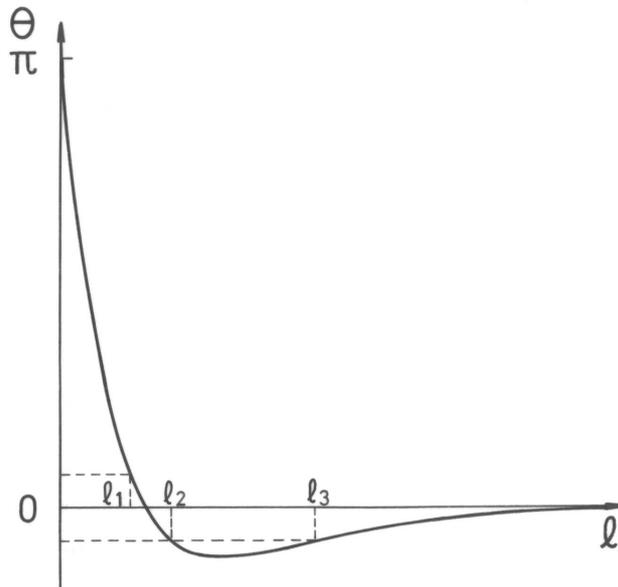


Figura 6.1: Función de deflexión clásica $\theta(\ell)$ para un potencial interatómico típico.

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

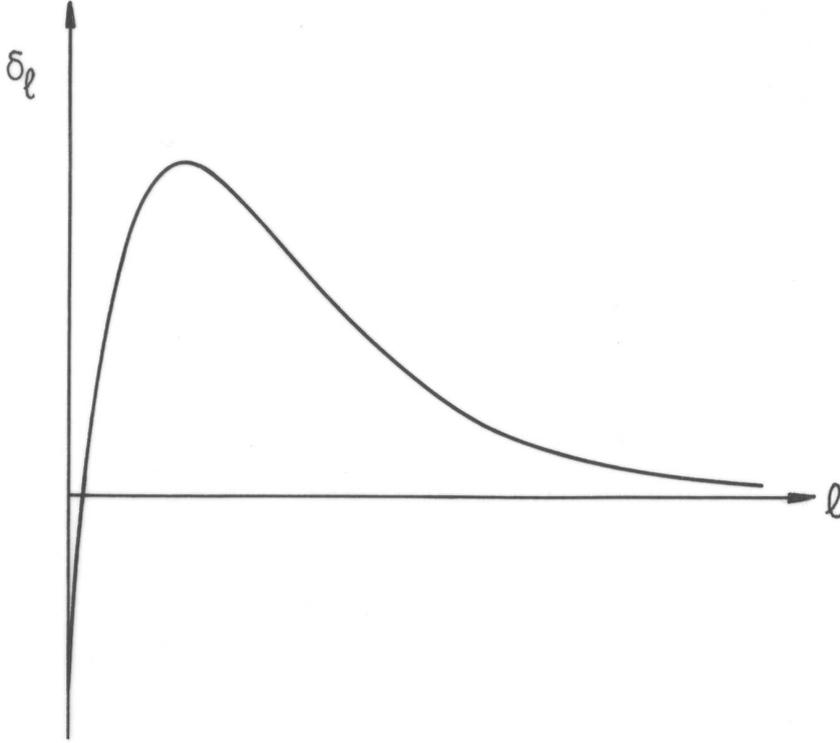


Figura 6.2: Desfase δ_ℓ obtenido a partir de la función de deflexión clásica de la figura 6.1 utilizando la condición de fase estacionaria, ecuación 6.5.

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

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

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

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

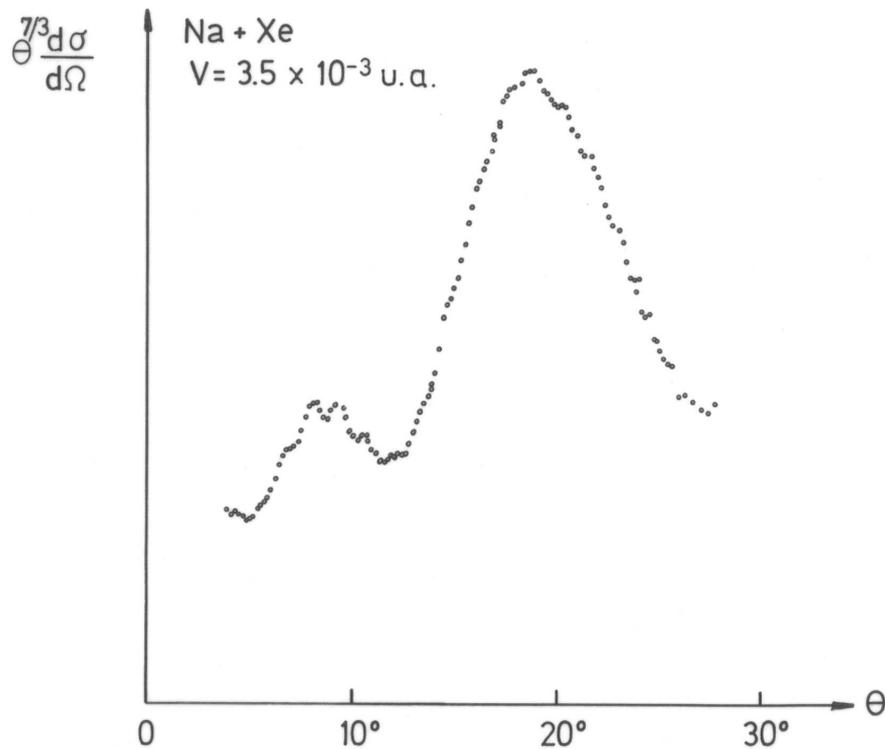


Figura 6.3: Sección eficaz diferencial para la colisión Na + Xe. ¹

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

Capítulo 7

Dispersión coulombiana

7.1 Condición asintótica

En la base de la teoría de colisiones desarrollada hasta aquí está la suposición de que mucho antes y mucho después de la colisión el movimiento del proyectil es indistinguible del de un paquete de onda libre o, equivalentemente, que los operadores de Møller están bien definidos. Puede demostrarse¹ que esta *condición asintótica* es válida siempre que el potencial sea localmente integrable y verifique $rV(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$. Vemos que el potencial coulombiano $V(r) = Z/r$ no está incluido en esta categoría y que, por lo tanto, no se le puede aplicar la teoría de colisiones. Para entender la naturaleza de la dificultad conviene analizar el comportamiento asintótico de una trayectoria coulombiana clásica.

En el límite $r \rightarrow \infty$ la órbita hiperbólica tiende asintóticamente a una trayectoria rectilínea y su velocidad a un límite bien definido $v = \sqrt{2E/m}$. Sin embargo, separando los diferenciales espacial y temporal en la ecuación de conservación de energía $E = \frac{1}{2}m \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \frac{\ell^2}{2mr^2} + \frac{Z}{r}$ obtenemos en el límite asintótico $v dt \simeq \left(1 + \frac{Z}{mv^2} \frac{1}{r}\right) dr$, que conduce al siguiente comportamiento

$$r \simeq v|t| - \frac{Z}{mv^2} \ln |t| + \mathcal{O}(1) \quad (7.1)$$

Vemos que se mantiene una diferencia logarítmica entre la órbita y su aproximación de movimiento libre. En otras palabras la órbita nunca converge a una trayectoria asintóticamente libre.

7.2 Operador de Møller coulombiano

Teniendo en cuenta el resultado clásico anterior, es de esperar que las órbitas coulombianas cuánticas tampoco converjan a estados asintóticamente libres, sino

¹M. N. Haek, Nuovo Cimento **9**, 731 (1958).

que mantengan una diferencia logarítmica ya que, aproximadamente,

$$\begin{aligned} U(t) &\simeq_{t \rightarrow \mp\infty} \exp -i \int_0^t \left(H_o + \frac{Z}{v|t'|} \right) dt' = \\ &= e^{-iH_o t} \exp \pm \frac{iZ}{v} \ln |t| \end{aligned} \quad (7.2)$$

Esta motivación heurística sugiere el siguiente teorema:

Teorema de Dollard: En presencia de un potencial coulombiano $V(r) = Z/r$, el límite fuerte

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iHt} e^{-iH_o t} D^{-1}(t) \quad (7.3)$$

existe en \mathcal{L}^2 , con el *operador de anomalía* definido por

$$D(t)\psi(\mathbf{r}) = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle (4E_p |t|)^{int/|t|} \langle \mathbf{p} | \psi \rangle d\mathbf{p} \quad (7.4)$$

$$\text{con } n = \frac{Z}{p/m}$$

Nuevamente Ω_{\pm} es un operador isométrico que verifica la relación de entrelazado y permite definir en la forma usual los estados estacionarios de dispersión $|\mathbf{p}\pm\rangle = \Omega_{\pm}|\mathbf{p}\rangle$. Lo que hace del potencial coulombiano una rareza dentro de la teoría de colisiones, no es sólo su comportamiento asintótico, sino que los estados $|\mathbf{p}\pm\rangle$ se conocen exactamente ².

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}\pm \rangle = \frac{\Gamma(1 \pm in_p)}{e^{\pi n_p/2}} {}_1F_1(\mp in_p, 1, \pm i(pr \mp \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad (7.5)$$

Comparando la forma asintótica de estos estados

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}\pm \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left((pr \mp \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})^{\pm in} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} - n \frac{\Gamma(1 \pm in)}{\Gamma(1 \mp in)} \frac{e^{ipr}}{(pr \mp \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})^{1 \pm in}} \right) \quad (7.6)$$

con la de los estados estacionarios de dispersión de la teoría usual, ecuación ??, advertimos claramente la presencia de las distorsiones logarítmicas a las que hacíamos referencia.

²B. R. Johnson et al., Phys. Rev. A **32**, 1998 (1985).

7.3 Estados asintóticos coulombianos

Para reconstruir la teoría de colisiones vamos a necesitar una ecuación de Lippmann–Schwinger. Esta puede obtenerse fácilmente trabajando en la representación de impulso

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \pm \rangle &= \int \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \pm \rangle d\mathbf{r} = \\
 &= -\frac{1}{Z} \frac{d}{d\gamma} \int \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \frac{Z}{r} e^{-\gamma r} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \pm \rangle d\mathbf{r} = \\
 &= -\frac{1}{Z} \frac{d}{d\gamma} \langle \mathbf{k} | V_\gamma | \mathbf{p} \pm \rangle
 \end{aligned} \tag{7.7}$$

donde está implícito el límite $\gamma \rightarrow 0^+$. Adviertase la interpretación del parámetro γ como una longitud de corte tipo Yukawa del potencial coulombiano. El elemento de matriz $\langle \mathbf{k} | V_\gamma | \mathbf{p} \pm \rangle$ puede calcularse por el método de Nordsieck³.

$$\langle \mathbf{k} | V_\gamma | \mathbf{p} \pm \rangle = \frac{Z}{2\pi^2} \frac{\Gamma(1 \pm in)}{e^{\pi n/2}} \frac{[k^2 - (p \pm i\gamma)^2]^{\pm in}}{[|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2 + \gamma^2]^{1 \pm in}} \tag{7.8}$$

con $n = \frac{Z}{p/m}$. Haciendo efectiva la derivada respecto de γ obtenemos

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \pm \rangle &= \frac{\gamma}{\pi^2} \frac{\Gamma(2 \pm in)}{e^{\pi n/2}} \frac{[k^2 - (p \pm i\gamma)^2]^{\pm in}}{[|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2 + \gamma^2]^{2 \pm in}} + \\
 &+ \frac{1}{\left[\frac{(p \pm i\gamma)^2}{2m} - \frac{k^2}{2m}\right]} \frac{Z}{2\pi^2} \frac{\Gamma(1 \pm in)}{e^{\pi n/2}} \frac{[k^2 - (p \pm i\gamma)^2]^{\pm in}}{[|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2 + \gamma^2]^{1 \pm in}}
 \end{aligned} \tag{7.9}$$

Vemos que el segundo término es $\langle \mathbf{k} | G_o \left[\frac{(p \pm i\gamma)}{2m} \right] V_\gamma | \mathbf{p} \pm \rangle$. O sea

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \pm \rangle = \langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \pm \gamma \rangle + \langle \mathbf{k} | G_o \left[\frac{(p \pm i\gamma)^2}{2m} \right] V_\gamma | \mathbf{p} \pm \rangle \tag{7.10}$$

Hemos obtenido la misma ecuación de Lippmann–Schwinger de la teoría de corto alcance, excepto por el hecho de que, en lugar de la onda libre, se encuentra un *estado asintótico coulombiano* $|\mathbf{p} \pm \gamma\rangle$ definido en representación de impulso por

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \pm \gamma \rangle = \frac{\gamma}{\pi^2} \frac{\Gamma(2 \pm in)}{e^{\pi n/2}} \frac{[k^2 - (p \pm i\gamma)^2]^{\pm in}}{[|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2 + \gamma^2]^{2 \pm in}} \tag{7.11}$$

Es fácil ver que el estado asintótico coulombiano está definido en el sentido de las distribuciones ya que incluye una representación de la delta de Dirac

³A. Nordsieck, Phys. Rev. **93**, 785 (1954).

$$\delta_\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{p}) = \frac{\gamma}{\pi^2} \frac{1}{[|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2 + \gamma^2]^2} \quad (7.12)$$

Evidentemente $\langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \pm \gamma \rangle$ solo puede estar definido por su acción sobre funciones de prueba que logren eliminar de alguna manera el corte ramal generado por el factor $\left[\frac{k^2 - (p \pm i\gamma)^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2 + \gamma^2} \right]^{\pm in}$. Esto nos conduce al siguiente

Teorema de van Haeringen⁴: Sea la función de prueba $\langle h | \mathbf{k} \rangle = (k - p \mp i\gamma)^{\pm in} g(\mathbf{k})$ con $g(\mathbf{k}) \in \mathcal{L}^2$ en un entorno de $\mathbf{k} = \mathbf{p}$ y continuo en $\mathbf{k} = \mathbf{p}$. Entonces

$$\langle h | \mathbf{p} \pm \gamma \rangle = \frac{e^{\pi n/2}}{\Gamma(1 \mp in)} (2p)^{\pm in} g(\mathbf{p}) \quad (7.13)$$

Basándonos en este resultado podemos anotar formalmente

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{p} \pm \gamma \rangle = D^{-1}[k, p \pm i\gamma] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \quad (7.14)$$

con

$$D[k, p \pm i\gamma] = \frac{\Gamma(1 \mp in)}{e^{\pi n/2}} \left(\frac{k - p \mp i\gamma}{k + p \pm i\gamma} \right)^{\pm in} \quad (7.15)$$

el denominado factor de Gamow .

Es fácil ver que, salvo por una función gamma, el factor de Gamow $D[k, p \pm i\gamma]$ coincide con el factor de distorsión $D(t)$ evaluado en $t = \mp m/p\gamma$. O sea que mantener $\gamma \neq 0$ es equivalente a postergar el límite de tiempo infinito. Y esto es, precisamente, lo que nos ha permitido incorporar la fase logarítmica en la teoría.

7.4 Reconstrucción de la teoría de colisiones

La condición asintótica usual es un requerimiento muy restrictivo cuando se lo compara con la situación experimental real. En la práctica nunca se mide el vector de estado $U(t)|\psi\rangle$ para verificar si está evolucionando libremente para $t \rightarrow \mp\infty$. A lo sumo se mide un pequeño conjunto de observables como ser el impulso, la energía cinética o el espín. Es cierto que si vale la condición asintótica usual entonces esos observables tienden a una constante para $t \rightarrow \mp\infty$, pero la inversa es falsa. Esto sugiere la posibilidad de construir una teoría de colisiones basada en una forma más débil de la condición asintótica, con el único requisito de que los observables medidos sean asintóticamente estables. Esta teoría general debería

⁴H. van Haeringen, J. Math. Phys. **17**, 995 (1976).

poder absorber a la teoría usual e incorporar potenciales de largo alcance como el coulombiano.

Pero esto es precisamente lo que hemos estado haciendo al redefinir el operador de Møller. Ahora, y aunque en la expresión

$$|\psi_{out}\rangle = \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\psi_{in}\rangle \quad (7.16)$$

ninguno de ambos estados asintóticos representa una órbita libre, podemos definir en forma independiente del tiempo una probabilidad $|\langle \mathbf{k} | \psi_{out} \rangle|^2$ de que la asíntota saliente tenga un impulso \mathbf{k} . Continuando con la deducción realizada en el caso de potenciales de corto alcance, llegamos a la siguiente redefinición de la sección eficaz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 |\langle \mathbf{k} - \gamma | V_\gamma | \mathbf{p} + \gamma \rangle|^2 \quad (7.17)$$

donde los únicos cambios consisten en agregar un apantallamiento tipo Yukawa al potencial y reemplazar las ondas planas $|\mathbf{k}\rangle$ y $|\mathbf{p}\rangle$ por estados asintóticos coulombianos $|\mathbf{k} - \gamma\rangle$ y $|\mathbf{p} + \gamma\rangle$. Dedujimos esta expresión para un potencial puramente coulombiano $V(r) = Z/r$, pero es también válida para un potencial arbitrario que tenga un comportamiento asintótico de tipo coulombiano $rV(r) \rightarrow_{r \rightarrow \infty} Z$.

7.5 Fórmula de Rutherford

Queremos calcular el elemento de matriz de transición para el potencial coulombiano

$$\langle \mathbf{k} - \gamma | V_\gamma | \mathbf{p} + \gamma \rangle = \int \langle \mathbf{k} - \gamma | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | V_\gamma | \mathbf{p} + \gamma \rangle d\mathbf{q} \quad (7.18)$$

donde $\langle \mathbf{q} | V_\gamma | \mathbf{p} + \gamma \rangle$, dado en la ecuación 7.8, es una función de prueba con las características requeridas por el teorema de van Haeringen. Reemplazando en la integral, obtenemos

$$\langle \mathbf{k} - \gamma | V_\gamma | \mathbf{p} + \gamma \rangle = \frac{Z}{2\pi^2} \frac{\Gamma(1 + in)}{\Gamma(1 - in)} (2p)^{2in} \int \frac{\delta(\mathbf{q} - \mathbf{k})}{[|\mathbf{q} - \mathbf{p}|^2 + \gamma^2]^{1+in}} d\mathbf{q} \quad (7.19)$$

o sea

$$\langle \mathbf{k} - \gamma | V_\gamma | \mathbf{p} + \gamma \rangle = \frac{Z}{2\pi^2} \frac{\Gamma(1 + in)}{\Gamma(1 - in)} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2} \left(\frac{4p^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^2} \right)^{in} \quad (7.20)$$

Y en la sección eficaz recuperamos la fórmula clásica de Rutherford

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2mZ)^2 \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{p}|^4} \quad (7.21)$$

Capítulo 8

Dispersión de partículas idénticas

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

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

$$\theta_P = \arctan \frac{m_B \sin \theta}{m_P + m_B \cos \theta} . \quad (8.1)$$

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

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_P} = \frac{d\Omega}{d\Omega_P} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin(\theta) d\theta d\phi}{\sin(\theta_P) d\theta_P d\phi_P} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin(\theta) d\theta}{\sin(\theta_P) d\theta_P} \frac{d\sigma}{d\Omega} , \quad (8.2)$$

resultando

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_P} &= \Theta(m_B/m_P - \text{sen}\theta_P) \\ &\times \left[\frac{1 + (m_P/m_B)^2 \cos(2\theta_P)}{\sqrt{1 - (m_P/m_B)^2 \text{sen}^2(\theta_P)}} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta^+) + \Theta(m_P - m_B) \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta^-) \right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \frac{m_P}{m_B} \cos(\theta_P) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta^+) - \Theta(m_P - m_B) \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta^-) \right) \right], \end{aligned} \quad (8.3)$$

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

$$\theta^\pm = \arccos \left\{ -\frac{m_P}{m_B} \text{sen}^2(\theta_P) \pm \cos(\theta_P) \sqrt{1 - \frac{m_P^2}{m_B^2} \text{sen}^2(\theta_P)} \right\} \quad (8.4)$$

son las dos posibles soluciones de la ecuación (8.1).

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

$$\theta_B = \frac{1}{2}(\pi - \theta), \quad (8.5)$$

con una sección eficaz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_B} = \left| \frac{d \cos(\theta)}{d \cos(\theta_B)} \right| \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = 4 \cos\theta_B \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = \pi - 2\theta_B) \Theta(\pi/2 - \theta_B). \quad (8.6)$$

En particular, si ambas partículas tienen igual masa resulta

$$\theta_P = \frac{1}{2} \theta \quad \text{y} \quad \theta_B = \frac{1}{2} (\pi - \theta). \quad (8.7)$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_P} = 4 \cos\theta_P \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = 2\theta_P) \Theta(\pi/2 - \theta_P). \quad (8.8)$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_P} = 4 \cos(\theta_P) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = 2\theta_P) + \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta = \pi - 2\theta_P) \right) \Theta(\pi/2 - \theta_P). \quad (8.9)$$

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

8.2 Dispersión de partículas idénticas

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

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\mathbf{p}m_1m_2\rangle + (-1)^{2s} |-\mathbf{p}m_2m_1\rangle \right), \quad (8.10)$$

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

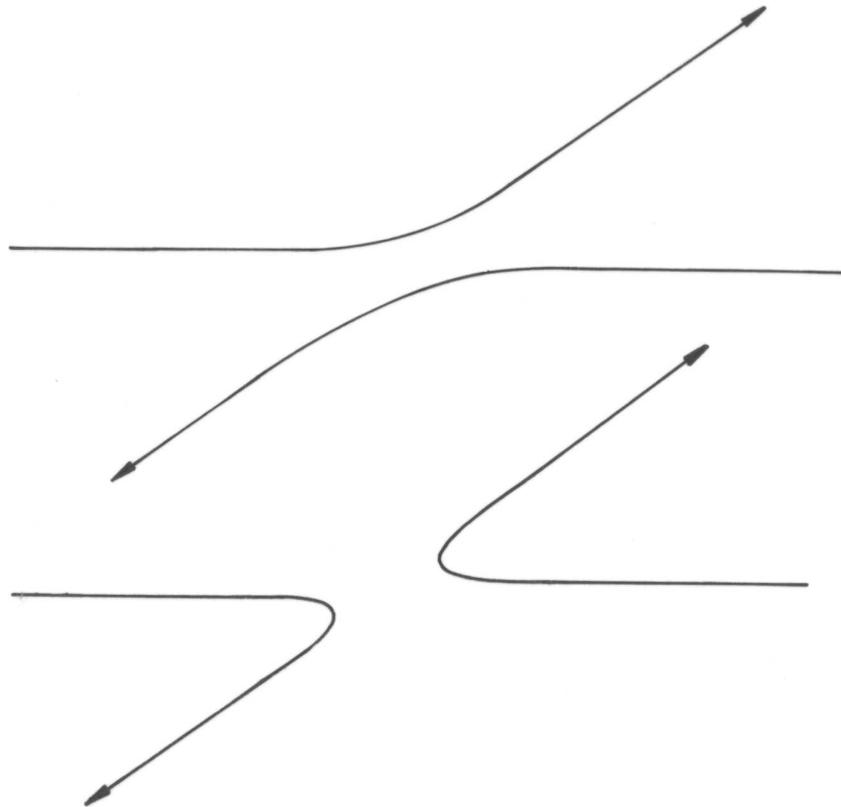


Figura 8.1: Dos procesos indistinguibles en la dispersión de partículas idénticas.

O sea que el estado asintótico adecuado es

$$|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\mathbf{k}m'_1m'_2\rangle + (-1)^{2s} |-\mathbf{k}m'_2m'_1\rangle \right). \quad (8.11)$$

Ahora la sección eficaz resulta

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= (2\pi)^4 m^2 |\langle f|T|i\rangle|^2 = \\ &= (2\pi)^4 m^2 \left| \langle \mathbf{k}m'_1m'_2|T|\mathbf{p}m_1m_2\rangle + (-1)^{2s} \langle -\mathbf{k}m'_2m'_1|T|\mathbf{p}m_1m_2\rangle \right|^2, \end{aligned} \quad (8.12)$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 \left| \langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \delta_{m_1m'_1} \delta_{m_2m'_2} + (-1)^{2s} \langle -\mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \delta_{m_1m'_2} \delta_{m_2m'_1} \right|^2. \quad (8.13)$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^4 m^2}{(2s+1)^2} \sum_{m_1m_2m'_1m'_2} \left| \langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \delta_{m_1m'_1} \delta_{m_2m'_2} + (-1)^{2s} \langle -\mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \delta_{m_1m'_2} \delta_{m_2m'_1} \right|^2, \quad (8.14)$$

o sea

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= (2\pi)^4 m^2 \left[|\langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle|^2 + |\langle -\mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle|^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2(-1)^{2s}}{2s+1} \text{Real} (\langle \mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle \cdot \langle -\mathbf{k}|T|\mathbf{p}\rangle^*) \right]. \end{aligned} \quad (8.15)$$

Los dos primeros términos representan el resultado clásico (8.9) que obtuvimos sumando las probabilidades para ambos procesos indistinguibles. El término de interferencia es de origen puramente cuántico.

Vamos a mostrar ahora que es posible llegar a esta misma expresión sin necesidad de trabajar explícitamente con los espines de las partículas colisionantes. Para ello ya no vamos a suponer que el estado inicial es como se indicaba en 8.10, donde cada partículas tenía individualmente una proyección de espín definida. En su lugar vamos a considerar una función de onda que es autoestado del espín total. Como usualmente el blanco y el proyectil se preparan en forma independiente, esta función de onda no representa una situación física fácilmente realizable. Sin embargo, como para llegar a la expresión 8.15 debemos promediar sobre todos los posibles estados de espín, ésto no representa una dificultad, sino todo lo contrario, ya que se simplifica mucho el análisis matemático del problema.

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

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

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}\rangle + (-1)^S |-\mathbf{p}\rangle) \quad (8.16)$$

$$|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{k}\rangle + (-1)^S |-\mathbf{k}\rangle) . \quad (8.17)$$

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

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_S = (2\pi)^4 m^2 \left| \langle \mathbf{k} | T | \mathbf{p} \rangle + (-1)^S \langle -\mathbf{k} | T | \mathbf{p} \rangle \right|^2 . \quad (8.18)$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{s}{2s+1} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S \text{ par}} + \frac{s+1}{2s+1} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S \text{ impar}} , \quad (8.19)$$

que conduce nuevamente al resultado 8.15.

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S=0} + \frac{3}{4} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{S=1} . \quad (8.20)$$

Si la interacción es coulombiana $V(r) = Z/r$, reemplazando la fórmula de Rutherford 7.21 en 8.15 obtenemos la llamada fórmula de Mott

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = & \left(\frac{Z}{4E_p} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} + \right. \\ & \left. + \frac{2(-1)^{2s} \cos(n \ln(\cot^2 \theta/2))}{2s+1 \sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right] , \end{aligned} \quad (8.21)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_P} &= \left(\frac{Z}{2E_P}\right)^2 \cos\theta_P \left[\frac{1}{\sin^4\theta_P} + \frac{1}{\cos^4\theta_P} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2(-1)^{2s} \cos(n \ln(\cot^2\theta_P))}{2s+1 \sin^2\theta_P \cos^2\theta_P} \right] \Theta(\pi/2 - \theta_P) . \end{aligned} \quad (8.22)$$

8.3 Colisión electrón - átomo

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

$$t = t^D + n_B(-1)^{2s}t^I , \quad (8.23)$$

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

La sección eficaz resulta

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 m^2 \left(|t^D|^2 + n_B^2 |t^I|^2 + 2n_B(-1)^{2s} \text{Real}(t^{D*} \cdot t^I) \right) . \quad (8.24)$$

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

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

$$\begin{aligned} t^D &= \langle \mathbf{k}, m'_1, m'_2 | V | \mathbf{p}, m_1, m_2 \rangle = \\ &= - \frac{Z_B}{2\pi^2} \frac{8\alpha^2 + |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2}{[4\alpha^2 + |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2]^2} \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} , \end{aligned} \quad (8.25)$$

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

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

$$\begin{aligned} t^I &= \langle \mathbf{k}, m'_2, m'_1 | V | \mathbf{p}, m_1, m_2 \rangle = \\ &= \frac{Z_B}{2\pi^2} \frac{2\alpha^2}{p^2} \frac{8\alpha^2}{[4\alpha^2 + |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2]^2} \delta_{m_1 m'_2} \delta_{m_2 m'_1}. \end{aligned} \quad (8.26)$$

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

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

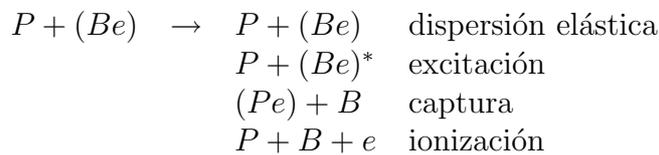
¹J. R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*, pag.456 (John Wiley Inc., New York, 1972).

Capítulo 9

Colisión multicanal

9.1 Introducción

Hasta ahora hemos discutido únicamente procesos en los cuales dos partículas sin estructura efectúan una colisión elástica. A partir de este punto vamos a estudiar fenómenos que incluyen varias partículas, así como procesos inelásticos tales como excitación o ionización. Un ejemplo típico de tales complicaciones se da en la colisión, que usaremos como modelo, de un proyectil P contra un átomo hidrogenoide formado por un núcleo B y un electrón e . Tenemos varias posibilidades:



Cada uno de los posibles conjuntos finales de partículas se llama canal y por esta razón los procesos de varias partículas se denominan multicanales.

Las tres partículas P , B y e interactúan a través de potenciales de dos cuerpos V_{BP} , V_{Be} y V_{Pe} . El Hamiltoniano total es $H = H_o + V^o$, donde H_o es la energía cinética del sistema y V^o es el potencial total

$$V^o = V_{BP} + V_{Be} + V_{Pe} \tag{9.1}$$

Llamaremos canal B al canal donde la partícula B sigue formando un estado ligado con el electrón, mientras la partícula P se aleja. En forma similar definimos al canal P . Circunstancialmente podemos separar a cada canal en varios subcanales para distinguir, por ejemplo, los distintos estados de excitación del par acoplado.

Definimos el potencial de canal como aquella parte del potencial V^o que resulta inefectiva cuando los diferentes fragmentos de dicho canal se separan unos de otros.

Por ejemplo

$$V^B = V^o - V_{Be} = V_{Pe} + V_{PB} \quad (9.2)$$

Luego, para una órbita en un dado canal, la parte del Hamiltoniano que es efectiva asintóticamente ya no es H_o , sino el Hamiltoniano de canal, que definimos, por ejemplo,

$$H_B = H_o + V_{Be} \quad (9.3)$$

Por último llamaremos canal O al canal de ionización donde las tres partículas se alejan unas de otras, siendo en este caso H_o y V^o el Hamiltoniano y el potencial de canal respectivamente.

9.2 Operador de Møller

Evidentemente, ahora no cualquier vector en el espacio de Hilbert puede describir un estado asintótico posible del canal B , sino sólo aquellos vectores de cierto subespacio que describen a la partícula P libre y a las otras dos ligadas. Por cada vector $|\psi_{in}\rangle$ o $|\psi_{out}\rangle$ de este subespacio del canal B , hay una órbita $|\psi\rangle$ de la cual es asíntota entrante o saliente

$$e^{-iHt}|\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} e^{-iH_B t}|\psi_{in}\rangle \quad (9.4)$$

$$\xrightarrow{t \rightarrow \infty} e^{-iH_B t}|\psi_{out}\rangle \quad (9.5)$$

Definimos el operador de Møller del canal B

$$\Omega_{\pm}^B = \lim_{t \rightarrow \mp \infty} [e^{iHt} e^{-iH_B t}] \quad (9.6)$$

tal que, al actuar sobre un vector del subespacio del canal B , da el estado a $t = 0$ en el cual, o del cual, evoluciona el estado asintótico representado por tal vector

$$|\psi\rangle = \Omega_+^B |\psi_{in}\rangle = \Omega_-^B |\psi_{out}\rangle \quad (9.7)$$

9.3 Vectores base del subespacio de canal

Estudiando el problema en el sistema centro de masa podemos describir la cinemática con alguno de varios posibles sistemas de coordenadas, como por ejemplo los indicados en la figura siguiente.

Evidentemente el sistema de coordenadas \mathbf{r}_B , \mathbf{R}_B es el más adecuado para describir los vectores $|B\rangle$ de la base del subespacio del canal B . En efecto, los

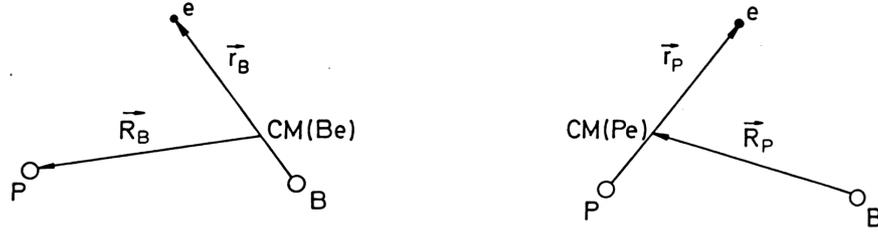


Figura 9.1: Sistemas de coordenadas para la descripción de una colisión multi-canal.

autovectores del Hamiltoniano del canal B están determinados por los estados ligados del par interactuante y por una onda plana de la partícula libre. O sea

$$\langle \mathbf{r} | B \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{P}_B \cdot \mathbf{R}_B} \phi_B(\mathbf{r}_B) \quad (9.8)$$

En el canal de ionización, donde las tres partículas se mueven libremente, los vectores de la base pueden ser descritos adecuadamente en cualquiera de ambos sistemas de coordenadas

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | O \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{P}_B \cdot \mathbf{R}_B + \mathbf{p}_B \cdot \mathbf{r}_B)} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{P}_P \cdot \mathbf{R}_P + \mathbf{p}_P \cdot \mathbf{r}_P)} \end{aligned} \quad (9.9)$$

9.4 Estados estacionarios de dispersión multi-canal

Definimos los estados estacionarios de dispersión multicanal como

$$|B\pm\rangle = \Omega_{\pm}^B |B\rangle = [1 + G(E_B \pm i\varepsilon)V^B] |B\rangle \quad (9.10)$$

con $G(z) = (z - H)^{-1}$ el operador de Green total. Estos estados son autovectores del Hamiltoniano total

$$H|B\pm\rangle = E_B|B\pm\rangle \quad (9.11)$$

con autovalor $E_B = p_B^2/2\mu_B + \epsilon_B$, siendo ϵ_B la energía del estado ligado del blanco y μ_B la masa reducida del canal B . En el mismo sentido algo impreciso que en el caso monocanal podemos pensar en $|B\pm\rangle$ como la órbita a $t = 0$ correspondiente a un estado asintótico libre $|B\rangle$ del canal B .

Si definimos el operador de Green de canal $G_B(z) = (z - H_B)^{-1}$, podemos escribir una ecuación de Lippmann – Schwinger multicanal

$$|B\pm\rangle = |B\rangle + G_B(E_B \pm i\varepsilon)V^B|B\pm\rangle \quad (9.12)$$

Por analogía con el caso monocanal, introducimos también un operador de transición T_{fi} , que acopla el canal i de entrada con el canal f de salida de una colisión

$$T_{fi}(z) = V^i + V^f G(z) V^i \quad (9.13)$$

9.5 Sección eficaz diferencial

Un cálculo en todo similar al realizado en el caso de colisiones monocanales permite obtener la sección eficaz diferencial para una transición del canal i al canal f

$$d\sigma_{fi} = \frac{(2\pi)^4 \mu_i}{P_i} |\langle f | T_{fi}(E_i + i\varepsilon) | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) d\mathbf{K}_f \quad (9.14)$$

con μ_i la masa reducida del canal inicial. Anotamos con \mathbf{P} y \mathbf{p} a los impulsos iniciales y con \mathbf{K} y \mathbf{k} a los finales. Supondremos que el canal i es de dos cuerpos únicamente, por ser ésta la única situación de interés físico. Si el canal f es el de ionización, debe agregarse el diferencial $d\mathbf{k}_f$ sobre el impulso del electrón emitido.

Capítulo 10

Colisiones inelásticas

10.1 Dispersión inelástica de partículas cargadas rápidas por átomos

Consideremos una colisión de excitación $P + (Be) \rightarrow P + (Be)^*$. La sección eficaz es

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\hat{K}_B} = (2\pi)^4 \mu_B^2 \frac{K_B}{P_B} \left| \langle \mathbf{K}_B \phi_f | V^B + V^B G(E + i\varepsilon) V^B | \mathbf{P}_B \phi_i \rangle \right|^2 \quad (10.1)$$

En primer orden de Born, es decir despreciando órdenes superiores de Z_P/v_P , obtenemos para el elemento de matriz de transición

$$\begin{aligned} t_1 &\simeq \langle \mathbf{K}_B \phi_f | V^B | \mathbf{P}_B \phi_i \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{P}_B - \mathbf{K}_B) \cdot \mathbf{R}_B} \phi_f^*(\mathbf{r}_B) \phi_i(\mathbf{r}_B) [V_{PB}(R_B) + V_{Pe}(r_P)] d\mathbf{r}_B d\mathbf{R}_B \end{aligned} \quad (10.2)$$

donde, como la masa del núcleo del blanco es mucho mayor que la del electrón, hemos aproximado la separación internuclear por la coordenada \mathbf{R}_B . Resulta finalmente

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\hat{K}_B} \simeq \left(\frac{2Z_P}{|\mathbf{P}_B - \mathbf{K}_B|^2} \right)^2 [Z_B \delta_{fi} - F_{fi}(\mathbf{P}_B - \mathbf{K}_B)]^2 \quad (10.3)$$

donde

$$F_{fi}(\mathbf{q}) = \int \phi_f^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \phi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (10.4)$$

es el factor de forma del átomo blanco. En general, para un átomo multielectrónico

$$F_{fi}(\mathbf{q}) = \int \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \sum_{n=1}^N e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_n} \phi_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (10.5)$$

Para ángulos de dispersión pequeños el impulso transferido es, aproximadamente,

$$q \simeq P_B - K_B \simeq \frac{P_B^2 - K_B^2}{2P_B} = \frac{\Delta\epsilon}{v_P} \quad (10.6)$$

con $\Delta\epsilon$ la diferencia de energía entre los estados inicial y final del blanco. Anotamos $\Delta\epsilon \simeq Z_B^2/a$, con a el radio del átomo. Con esto vemos que $qa \approx Z_B^2/v_P \ll 1$ en el límite de alta energía y, por lo tanto, podemos desarrollar las exponenciales en el factor de forma, resultando a primer orden

$$F_{fi}(\mathbf{q}) \approx \delta_{fi} + i\mathbf{q} \cdot \int \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \sum_{n=1}^N \mathbf{r}_n \phi_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (10.7)$$

O sea que la amplitud de dispersión está dada por el momento dipolar eléctrico para la transición $i \rightarrow f$. Esto nos dice que la dispersión de ángulos pequeños produce transiciones ópticamente permitidas: La paridad debe cambiar ($\Delta \sum_{n=1}^N \ell_n = \pm 1$), al igual que los momentos angulares ($\Delta L, \Delta J = 0, \pm 1$), estando prohibidas las transiciones $J_i = 0 \rightarrow J_f = 0$, $L_i = 0 \rightarrow L_f = 0$ y cualquier variación en el espín ($\Delta S = 0$).

En la figura 10.1 mostramos la sección eficaz para la dispersión inelástica de electrones de $200eV$ ($v_P = 3.83u.a.$) por átomos de Helio. A ángulos pequeños las transiciones ópticamente permitidas $1^1S \rightarrow 2^1P$ y $1^1S \rightarrow 3^1P$ dominan sobre la transición prohibida $1^1S \rightarrow 2^1S$ y la dispersión elástica. A grandes ángulos, en cambio, la dispersión elástica es dominante.

En la figura 10.2 comparamos la distribución angular de electrones dispersados inelásticamente por átomos de Helio con resultados experimentales para $120eV$ ($v_P = 2.97u.a.$) y $196eV$ ($v_P = 3.80u.a.$). El acuerdo es muy bueno, excepto a ángulos grandes, tal como ocurría con la dispersión elástica.

10.2 Aproximación de onda distorsionada

Es obvio que la aproximación de Born podría mejorarse si reemplazamos las ondas planas que describen el movimiento del proyectil por funciones de onda más próximas a la solución exacta. De hecho, en el problema que nos ocupa, el proyectil se mueve en un potencial dado aproximadamente por

⁰N. F. Mott y H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, pags. 164 y 166 (Oxford University Press, Oxford, 1933).

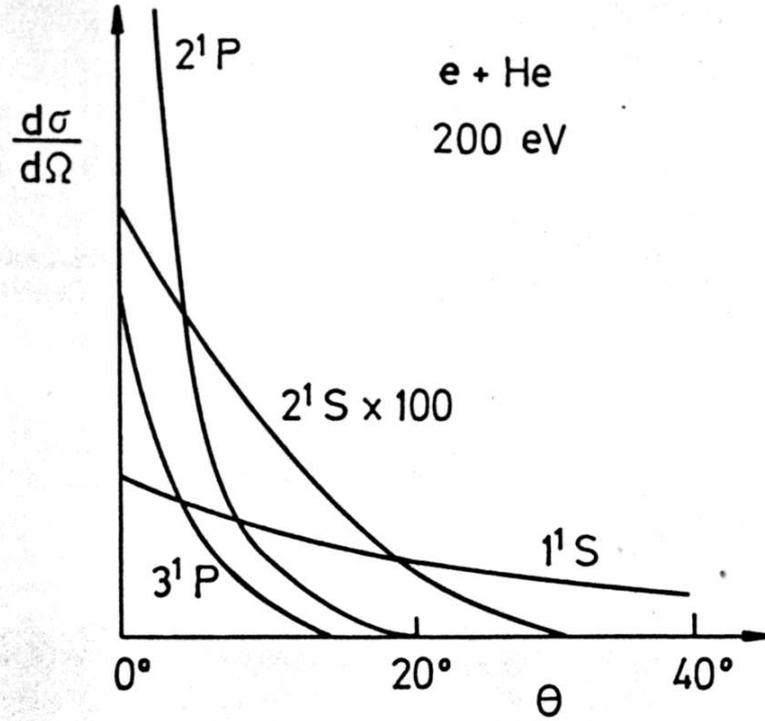


Figura 10.1: Distribución angular de electrones de 200 eV dispersados inelásticamente por átomos de Helio. ¹

$$U^i(R) = \langle \phi_i | V^B | \phi_i \rangle = \quad (10.8)$$

$$= \frac{Z_B Z_P}{R} - Z_P \int |\phi_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 \sum_{n=1}^N \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_n|} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (10.9)$$

en la trayectoria incidente, y

$$U^f(R) = \langle \phi_f | V^B | \phi_f \rangle = \quad (10.10)$$

$$= \frac{Z_B Z_P}{R} - Z_P \int |\phi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 \sum_{n=1}^N \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_n|} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (10.11)$$

en la trayectoria saliente.

Definimos entonces los estados distorsionados de canal j por medio de la ecuación de Lippmann-Schwinger

$$|jd\pm\rangle = |j\rangle + G_j(E \pm i\varepsilon)U^j|jd\pm\rangle \quad (10.12)$$

que, reemplazando en la matriz de transición, nos conduce a

$$\begin{aligned} t_{fi} &= \langle f - |V^i|i \rangle = \\ &= \langle f - |V^i(1 - G_i U^i)|id+ \rangle = \\ &= \langle f - |V^i - U^i|id+ \rangle + \langle f - |(1 - V^i G_i)U^i|id+ \rangle \end{aligned} \quad (10.13)$$

Trabajando sobre este segundo término resulta finalmente

$$t_{fi} = \langle f - |V^i - U^i|id+ \rangle + \langle f|(V^f - V^i) + U^i|id+ \rangle \quad (10.14)$$

Este resultado es exacto y se conoce como fórmula de los dos potenciales, de Gell-mann – Goldberger o teorema de Watson.

La denominada *aproximación de Born de onda distorsionada* se obtiene despreciando términos de orden superior en los potenciales $V^i - U^i$ o $V^f - U^f$. De esta manera escribimos

$$t_{fi} = \langle fd - |V^i - U^i|id+ \rangle + \langle f|(V^f - V^i) + U^i|id+ \rangle \quad (10.15)$$

Matemáticamente esta aproximación es equivalente al desarrollo de Born, pero no alrededor de $V = 0$, sino de $V = U$, el potencial de distorsión. Vemos que el potencial de distorsión es tenido en cuenta a todos los órdenes en el segundo sumando, mientras que el primero es el elemento de matriz del potencial pequeño $V - U$, pero no entre ondas planas sino entre ondas distorsionadas. Representa la aproximación de Born para la dispersión por el potencial $V - U$ en presencia del potencial de distorsión U .

10.3 Dispersión inelástica a energías intermedias

En las colisiones elásticas o de excitación $V^i = V^f$, y la aproximación de onda distorsionada es

$$t_{fi} = \langle fd - |V^i - U^i|id+ \rangle + \langle f|U^i|id+ \rangle \quad (10.16)$$

El potencial U^i sólo actúa sobre la coordenada internuclear, por lo cual, el segundo término es aproximadamente nulo en el caso inelástico

$$t_{fi} \simeq \langle \phi_f \mathbf{K}_B d - |V^B - U^i| \phi_i \mathbf{P}_B d+ \rangle + \delta_{fi} \langle \mathbf{K}_B | U^i | \mathbf{P}_B d+ \rangle \quad (10.17)$$

donde $\langle \mathbf{K}_B | U^i | \mathbf{P}_B d+ \rangle$ es la matriz de transición de la teoría monocanal para la dispersión por el potencial U^i . El cálculo del primer término puede realizarse numéricamente con funciones de onda de Hartree – Fock para ϕ_j .

²H. S. W. Mott y H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, 3rd. ed., pag. 593 (Oxford University Press, Oxford, 1965).

En la figura 10.3 se comparan resultados teóricos y experimentales para la colisión de electrones contra átomos de Argón a energías bajas. Hay un acuerdo cualitativo que sería imposible en la aproximación de Born. Un hecho que sorprende es que las distribuciones angulares sean similares en los casos elástico e inelástico. Esto se debe a que la dependencia angular está contenida principalmente en los estados distorsionados que son muy similares en ambos casos.

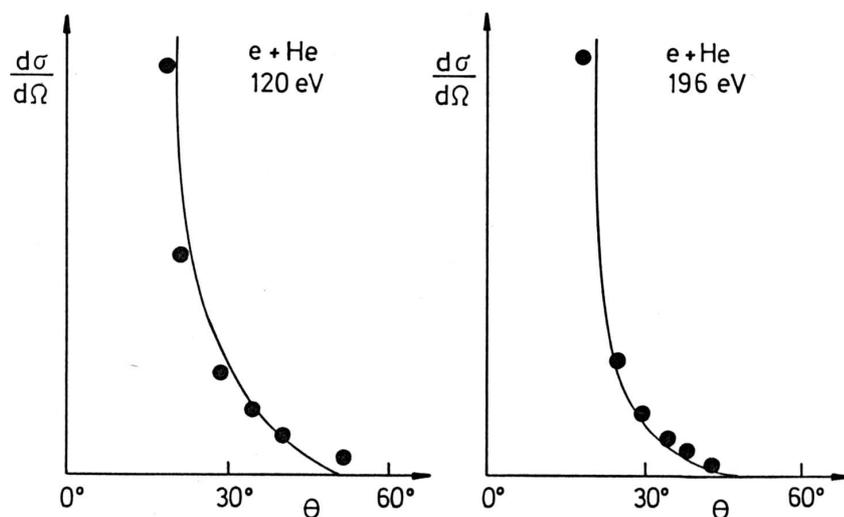


Figura 10.2: Distribución angular de electrones de 120 eV y 196 eV dispersados inelásticamente por átomos de Helio, comparación con datos experimentales. ¹

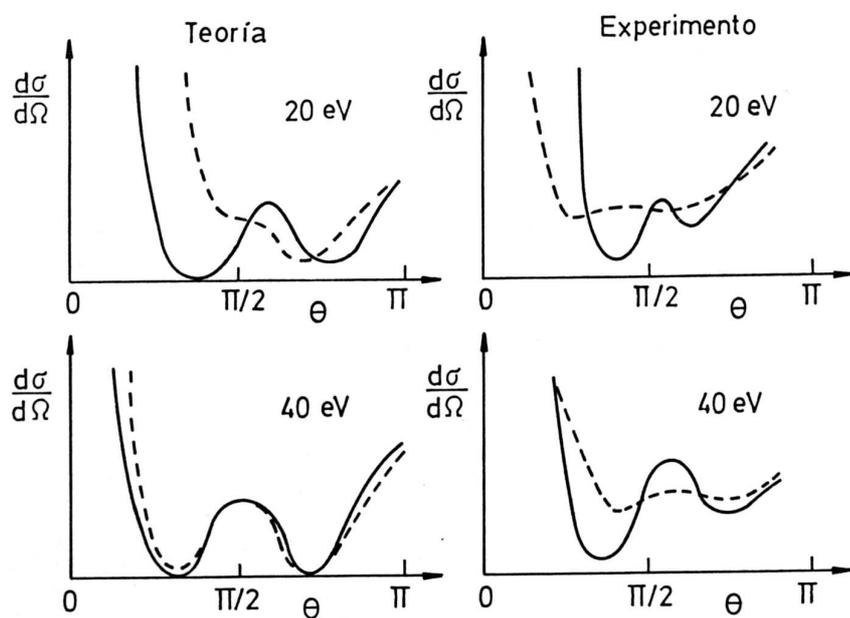


Figura 10.3: Distribución angular de electrones de 20 y 40 eV dispersados elástica (—) e inelásticamente (- -) por átomos de Argón. ²

Capítulo 11

Captura electrónica

11.1 Introducción

Consideremos una colisión de un ión P contra un átomo hidrogenoide (Be). El ión puede capturar al electrón del átomo, constituyendo lo que se ha dado en llamar un proceso de intercambio de carga o de captura electrónica.

La sección eficaz es

$$\frac{d\sigma}{d\hat{K}_P} = (2\pi)^4 \mu_B \mu_P \frac{K_P}{P_B} \left| \langle \mathbf{K}_P \phi_P | V^P + V^P G(E + i\varepsilon) V^B | \mathbf{P}_B \phi_B \rangle \right|^2 \quad (11.1)$$

donde los impulsos inicial \mathbf{P}_B y final \mathbf{K}_P están relacionados por la ecuación de conservación de energía

$$\frac{K_P^2}{2\mu_P} + \epsilon_P = \frac{P_B^2}{2\mu_B} + \epsilon_B \quad (11.2)$$

con ϵ_B y ϵ_P las energías de los estados ligados inicial y final, respectivamente.

La interacción internuclear actúa sobre la trayectoria de los núcleos pero no puede afectar de manera significativa al movimiento electrónico. Este es el denominado *argumento de Wick*¹, que nos permite despreciar el potencial V_{PB} en todos los cálculos.

11.2 Aproximación de Oppenheimer, Brinkman y Kramers

En primera aproximación de Born tenemos

¹ver nota a pie de página en J. D. Jackson y H. Schiff, Phys. Rev. **89**, 359 (1953).

$$\begin{aligned}
t_{OBK} &= \langle \mathbf{K}_P \phi_P | V^P | \mathbf{P}_B \phi_B \rangle \simeq \\
&\simeq \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{K}_P \cdot \mathbf{r}_P} \phi_P^*(\mathbf{r}_P) V_{Be}(r_B) \phi_B(\mathbf{r}_B) e^{i\mathbf{P}_B \cdot \mathbf{r}_B} d\mathbf{r}_B d\mathbf{r}_P
\end{aligned} \tag{11.3}$$

que, con un cambio de coordenadas, podemos anotar

$$\begin{aligned}
t_{OBK} &= \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{k}_P + (\mathbf{K}_B - \mathbf{P}_B)) \cdot \mathbf{r}_P} \phi_P^*(\mathbf{r}_P) V_{Be}(r_B) \phi_B(\mathbf{r}_B) e^{-i(\mathbf{p}_B + (\mathbf{K}_P - \mathbf{P}_P)) \cdot \mathbf{r}_B} d\mathbf{r}_B d\mathbf{r}_P = \\
&= \langle \phi_P | \mathbf{k}_P + (\mathbf{K}_B - \mathbf{P}_B) \rangle \langle \mathbf{p}_B + (\mathbf{K}_P - \mathbf{P}_P) | V_{Be} | \phi_B \rangle = \\
&= \langle \phi_P | \mathbf{k}_P + (\mathbf{K}_B - \mathbf{P}_B) \rangle \langle \mathbf{p}_B + (\mathbf{K}_P - \mathbf{P}_P) | H_B - H_o | \phi_B \rangle = \\
&= \langle \phi_P | \mathbf{k}_P + (\mathbf{K}_B - \mathbf{P}_B) \rangle \left(\epsilon_B - \frac{|\mathbf{p}_B + (\mathbf{K}_P - \mathbf{P}_P)|^2}{2m_B} \right) \langle \mathbf{p}_B + (\mathbf{K}_P - \mathbf{P}_P) | \phi_B \rangle
\end{aligned} \tag{11.4}$$

con $m_B = mM_B/(m + M_B)$ la masa reducida del par (Be) .

Si la captura se produce de un estado $1s$ a otro $1s$, reemplazando

$$\langle \mathbf{q} | \phi_{1s} \rangle = \frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{(mZ)^{5/2}}{[(mZ)^2 + q^2]} \tag{11.5}$$

y aproximando $m_B \simeq m_P \simeq 1$, resulta

$$t_{OBK}^{1s \rightarrow 1s} = \frac{4}{\pi^2} \frac{(Z_B Z_P)^{5/2}}{[Z_B^2 + |\mathbf{p}_B + (\mathbf{K}_P - \mathbf{P}_P)|^2]^3} \tag{11.6}$$

Y así podemos calcular la sección eficaz total de captura al nivel $1s$ en la primera aproximación de Born o *aproximación de Oppenheimer - Brinkman - Kramers*.

$$\sigma_{OBK}^{1s \rightarrow 1s} = \frac{2^{18} \pi}{5} (Z_B Z_P)^5 \frac{(Ry/E)^6}{[1 + (Ry/E)^2 (Z_P^2 - Z_B^2)^2 + 2(Ry/E)(Z_P^2 + Z_B^2)]^5} \tag{11.7}$$

donde el Rydberg, $Ry = 13.6058$ eV, es la energía del estado fundamental del Hidrógeno y E es la energía inicial del proyectil.

11.3 Captura a un estado excitado en la aproximación OBK

La sección eficaz para la captura electrónica a un estado ligado ns está dada por

$$\begin{aligned}\sigma_{OBK}^{1s \rightarrow ns} &= \\ &= \frac{2^{18}\pi}{5n^3} (Z_B Z_P)^5 \frac{(Ry/E)^6}{[1 + (Ry/E)^2 (Z_P^2/n^2 - Z_B^2)^2 + 2(Ry/E)(Z_P^2/n^2 + Z_B^2)]^5}\end{aligned}\quad (11.8)$$

En particular, si $n \gg 1$

$$\sigma_{OBK}^{1s \rightarrow ns} = \frac{2^{18}\pi}{5n^3} (Z_B Z_P)^5 \frac{(Ry/E)^6}{[1 + Z_B^2 Ry/E]^{10}} \quad (11.9)$$

Este resultado da soporte al argumento de Oppenheimer² según el cual la sección eficaz para la captura a un estado ligado de número cuántico principal n es proporcional a n^{-3} .

11.4 Mecanismo de Thomas

En 1927 Thomas³ había sugerido que el proceso de captura podía explicarse desde un punto de vista clásico de la siguiente manera: Para que el electrón pueda ser capturado por el proyectil debe ser dispersado hacia una trayectoria que lo aproxime a éste. Evidentemente esto no es posible en una colisión directa electrón – proyectil. Por lo tanto, la forma de lograrlo es que el electrón sea empujado por el proyectil en dirección al núcleo del blanco, para luego ser dispersado por éste hacia una trayectoria aproximadamente paralela a la del proyectil y con igual velocidad. Finalmente la atracción entre el proyectil y el electrón hace que éste sea arrastrado por aquél en un estado ligado.

Lo interesante de este mecanismo de Thomas es que describe el proceso de captura electrónica como compuesto de una primera etapa de ionización del blanco y otra posterior de captura por el proyectil. Además es el equivalente clásico de la segunda aproximación de Born

$$t_{2B} = \langle \mathbf{K}_P \phi_P | V_{Be} | \mathbf{P}_B \phi_B \rangle + \langle \mathbf{K}_P \phi_P | V_{Be} G_o V_{Pe} | \mathbf{P}_B \phi_B \rangle \quad (11.10)$$

En efecto, el segundo término representa una colisión del electrón con el proyectil (V_{Pe}), una propagación libre (G_o) y una colisión con el blanco (V_{Be}).

El cálculo de este segundo orden de Born es bastante complicado. En el límite de muy alta energía resulta⁴ para la transferencia a un nivel $1s$

$$\sigma^{1s \rightarrow 1s} \simeq \left(0.2946 + \frac{5\pi}{2^{12}} \sqrt{E/Ry} \right) \sigma_{OBK}^{1s \rightarrow 1s} \quad (11.11)$$

²J. R. Oppenheimer, Phys. Rev. **31**, 349 (1928).

³L. H. Thomas, Proc. Roy. Soc. **114**, 501 (1927).

⁴R. Shakeshaft y L. Spruch, Rev. Mod. Phys. **51**, 369 (1979).

que muestra que la sección eficaz de la segunda aproximación de Born es proporcional a $E^{-11/2}$. La misma dependencia, aunque con diferentes coeficientes, fue encontrada por Thomas con su cálculo clásico.

Vemos claramente que la serie de Born no converge a su primer orden para altas energías, ya que éste –al no incluir el mecanismo de Thomas– es incapaz de describir correctamente el proceso de captura. Decimos que todo proceso de intercambio de carga es de segundo orden en el desarrollo de Born.

Clásicamente las leyes de conservación del impulso y la energía requieren que, al producirse la captura del electrón por el mecanismo de Thomas, el proyectil sea deflectado en un ángulo

$$\Theta_T = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{m}{M_P} \quad (11.12)$$

Este efecto debería producir un pico en la sección eficaz diferencial para $\Theta = \Theta_T$. Y en efecto, aunque este ángulo es muy pequeño (0.00047 radianes $\simeq 0.027^\circ$ para protones), el *pico de Thomas* pudo finalmente observarse experimentalmente⁵ en 1982, constituyendo una clara evidencia de la importancia de los mecanismos de segundo orden en los procesos de captura. En las figuras mostramos una medición reciente⁶ en la colisión $H^+ + H$ a $5MeV$ y una predicción teórica⁴ del ao 1979 donde se observa claramente la ausencia del pico de Thomas en la primera aproximación de Born.

⁵E. Horsdal–Pedersen, C. L. Cocke y M. Stckli, Phys. Rev. Lett. **50**, 1910 (1982).

⁶H. Vogt, R. Schuch, E. Justiniano, M. Schulz y W. Schwab, Phys. Rev. Lett. **57**, 2256 (1986)

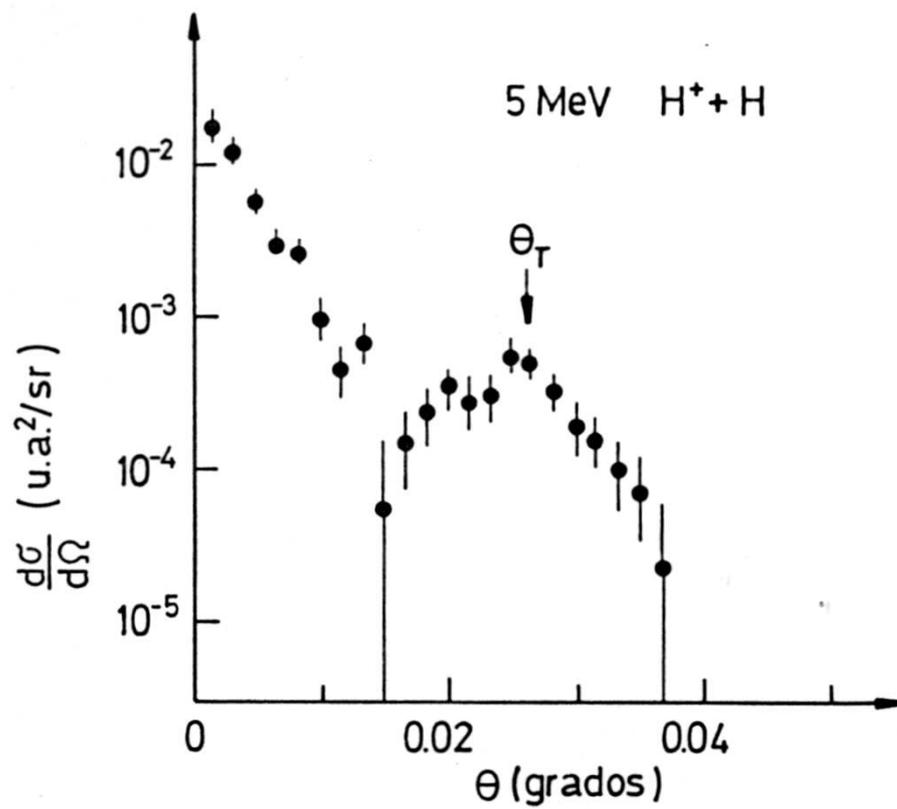


Figura 11.1: Sección eficaz diferencial de captura medida para la colisión de protones de 5 MeV con Hidrógeno atómico.⁶

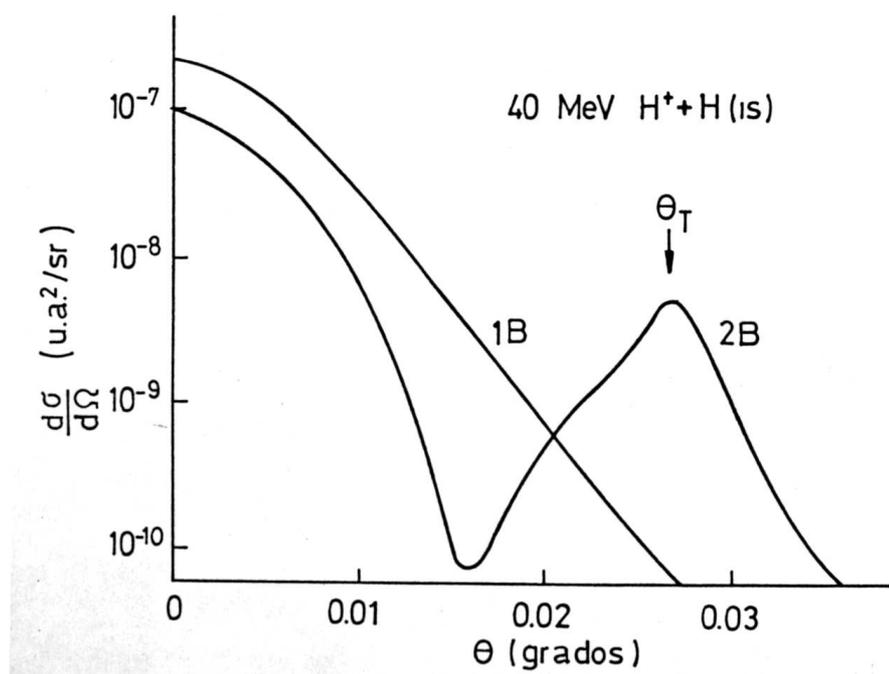


Figura 11.2: Sección eficaz diferencial de captura calculada en 1ra. y 2da. aproximación de Born para la colisión de protones de 40 MeV con Hidrógeno atómico.⁴

Capítulo 12

Emisión de electrones en colisiones de alta energía

12.1 Introducción

Consideremos una colisión en la cual se emiten electrones. Estos pueden provenir de tres procesos:

- Ionización directa del blanco
- Ionización directa del proyectil
- Mecanismos post-colisionales

Analicemos con más detalle estos tres posibles mecanismos:

Ionización directa del blanco En la figura 12.1 se muestra esquemáticamente la distribución de electrones emitidos en la ionización de Hidrógeno atómico por colisión de protones, como función de las componentes de la velocidad del electrón \mathbf{v}_e paralela y perpendicular a la velocidad del proyectil \mathbf{v}_P .

Vemos que la sección eficaz presenta tres características dominantes:

- Un incremento a bajas energías, que se debe a electrones que sólo necesitaron una transferencia mínima de energía para ser emitidos. Se los denomina *electrones blandos*.
- Una gran densidad de electrones cuando $|\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_P| \simeq v_P$. Estos electrones se denominan *binarios* y resultan de una colisión directa del proyectil contra el electrón, independientemente de la presencia del núcleo.

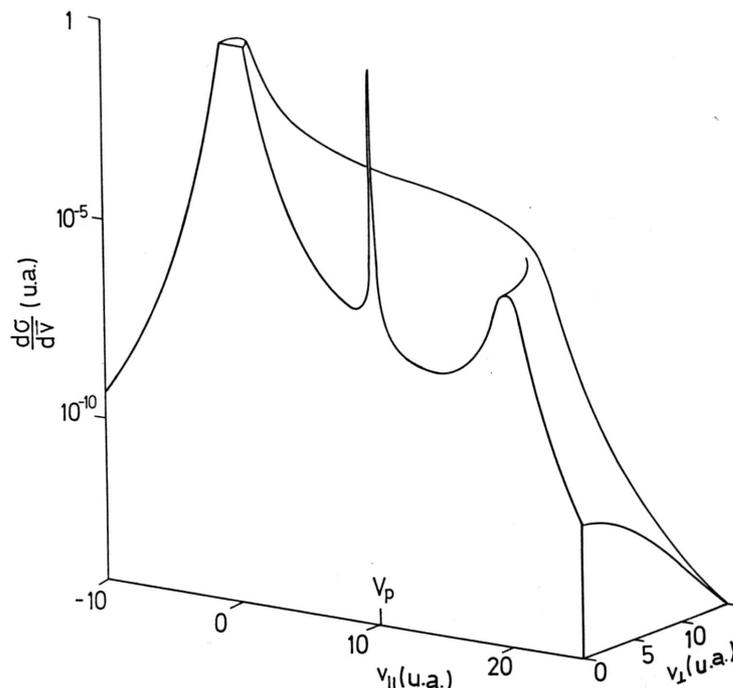


Figura 12.1: Sección eficaz para la ionización de Hidrógeno atómico por colisión de C^{6+} de 10 u.a. de velocidad. $v_{||}$ y v_{\perp} indican las componentes paralela y perpendicular del impulso del electrón respecto de la dirección de incidencia¹.

- Un notable incremento de la sección eficaz cuando $\mathbf{v}_e \simeq \mathbf{v}_P$, que puede explicarse suponiendo que el electrón es transferido a un estado del continuo del proyectil. Este proceso se denomina *captura electrónica al continuo*.

En la figura 12.2 mostramos un esquema de la ubicación, en el espacio de velocidades del electrón, de estos máximos de la sección eficaz.

Ionización directa del proyectil Cuando el proyectil no es un ión desnudo puede contribuir a la emisión de electrones. Visto desde un sistema de referencia fijo al proyectil se trata del mismo proceso anterior donde ahora se han intercambiado los roles del proyectil y del blanco. En la figura 12.3 mostramos la ubicación de los máximos principales de la sección eficaz en el espacio de velocidades del electrón. Los electrones blandos provenientes de uno de los átomos se superponen con los electrones capturados al continuo provenientes del otro átomo.

¹R. Pregliasco, *Tesis Doctoral* (Universidad Nacional de Buenos Aires, 1993).

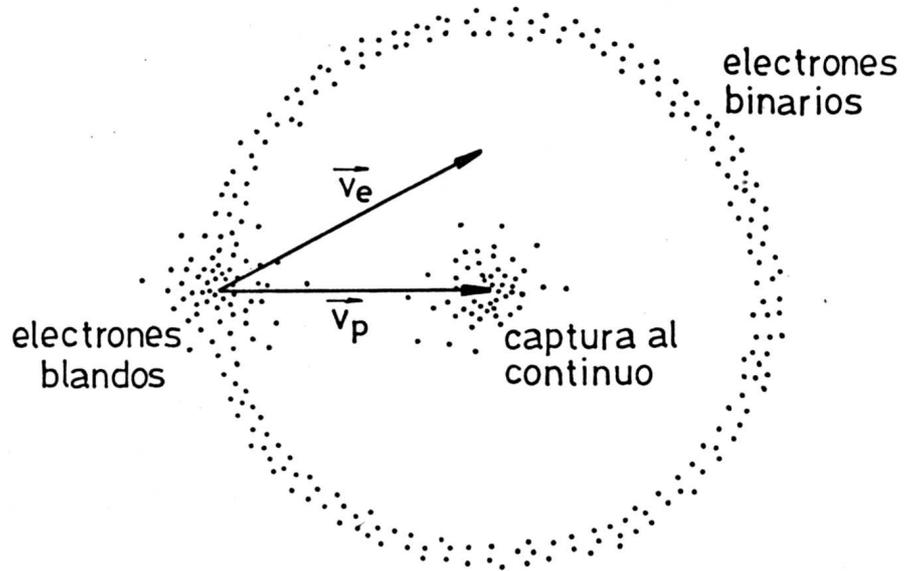


Figura 12.2: Esquema de la ubicación, en el espacio de velocidades del electrón, de los máximos de la sección eficaz para la ionización directa del blanco.

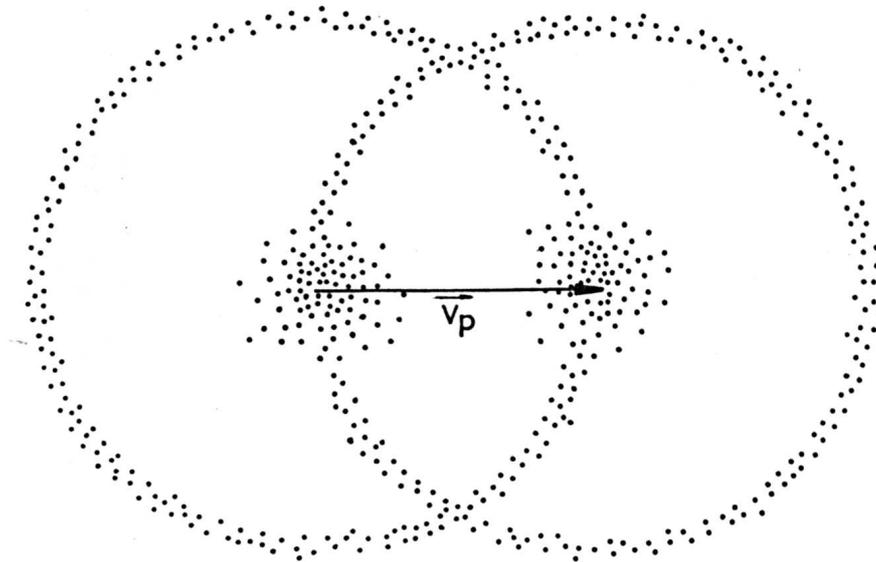


Figura 12.3: Esquema de la ubicación, en el espacio de velocidades del electrón, de los máximos de la sección eficaz para la ionización del blanco y del proyectil.

Mecanismos post-colisionales El proceso post - colisional más importante para la producción de electrones es el efecto Auger en el blanco o en el proyectil. Para proyectiles rápidos el tiempo de colisión es menor que la vida media del nivel Auger y, por lo tanto, la emisión se produce *después* de haber ocurrido la colisión: la distribución de electrones Auger presenta, alrededor del emisor, la simetría de la transición en la cual se originó. Por ejemplo, la distribución de electrones provenientes de la excitación de una capa K es prácticamente isotrópica alrededor del emisor.² En este caso la intensidad de los electrones Auger provenientes del blanco no varía con el ángulo, mientras que la de los originados en el proyectil sí lo hace. Todo esto se aprecia claramente en la figura 12.4 que muestra secciones eficaces medidas a diferentes ángulos para la colisión $O^{5+} + O_2$ a 30 MeV

12.2 Ionización del blanco

La sección eficaz es

$$d\sigma = (2\pi)^4 \mu_B^2 \frac{K_B}{P_B} \left| \langle \mathbf{K}_B \mathbf{k}_B | V^B + V^o G(E + i\varepsilon) V^B | \mathbf{P}_B \phi_B \rangle \right|^2 d\hat{K}_B d\mathbf{k}_B \quad (12.1)$$

donde los impulsos inicial \mathbf{P}_B y finales \mathbf{K}_B y \mathbf{k}_B están relacionados por la ecuación de conservación de energía

$$\frac{K_B^2}{2\mu_B} + \frac{k_B^2}{2m_B} = \frac{P_B^2}{2\mu_B} + \epsilon_B \quad (12.2)$$

con $\epsilon_B < 0$, la energía del estado ligado inicial.

Como sólo nos interesa la emisión de electrones, integramos respecto de la dirección de dispersión del proyectil

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}_B} = (2\pi)^4 \mu_B \frac{K_B}{P_B} \int |t|^2 d\hat{K}_B \quad (12.3)$$

con

$$t = \langle \mathbf{K}_B \mathbf{k}_B | V^B + V^o G(E + i\varepsilon) V^B | \mathbf{P}_B \phi_B \rangle \quad (12.4)$$

En primera aproximación de Born

$$t_{1B} = \langle \mathbf{K}_B \mathbf{k}_B | V^B | \mathbf{P}_B \phi_B \rangle \quad (12.5)$$

²Esto no es rigurosamente cierto, ya que la presencia de la “otra” partícula (blanco o proyectil) que participa en la colisión puede alterar la distribución angular de los electrones emitidos. Ver J. K. Swenson, C. C. Havener, N. Stolterfoht, K. Sommer y F. W. Meyer, Phys. Rev. Lett. **63**, 35 (1989).

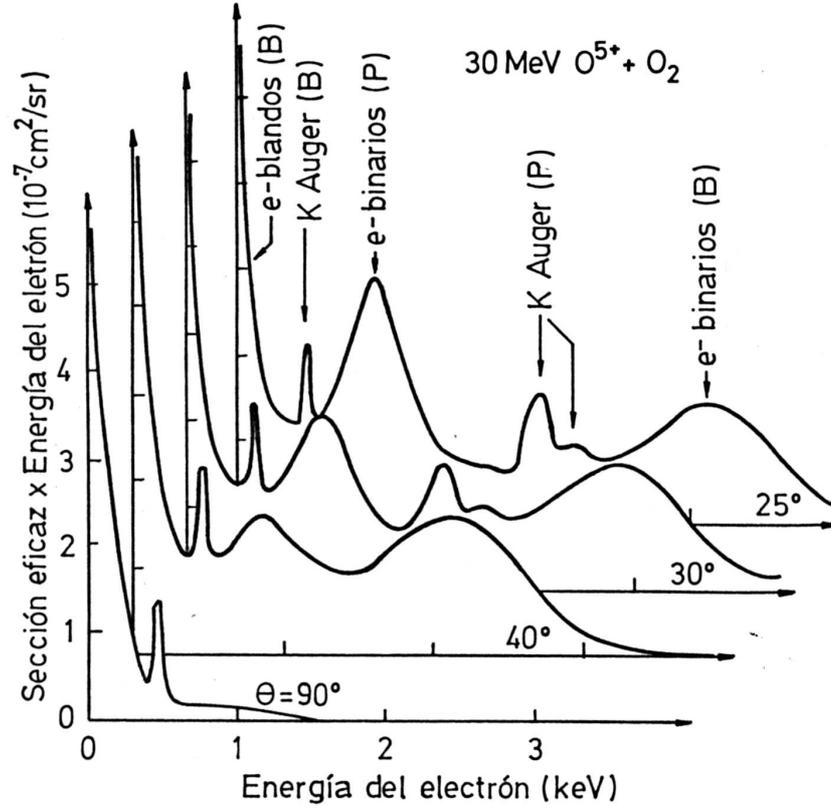


Figura 12.4: Sección eficaz diferencial de ionización para la colisión $O^{5+} + O_2$ a 30 MeV. ³

Este elemento de matriz es idéntico al primer orden de Born para excitación, salvo que ahora el estado final ya no es un estado ligado ϕ_f sino una onda plana. Repitiendo los mismos cálculos obtenemos

$$t_{1B} = \frac{Z_P}{2\pi^2} \frac{1}{|\mathbf{P}_B - \mathbf{K}_B|^2} \langle \mathbf{k}_B - m_B(\mathbf{P}_B - \mathbf{K}_B) | \phi_B \rangle \quad (12.6)$$

Este resultado indica que la sección eficaz es máxima cuando $\mathbf{k}_B \simeq m_B(\mathbf{P}_B - \mathbf{K}_B)$ que, reemplazando en la condición de conservación de energía escrita de la siguiente manera

$$\mathbf{v}_P \cdot (\mathbf{P}_B - \mathbf{K}_B) = \frac{|\mathbf{P}_B - \mathbf{K}_B|^2}{2\mu_B} + \frac{k_B^2}{2m_B} - \epsilon_B \quad (12.7)$$

³N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch, H. Wieman y J. S. Risley, Phys. Rev. Lett. **33**, 59 (1974).

conduce a la condición de electrones binarios

$$|\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_P| = v_P \sqrt{1 + \frac{\epsilon_B}{m_P v_P^2 / 2}} \quad (12.8)$$

Clásicamente los electrones binarios corresponden a una colisión isotrópica del electrón activo contra el proyectil donde, en el proceso, el electrón pierde una energía $-\epsilon_B$. En efecto, por conservación de energía

$$\frac{1}{2} m_P v_P^2 = \frac{1}{2} m_P |\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_P|^2 - \epsilon_B \quad (12.9)$$

que es equivalente a la ecuación 12.8.

12.3 Captura al continuo

Cuando el electrón es emitido con una velocidad próxima a la del proyectil, éste produce una fuerte distorsión de su función de onda, de manera tal que ya no puede ser descrita adecuadamente por una onda plana, sino por una onda coulombiana del continuo

$$\langle \mathbf{r}_P | \mathbf{k}_P - \rangle = \frac{\Gamma(1 - in_P)}{e^{\pi n_P / 2}} {}_1F_1(in_P; 1; -i(k_P r_P + \mathbf{k}_P \cdot \mathbf{r}_P)) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}_P \cdot \mathbf{r}_P} \quad (12.10)$$

con $n_P = -\frac{Z_P}{k_P/m_P}$ y \mathbf{k}_P el impulso relativo electrón–proyectil. Reemplazando en el elemento de matriz de transición y haciendo los cálculos obtenemos el mismo resultado que en la primera aproximación de Born, excepto por la presencia del factor de normalización de la onda coulombiana

$$|t|^2 = \left| \frac{\Gamma(1 - in_P)}{e^{\pi n_P / 2}} \right|^2 |t_{1B}|^2 = \frac{\pi n_P e^{-\pi n_P}}{\sinh \pi n_P} |t_{1B}|^2 \quad (12.11)$$

Este factor diverge como

$$|t|^2 \simeq \frac{2\pi Z_P}{|\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_P|} |t_{1B}|^2 \quad (12.12)$$

cuando $|\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_P|$ es próximo a cero.

En la figura mostramos este pico divergente de captura al continuo en una medición realizada en la colisión $H^+ + He$ a 100 keV.

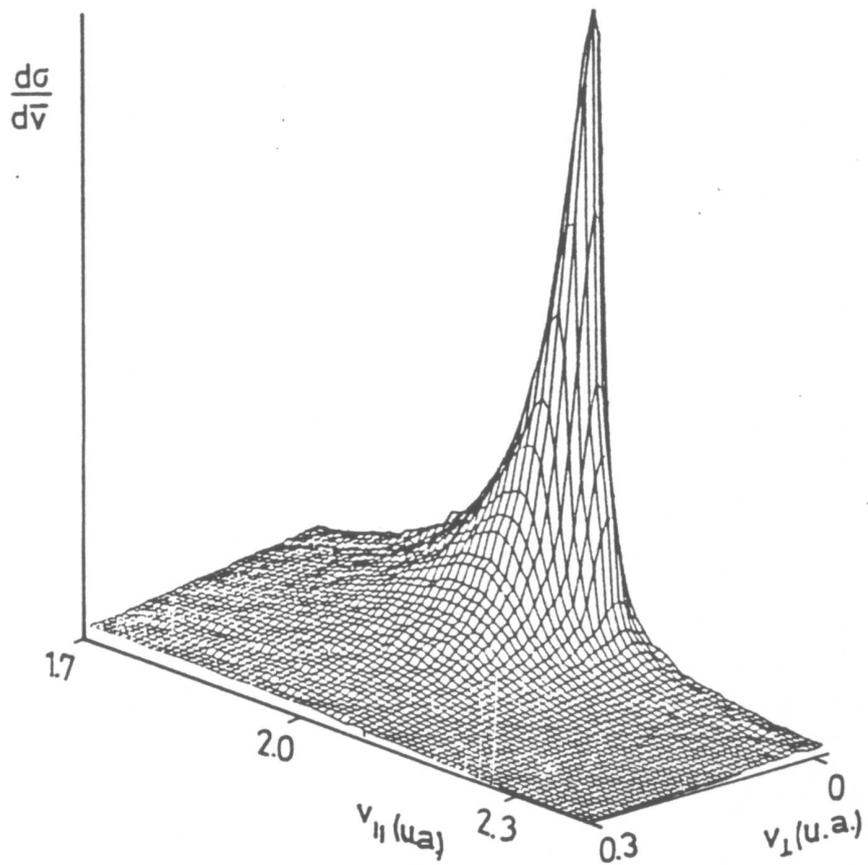


Figura 12.5: Medición de la sección eficaz de ionización para la colisión $H^+ + He$ a 100 keV. ⁴

⁴R. Pregliasco, *Tesis Doctoral* (Universidad Nacional de Buenos Aires, 1993), medición realizada en la División Colisiones Atómicas del Centro Atómico Bariloche, Argentina.

Apéndice A

Unidades Atómicas

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

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

Las unidades derivadas más utilizadas son

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Apéndice B

Teorema óptico

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Bibliografía

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

Índice

anomalía, operador coulombiano de	40	Dispersión, estados estacionarios de	10
arco iris, efecto	7	Dollard, teorema de	40
interferencia cuántica en el efecto	35	distorsionada, aproximación de Born	60
supernumerario	37	de onda	60
asintótica, condición	39	aproximación de onda	58
asintóticos, estados asintóticos coulombianos	41	estado distorsionado de canal	59
Auger, efecto	72	distorsión, potencial de	60
binarios, electrones	69, 74	dos potenciales, fórmula de	60
blandos, electrones	69	elástica, dispersión elástica por átomos	15
Born, corrección de la primera aproximación de	21	electron - átomo, colisión	50
primera aproximación de	13	entrelazado, relación de	40
primera aproximación de Born para	64	estacionaria, condición de fase	34
captura	64	estacionarios, estados estacionarios de	55
segunda aproximación de	15	dispersión multicanal	55
serie de	13	excitación, colisión de	57
segunda aproximación de Born para	65	forma, factor de forma atómico	16
captura	65	Gamow, factor de	42
canal, hamiltoniano de	54	Gell-mann – Goldberger, fórmula de	60
operador de Møller de	54	Gloria, efecto	7
potencial de	53	Green, operador de	9
vectores base del subespacio de	54	operador libre de	9
captura electrónica	63, 74	He, colisión e + He	16
captura al continuo, proceso de	70	idénticas, dispersión de partículas	47
centro de masa, sistema de referencia	45	intercambio, colisión de	50
de	45	intercambio de carga, proceso de	63
coulombiana, dispersión	11, 39	ionización directa del blanco	69
deflexión, función de	6	del proyectil	70
desfasaje	20	Jost, ceros de la función de	27

función de	27	transición, operador de	56
laboratorio, sistema de referencia del	45	van Haeringen, teorema de	42
Levinson, teorema de	22	virtual, estado	28
Lippmann-Schwinger, ecuación de	10, 13, 41	Watson, fórmula de	60
ecuación multicanal de	56	Wick, argumento de	63
metaestable, estado	30	WKB, aproximación	34
Møller, operador coulombiano	39	Yukawa, potencial de	15
operador de Møller de canal	54		
Mott, fórmula de	49		
multicanal, colisión	53		
Nordsieck, método de	41		
onda distorsionada, aproximación de	60		
óptico, teorema	14		
Oppenheimer – Brinkman – Kramers, aproximación de	64		
Oppenheimer, argumento de	65		
óptico, teorema	79		
órbitas, ecuación de las	3		
parcial, amplitud de onda	20		
parciales, desarrollo en ondas	19		
post-colisionales de ionización, mecanismos	72		
Ramsauer – Townsend, efecto	23		
regular, función de onda	27		
resonancia	28		
resonancia de energía cero	32		
Rutherford, fórmula de	5, 43		
scattering, longitud de	22		
sección eficaz clásica, definición	2		
sección eficaz cuántica, definición	11		
semiclásica, aproximación	33		
supernumerario, arco iris	37		
Thomas, mecanismo de	65		
pico de	66		



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