Capítulo 13

Dispersión por un centro de fuerza

13.1 Dispersión por un potencial Z/r^2

Como primer ejemplo, consideremos un potencial dipolar de la forma $V(r) = Z/r^2$. Tal como veremos, este potencial (correspondiente a la interacción asintótica entre una partícula cargada y un átomo de hidrógeno) representa un caso "límite" entre dos familias de potenciales con características particulares. En este sentido nos permitirá interpretar distintos efectos: como son el efecto de orbitación y la caída al centro de fuerzas. Reemplazando en la ecuación de las órbitas obtenemos la siguiente relación de dispersión

$$\theta = \pi \left(1 - \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 + \mathrm{sg}(Z) b^2}} \right)$$

donde $\mathrm{sg}(x) = x/|x|$ es la función signo y donde hemos definido la distancia característica $b = \sqrt{|Z| \,/\, \frac{1}{2}\, m\, v_\infty^2}$.

En el caso repulsivo ($Z > 0$) podemos reemplazar en la ecuación para la sección eficaz diferencial obteniendo

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi\, b^2}{4\,\mathrm{sen}\theta} \left(\frac{1}{\theta^2} - \frac{1}{(2\pi - \theta)^2} \right)$$

Hasta ahora no ha habido ninguna sorpresa. Sin embargo, si el potencial es atractivo, es decir si $Z < 0$, el cálculo deja de ser así de simple y debemos ir con muchísimo más cuidado. La relación de dispersión es muy parecida a la del caso repulsivo (sólo un cambio de signo en el radicando). A pesar de esta similitud, inmediatamente advertimos dos diferencias muy importantes. En primer lugar, vemos que sólo está definida para parámetros de impacto ρ mayores que b. Si el parámetro de impacto es menor que b, el proyectil puede superar la barrera centrífuga y alcanzar el centro de fuerza. Decimos que se ha producido su "caída al centro de fuerzas". Podemos definir entonces una sección eficaz de caída al centro de fuerzas $\sigma_C = \pi\, b^2$.

Esta caída al centro de fuerzas ocurrirá siempre que la energía cinética inicial $E = mv_\infty^2/2$ pueda superar cualquier barrera generada por el potencial efectivo $V(r) + E\rho^2/r^2$. Vemos que una condición necesaria para que esto ocurra es que el potencial sea atractivo a cortas distancias y que además tienda a $-\infty$ para $r \to 0$ suficientemente rápido como para compensar la divergencia de la barrera centrífuga. A estos potenciales se los denomina "singulares". Un caso particular de mucho interés está dado por los centros de atracción de la forma $V(r) = -Z/r^n$, con $n > 2$, que estudiaremos más adelante.

La otra característica sobresaliente de la relación de dispersión anterior es que es multivaluada. Cada posible ángulo θ, restringido al intervalo $[0\,,\,\pi]$, puede ser alcanzado por infinitas trayectorias con distintos parámetros de impacto ρ. Invirtiendo la relación $\theta(\rho)$ dada por la ecuación anterior obtenemos la siguiente sucesión de parámetros de impacto que contribuyen a la dispersión en un mismo ángulo θ

$$\rho_{\mathrm{j}}^2 = b^2 + \frac{\pi}{2}\, b^2 \left(\frac{1}{2\pi\mathrm{j} + \theta - 2\pi} - \frac{1}{2\pi\mathrm{j} + \theta} \right)$$

donde el índice $\mathrm{j} = \ldots - 2, -1, 1, 2, \ldots$ recorre todos los números enteros con excepción del cero. Este índice está relacionado con el número de vueltas "completas", $n = |j| - 1$, dadas por el proyectil alrededor del centro de fuerzas. Reemplazando en la la sección eficaz diferencial y sumando todas las contribuciones obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{\mathrm{sen}(\theta)} \sum_{\mathrm{j}\neq 0} \rho_{\mathrm{j}} \left| \frac{d\rho_{\mathrm{j}}}{d\theta} \right| = \\ &= \frac{\pi\, b^2}{4\,\mathrm{sen}(\theta)} \sum_{\mathrm{j}\neq 0} \left| \frac{1}{(2\pi\mathrm{j} + \theta - 2\pi)^2} - \frac{1}{(2\pi\mathrm{j} + \theta)^2} \right| \end{aligned}$$

Vemos que el segundo término de cada sumando se cancela con el primer término del siguiente sumando, excepto cuando $j = -1$ y $j = 1$, resultando

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi\, b^2}{4\,\mathrm{sen}(\theta)} \left(\frac{1}{\theta^2} + \frac{1}{(2\pi - \theta)^2} \right)$$

Sorprendentemente, después de tantas vueltas hemos obtenido una expresión para la sección eficaz diferencial que es muy parecida a la del caso repulsivo. De hecho podemos reunir ambas expresiones en una única ecuación, escribiendo

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi}{2\, m\, v_\infty^2}\, \frac{1}{\mathrm{sen}(\theta)} \left(\frac{|Z|}{\theta^2} - \frac{Z}{(2\pi - \theta)^2} \right)$$

Para ángulos pequeños, $\theta \ll \pi$, el primer término domina sobre el segundo, y ambas secciones eficaces coinciden.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{\pi\, b^2}{4\,\theta^3} \qquad\qquad \text{si} \qquad \theta \ll \pi$$

Para ángulos grandes, en cambio, la sección eficaz correspondiente al caso repulsivo ($Z > 0$) tiende a un valor bien definido

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\theta=\pi} = b^2$$

mientras que, en el caso atractivo ($Z < 0$), diverge

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{b^2}{2\,\pi\,\mathrm{sen}(\theta)} \qquad\qquad \text{si} \qquad \pi - \theta \ll \pi$$

Este comportamiento es característico de un efecto que estudiaremos en el siguiente capítulo, denominado *efecto Gloria*.

13.2 Dispersión por potenciales de la forma $V(r) = Z/r^n$

Ahora describiremos algunas importantes características de la familia de potenciales de la forma $V(r) = Z/r^n$ $(n > 0)$. En primer lugar, vemos que el ángulo de dispersión θ depende del parámetro de impacto ρ, sólo a través de la variable adimensionalizada ρ/b con

$$b \;=\; \left(\frac{Z}{m\,v_\infty^2\,/\,2}\right)^{1/n}$$

En efecto, haciendo el cambio de variables $r \to x = r/b$ en la relación de dispersión, obtenemos

$$\begin{aligned}\theta \;&=\; \pi - 2\int_{r_o}^{\infty} \frac{\rho}{\sqrt{1-(b/r)^n-(\rho/r)^2}}\,\frac{\mathrm{d}r}{r^2} = \\ &=\; \pi - 2\int_{x_o(\rho/b)}^{\infty} \frac{\rho/b}{\sqrt{1-(1/x)^n-(\rho/bx)^2}}\,\frac{\mathrm{d}x}{x^2}\end{aligned}$$

Por lo tanto, la sección eficaz puede escribirse

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \;&=\; \frac{\rho}{\mathrm{sen}(\theta)}\left|\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}theta}\right| = b^2\,\frac{\rho/b}{\mathrm{sen}(\theta)}\left|\frac{\mathrm{d}(\rho/b)}{\mathrm{d}theta}\right| \\ &=\; b^2\,\frac{\mathrm{d}\sigma^*}{\mathrm{d}\Omega}\end{aligned}$$

donde la sección eficaz reducida $\mathrm{d}\sigma^*/\mathrm{d}\Omega$ es independiente de la energía o la constante Z. Tenemos entonces que

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \propto \left(\frac{Z}{mv_\infty^2/2}\right)^{2/n}$$

En el límite $n \to \infty$ recuperamos el resultado ya conocido de que la sección eficaz para la colisión de esferas rígidas es independiente de la energía. Para el potencial coulombiano, $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega \propto Z^2/v_\infty^4$, en total acuerdo con resultados anteriores.

13.3 Caída al centro de fuerzas y orbitación

Consideremos ahora el caso atractivo $V(r) = -Z/r^n$ con $n > 2$. Definimos el potencial efectivo

$$U(r) = \frac{\ell^2}{2mr^2} - \frac{Z}{r^n} = E\left(\frac{\rho^2}{r^2} - \frac{b^n}{r^n}\right)$$

donde la longitud característica b está definida por $b = (Z/E)^{1/n}$. Esta función tiene un máximo en $r_m = (nb^n/2\rho^2)^{1/(n-2)}$ que actúa como una barrera de potencial para aquellas partículas que inciden de manera tal que la energía E es menor que $U(r_m)$. Ello ocurre siempre que el parámetro de impacto es mayor que cierto valor crítico ρ_c. Despejando ρ_c de la ecuación $E = U(r_m)$, obtenemos

$$\rho_c = \sqrt{\frac{n}{2}\left(\frac{2}{n-2}\right)^{(n-2)/n}}\, b$$

Aquellas trayectorias con $\rho > \rho_c$ no caen al centro de fuerzas, alcanzando una distancia de máximo acercamiento r_o necesariamente mayor que la se alcanza en el caso crítico

$$r_c = r_m(\rho_c) = \left(\frac{n-2}{2}\right)^{1/n} b$$

Cuando $\rho < \rho_c$, en cambio, la partícula alcanza el centro de fuerzas, una situación que ya estudiamos al comienzo del curso. Por último, si ρ es próximo a ρ_c, la velocidad radial $\mathrm{d}r/\mathrm{d}t$ es mínima para $r = r_c$ y el proyectil se demora en dicha órbita, girando alrededor del centro de fuerzas, antes de alejarse o caer hacia él en una trayectoria en espiral. Dicho fenómeno se denomina *orbitación*, y puede dar lugar a efectos observables.

Tal como vimos en un capítulo anterior, la interacción de una partícula de carga Z_P con un átomo neutro está dada por este tipo de potencial atractivo con $n = 4$, y $Z = \alpha_B Z_P^2 e^2/2$, siendo α_B la polarizabilidad del átomo blanco. Ya que este tipo de potenciales ocurren en situaciones reales, el problema que se plantea es darle algún sentido a estas órbitas que, para $\rho < \rho_c$, caen hacia el centro de fuerzas. El hecho es que este tipo de interacción atractiva no se mantiene hasta $r = 0$. Así que una posibilidad es suponer la existencia de un centro repulsivo, $V(r) = \infty$ para $r < R$. El proyectil alcanza el centro de fuerzas y rebota especularmente contra él. Otra opción es considerar que el centro de fuerzas es “transparente”. El proyectil alcanza el centro de fuerzas y emerge de él manteniendo la dirección de movimiento original[1]. Finalmente debemos mencionar el “modelo de dispersión aleatoria” que supone que cuando el proyectil cae al centro de fuerzas, es emitido nuevamente pero en una dirección al azar.

Pero la posibilidad más interesante se da al interpretar que la caída al centro de fuerzas supone algún tipo de reacción (captura del proyectil, reacción química, etc.). Este tipo de análisis fue utilizado en el cálculo de la recombinación del sistema ion -molécula[2]. Entonces podemos definir una sección eficaz de caída al centro de fuerzas es

$$\sigma_C = \pi\,\rho_c^2 = \frac{n}{2}\left(\frac{2}{n-2}\right)^{(n-2)/n}\pi\,b^2$$

Supongamos ahora que la reacción se produce cuando la partícula se acerca hasta una distancia R del centro de fuerzas. Cuando la energía es tal que $R < r_c$, la única posibilidad es que se produzca la caída al centro de fuerzas. En dicho caso, la sección eficaz de reacción debe coincidir con σ_C. Cuando $R > r_c$, en cambio, la sección eficaz de reacción es igual a $\pi\rho_R^2$, con ρ_R solución de $E = U(R)$. Escribimos finalmente

$$\begin{aligned}\sigma_R &= \tfrac{n}{2}\left(\tfrac{2}{n-2}\right)^{(n-2)/n}\pi\,b^2 &\qquad \text{para} \qquad & E < \left(\frac{n-2}{2}\right)\frac{Z}{R^n} \qquad (R < r_c)\\ &= \pi\,R^2\left(1+\tfrac{b^n}{R^n}\right) &\qquad \text{para} \qquad & E > \left(\frac{n-2}{2}\right)\frac{Z}{R^n} \qquad (R > r_c)\end{aligned}$$

E. Vogt y G. H. Wannier[3] han mostrado que la descripción cuántica del proceso de colisión por un potencial de polarizabilidad (n=4) es en muchos aspectos similar a la obtenida en un tratamiento clásico. En particular, ellos demuestran que la expresión cuántica para la sección eficaz de “captura” es el doble que la sección eficaz clásica para caída al centro de fuerzas.

En la figura mostramos la sección eficaz “total” para la colisión de electrones contra gases nobles (en diferentes estados de excitación) como función de la variable reducida $\sqrt{\alpha_B/E}$. Vemos que la sección eficaz σ_C se ajusta bastante bien a los datos medidos en un amplísimo rango de energías[4]. Aún la sección eficaz correspondiente al estado fundamental del Helio se acerca al valor teórico σ_C a altas energías. Los efectos de dispersión elástica y resonancias no parecen ser significativos.

[1] T. Kihara, M. H. Taylor and J. O. Hirschfelder: Phys. Fluids, **3**. 715 (1960).
[2] G. Gioumousis and D. P. Stevenson, *J. Chem. Phys.* **29**, 294 (1958).
[3] *Phys. Rev.* **95**, 1190 (1954).
[4] L. G. Christophorou and E. Illenberger, *Phys. Lett. A* **173**, 78-82 (1993).

Digamos por último que, si el potencial $V(r)$ es repulsivo ó -aún siendo atractivo- es no singular, la caída al centro de fuerzas no es posible. En dicha situación la sección eficaz de reacción está definida por todas aquellas trayectorias que, teniendo un parámetro de impacto ρ menor que $\rho_R = R\sqrt{1 - V(R)/E}$, llegarán a una distancia del centro de fuerzas menor que R. De esta manera, la sección eficaz de reacción es[5]

$$\sigma_R = \pi \rho_R^2 = \pi R^2 \left(1 - \frac{V(R)}{E}\right)$$

13.4 Divergencia de la sección eficaz diferencial

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

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

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 "uno a uno", sino que para $\theta < \theta_1$ tiene tres ramas. Por esto, y tal como hicimos al estudiar la dispersión por el potencial $V(r) = -Z/r^2$, debemos generalizar la sección eficaz para incluir todas las contribuciones a un mismo ángulo de dispersión.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{\mathrm{sen}(\theta)} \sum_i \rho_i \left|\frac{d\rho_i}{d\theta}\right|$$

Algo que llama rápidamente la atención es que la sección eficaz puede divergir para ciertos ángulos particulares. Esto ocurre, por ejemplo, para $\theta = \theta_1$, 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 $sen\theta = 0$ para $\theta = \pi$ pero, como el parámetro de impacto también se anula, ello no produce ninguna divergencia en la sección eficaz, salvo que también se anule $d\theta/d\rho$. Cuando $\theta = 0$, en cambio, el parámetro de impacto no se anula y se produce una nueva divergencia de la sección eficaz. Nuevamente, por su similitud con un conocido fenómeno óptico, este efecto se denomina Gloria.

Vemos que ambos efectos ocurren cuando más de un parámetro de impacto contribuye a un dado ángulo de dispersión. Cuánticamente esto produce una

[5] Este modelo fue desarrollado por R. D. Present (*Kinetic Theory of Gases*, pags. 152-153 (McGraw-Hill, New York, 1958)) y aplicado por E. A: Mason y J. T. Vanderslice (*J. Chem Phys.* **95**, 1190 (1954)) a ciertos problemas específicos.

interferencia entre las distintas ramas de $\rho(\theta)$ que se manifiesta como oscilaciones de la sección eficaz con el ángulo de dispersión.