



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SECCIÓN TRANSVERSAL Y UMBRAL DE ENERGÍA DE LA PRODUCCIÓN DE RAYOS X EN COLISIONES ION-ÁTOMO

294353

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
F Í S I C A
P R E S E N T A :
MARISOL ALCÁNTARA ORTIGOZA



DIRECTOR DE TESIS: DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA



FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas

Tesis Digitales

Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©

PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

M. EN C. ELENA DE OTEYZA DE OTEYZA
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: SECCION TRANSVERSAL Y UMBRAL
DE ENERGIA DE LA PRODUCCION DE RAYOS X EN COLISIONES ION-ATOMO.

realizado por MARISOL ALCANTARA ORTIGOZA

con número de cuenta 9031719-2 , pasante de la carrera de FISICA

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

DR. HORACIO MARTINEZ VALENCIA

[Firma]

Propietario

DR. EDUARDO ANDRADE IBARRA

[Firma]

Propietario

DR. JUAN CARLOS LOPEZ VIEYRA

[Firma]

Suplente

DR. FERMIN CASTILLO MEJIA

[Firma]

Suplente

DR. ROBERTO GLEASON VILLAGRAN

[Firma]

Consejo Departamental de FISICA



[Firma]

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FISICA

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE

A mis padres, Miguel Angel Alcántara S. y Ernestina Ortigoza A,
a mis hermanos, Miguel Angel, Miguel Alonso, Mariana, Marina Estefanía y Miguel Sebastián.
y al Mtro. Víctor Manuel Rojas Guzmán.

Quiero expresar, primero, mi eterno agradecimiento hacia mi mamá, quien con su cariño, sus cuidados y gran sabiduría me ha llevado en brazos hasta la fecha de hoy. Al mismo tiempo, quiero agradecer a mi papá, quien ha guiado mi vida, sembrado todas mis aspiraciones e ideales y me ha legado su esencia.

Mi eterno agradecimiento también a mis muy queridos hermanos, las personas más extraordinarias que he tenido la fortuna de conocer. Deseo mencionar especialmente a mi hermano mayor Miguel Angel, por su cariño, por todo lo que nos ha enseñado, porque nos ha cuidado y asistido siempre, por su paciencia, por preocuparse por nosotros y porque más de una vez - literalmente - ha salvado mi vida.

Mi hermano Miguel Alonso y mi singular - y única - Marianita, hermana y maestra; ambos eternos e incondicionales compañeros, no hay palabras para describir todos estos años que tengo que agradecer, pero ustedes y yo sabemos de que hablo...

Quiero también mencionar a mis hermanitos, quienes sin pretenderlo me han dado mucha alegría y muchas enseñanzas.

Agradezco también a mis abuelitas Guadalupe y Ernestina; también, por supuesto, a mi tío Leonardo, a mi tío Antonio y a mi tía Graciela, por tantos años de apoyo y buenos deseos.

Además, muy especialmente, quiero agradecer a mi asesor, Doctor Horacio Martínez Valencia, quien, valga la redundancia, me ha asesorado y ayudado ampliamente en los últimos años. También, de manera muy especial, agradezco al Mtro. Pedro G. Reyes Romero por toda su colaboración, por alentarme tanto, por todos sus consejos y ayuda.

Por otro lado, quiero expresar mi agradecimiento al Dr. Fermín Castillo, al Dr. Juan Carlos López Vieyra, al Dr. Roberto Gleason, al Dr. Eduardo Andrade y especialmente al Dr. Alejandro Amaya, por sus comentarios tan valiosos y por su apoyo.

También agradezco, por esos sutiles detalles que me han marcado profundamente, a la Mtra. Constans Arnaudova Karadjova Todorova y a la Mtra. Gunta Salaks.

Agradezco además a los proyectos DGAPA IN-109203 y CONACYT 32175-E

Finalmente, quiero expresar mi más profundo agradecimiento al Mtro. Víctor Manuel Rojas Guzmán, sin el cual este trabajo, quizás, jamás hubiera sido posible. Gracias por todos los desvelos, por la tolerancia y por devolverme la sonrisa.

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN E IMPORTANCIA DEL TRABAJO. 4

I. COLISIONES CON Y SIN DEFLEXIÓN COULOMBIANA. UMBRAL DE ENERGÍA DE IONIZACIÓN. ENERGÍA MÁXIMA DEL ELECTRÓN EMITIDO. 7

II. TRATAMIENTO DEL PROBLEMA CON Y SIN DEFLEXIÓN COULOMBIANA.

a) σ COMO FUNCIÓN DE LA AMPLITUD DE DISPERSIÓN. 26

b) σ COMO FUNCIÓN DEL PARÁMETRO DE IMPACTO Y DE LA PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN ENTRE DOS ESTADOS. 31

III. SECCIÓN TRANSVERSAL PARA COLISIONES SIN DEFLEXIÓN COULOMBIANA A PARTIR DE LA AMPLITUD DE DISPERSIÓN Y USANDO LA APROXIMACIÓN DE BORN

a) EC. DE LIPPMAN-SCHWINGER PARA LA FUNCIÓN DE ONDA TOTAL DEL SISTEMA CONSIDERANDO UN POTENCIAL COULOMBIANO BLINDADO. 38

b) FUNCIÓN DE ONDA EN LA REGIÓN ASINTÓTICA. ITERACIÓN DE LA ECUACIÓN DE LIPPMAN-SCHWINGER. APROXIMACIÓN DE BORN. 50

c) SECCIÓN TRANSVERSAL TOTAL DE IONIZACIÓN DE CAPA K CON APROXIMACIÓN DE BORN. 54

IV. LA SECCIÓN TRANSVERSAL PARA TRAYECTORIAS HIPERBÓLICAS DEL PROYECTIL.

a) APROXIMACIONES USADAS EN LA IONIZACIÓN DE LA CAPA K POR PARTÍCULAS PESADAS. 73

b) TRATAMIENTO PERTURBATIVO DEPENDIENTE DEL TIEMPO Y A PRIMER ORDEN DE LA IONIZACIÓN DE LA CAPA K PARA EL CÁLCULO DE LA SECCIÓN TRANSVERSAL PARA TRAYECTORIAS HIPERBÓLICAS

- 1)PROCEDIMIENTO GENERAL. 76
- 2)SECCIÓN TRANSVERSAL TOTAL Y SU RELACIÓN CON
AQUÉLLA CALCULADA CON LA APROXIMACIÓN DE
BORN. 91

V. APLICACIÓN DE LOS MODELOS. 95

VI. RESULTADOS Y DISCUSIÓN. 111

CONCLUSIONES. 116

APÉNDICE A. FRAGMENTOS DE LA TEORÍA DEL MOMENTO
ANGULAR.

- a)Momento angular orbital. 117
- b)Eigenvalores y eigenfunciones del momento angular orbital. 117
- c)Reducción del hamiltoniano para fuerzas centrales. 121

APÉNDICE B. POTENCIALES CENTRALES.

- a)Reducción del problema de dos cuerpos. 123
- b)El átomo hidrogenoide. 127

APÉNDICE C. CRITERIO DE APLICABILIDAD DE LA APROXIMACIÓN
DE BORN. 133

REFERENCIAS. 134

INTRODUCCIÓN E IMPORTANCIA DEL TRABAJO

La ionización, captura electrónica y excitación se encuentran entre los procesos más importantes en colisiones ion-átomo o átomo-átomo [1,3]. Estos estudios han hecho una contribución importante al conocimiento de sistemas de colisión atómicos y a la evolución de la mecánica cuántica [4].

Sin embargo, aunque han habido considerables progresos en esta área de la física, la teoría de ionización se encuentra aún incompleta.

La principal característica de la ionización de partículas es que hay al menos tres partículas no ligadas en el canal de salida. Así pues, desde el punto de vista teórico, la dificultad principal es la representación de los estados electrónicos finales, cuando el electrón emitido viaja en presencia de potenciales coulombianos (proyectil y blanco). Debido a la naturaleza de largo alcance del potencial coulombiano, el estado de *partícula libre* no puede ser representado por una onda plana. Por ello, una solución exacta del problema no ha sido obtenida. No obstante, las funciones asintóticas se pueden obtener exactamente [5,6].

Es así, pues, que el principal propósito de este trabajo es estudiar, desglosar y entender dos modelos teóricos de ionización, el primero de los cuales utiliza la primera aproximación de Born y desprecia la deflexión coulombiana, mientras que el otro utiliza un tratamiento perturbativo a primer orden, dependiente del tiempo en el cual se toma en cuenta la deflexión coulombiana.

Cabe señalar que el avance en la profundización del conocimiento de la naturaleza del sistema ion-átomo no es la única razón que genera interés en este problema, sino que los datos sobre ionización por impacto de partículas cargadas son usados para aplicaciones en materiales e investigaciones científicas fundamentales, entre otras (estudio de la física atmosférica [11], la astrofísica [12, 13] y la física de plasmas [14]).

Dentro del vasto campo de investigación de colisiones atómicas y moleculares, el presente trabajo propone el estudio del proceso de ionización utilizando proyectiles ligeros. En donde los objetivos de este trabajo son:

- 1) Determinar la relación funcional de la sección transversal de producción de rayos X en función de la energía de colisión, mediante los siguientes métodos:

- a) Utilizando la primera aproximación de Born y considerando trayectorias rectas para los proyectiles, esto es, despreciando la repulsión coulombiana.
 - b) Considerando la repulsión coulombiana, la cual establece trayectorias hiperbólicas junto con un tratamiento perturbativo a primer orden dependiente del tiempo.
- 2) Comparar los resultados obtenidos de la aplicación de los modelos anteriores con resultados experimentales registrados en la literatura.

El tema de ionización en colisiones atómicas ha sido extensamente estudiado, tanto en forma experimental como a través de modelos y aproximaciones teóricas [7]. Sin embargo, tanto el descubrimiento de nuevos efectos [8], como el análisis de estados finales de varios cuerpos [9], así como las nuevas técnicas experimentales asociadas con la detección del blanco residual y/o el proyectil [10], no sólo son muestra de que todavía no se ha alcanzado una comprensión completa y precisa de los procesos de ionización, sino que se ha producido un renovado interés en su estudio.

Por ejemplo, los primeros trabajos realizados en el programa de energía termonuclear controlada tuvieron como objetivo el determinar secciones transversales precisas que pudieran describir la interacción de sistemas atómicos, ya que una de las aplicaciones principales del buen entendimiento del proceso de ionización está encaminado a resolver el problema del calentamiento de un plasma para la obtención de energía por fusión nuclear, donde esto se lograría mediante la inyección de haces de partículas cargadas a energías de decenas KeV.

Por otro lado, se han desarrollado considerables cálculos teóricos haciendo uso de la mecánica cuántica para intentar describir la interacción entre los sistemas atómicos, pero a medida que estos son más complejos, su aplicación es más limitada.

Conforme las computadoras llegaron a ser de mayor rapidez y capacidad, los cálculos teóricos llegaron a ser más aproximados. Los experimentos realizados en numerosas disciplinas pueden también proveer comparaciones cuantitativas con predicciones teóricas.

Existe, por lo tanto, un propósito mutuo para realizar medidas precisas de procesos atómicos. Entonces, las secciones transversales, además de poseer una importancia práctica, permiten obtener, a través de la comparación de sus resultados con la teoría, un entendimiento más completo de sistemas atómicos.

En las pasadas décadas diversos grupos han realizado mediciones y cálculos de secciones transversales originadas por interacciones atómicas para un gran número de sistemas sobre un intervalo de energía del orden de algunos eV hasta varios miles de eV.

En la década de los cincuentas y los sesentas, período importante de la física atómica de colisiones, se hicieron numerosos trabajos experimentales respecto a la ionización de la capa K y la consecuente emisión de rayos X. La mayoría de éstos hace una comparación de sus resultados con expresiones de una sección transversal teórica obtenida utilizando trayectorias rectas para el proyectil en la primera aproximación de Born. En 1959 aparece un artículo que asocia, en ciertos casos, las discrepancias que existen entre el experimento y la teoría (aquella que utiliza la primera aproximación de Born) a que en esta última no se toma en cuenta la interacción coulombiana entre el blanco y el proyectil. Sin embargo, en ningún trabajo se encuentra de forma detallada cómo se llega de modelos conceptualmente sencillos a una expresión ya tan utilizada para comparaciones experimentales. Así pues, este trabajo, al mismo tiempo que documenta paso a paso cómo estos modelos cristalizan en expresiones relativamente sencillas, también busca un mejor entendimiento de dichos modelos; más aún, compara las expresiones obtenidas con resultados experimentales reportados en la literatura para verificar tanto cada uno de los modelos como los intervalos para los que se predice su validez.

Finalmente, cabe señalar que el hecho de que los fenómenos colisionales puedan ser explicados con modelos sencillos tiende a enfatizar la importancia de éstos.

I. COLISIONES CON Y SIN DEFLEXIÓN COULOMBIANA. UMBRAL DE ENERGÍA DE IONIZACIÓN. ENERGÍA MÁXIMA DEL ELECTRÓN EMITIDO.

El problema al que se refiere este trabajo consiste en determinar la sección transversal de producción de rayos X por la ionización de un átomo blanco, proceso que sufre éste al colisionar con una partícula cargada y pesada.

La primera teoría de excitación de átomos por partículas cargadas, pesadas, lentas, fue desarrollada por MOTT [15], BETHE [16] Y HENNEBERG [17]. Este último autor realizó un extenso trabajo en el cálculo de la sección transversal de la ionización de la capa K, para lo cual utilizó la primera aproximación de Born, es decir, ondas planas para las partículas entrantes y funciones de onda coulombianas para los electrones con respecto a su núcleo, y tratando la interacción entre el proyectil y el electrón a primer orden. Sin embargo, resultó que las secciones transversales experimentales discrepaban de manera importante de los valores que arrojaba la teoría.

HENNEBERG había usado funciones de onda coulombianas no relativísticas para representar a los electrones y, como era ya bastante claro que la teoría no estaba coincidiendo con muchos experimentos, con los que se esperaba que así fuera, JAMNIK Y ZUPANCIC [18] repitieron los cálculos con funciones de onda relativísticas para el electrón. Contrario al decrecimiento esperado en la sección transversal, resultó que el incremento relativístico de la densidad electrónica cerca del origen ocasiona un crecimiento de la sección transversal para blancos de elementos pesados ($Z_2 \gtrsim 40$). Mientras que para elementos que se encuentran por la mitad de la tabla periódica, la corrección relativística fue pequeña.

BANG Y HANSTEEN [19] consideraron que las desviaciones de los resultados podrían deberse, en parte, al hecho de que la teoría de HENNEBERG no toma en cuenta la repulsión coulombiana entre el proyectil y el núcleo blanco. Así pues, se tiene que la repulsión evita que partículas de baja energía se acerquen al núcleo, lo cual podría explicar por qué experimentalmente se obtiene una sección transversal más pequeña que la predicha por HENNEBERG.

Como más adelante se verá, resulta que el parámetro decisivo en la validez del uso de la primera aproximación de Born en este problema es $\xi = a_{\min}$, donde "a" es la mitad de la distancia de máximo acercamiento entre el núcleo-blanco y el proyectil

en una colisión frontal (también se puede ver como la distancia entre el centro de las ramas de una hipérbola y el vértice a cualquiera de ellas; más adelante se verá esto como el segmento $OA = OA' = a$), mientras que $q_{\min}$ está relacionada con el mínimo momento que el proyectil transfiere. Así pues, para valores $\xi \approx 1$ o mayor que 1, la sección transversal es mucho más pequeña que la que se predice con la primera aproximación de Born y sólo en el límite en el que $\xi \ll 1$ la repulsión coulombiana puede ser despreciada y la primera aproximación de Born usada. Por ello es que en este capítulo se va a entender el significado de ξ y lo que físicamente significan los valores que puede tomar.

La ecuación fundamental de la dinámica en coordenadas polares (considerando masas invariantes), $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ en las proyecciones sobre los vectores unitarios $\mathbf{e}_\varphi$ y $\mathbf{e}_\rho$ son:

$$(1.1a) \quad F_\rho = m(\ddot{\rho} - \rho\dot{\varphi}^2)$$

$$(1.1b) \quad F_\varphi = m\rho \frac{d}{dt}(\dot{\varphi})$$

donde F_ρ y F_φ son las proyecciones del vector $\mathbf{F}$ sobre los vectores $\mathbf{e}_\varphi$ y $\mathbf{e}_\rho$, m es la masa de la partícula sometida a la fuerza $\mathbf{F} = \mathbf{F}_\rho + \mathbf{F}_\varphi$, ρ es la norma del vector que va del centro de fuerzas a dicha partícula.

En un campo central de fuerzas, como el que se tiene en el actual problema, la energía potencial de una partícula sometida a un campo, en el presente caso, el del átomo-blanco, tiene una energía potencial $U = -\beta/\rho$, donde β es una constante; la fuerza, en consecuencia, tiene una magnitud dada por $F = -\beta/\rho^2$ ($\beta = \pm Z_1 Z_2 e^2$ en un campo coulombiano, donde Z_1 y Z_2 son los números atómicos o las magnitudes de las cargas - sin signo - de la partícula incidente y del átomo-blanco, respectivamente.) y, otra vez, ρ es la distancia desde el centro del campo hasta la partícula. Cuando $\beta > 0$ la fuerza que actúa sobre la partícula de masa m está dirigida hacia el centro del campo (atracción). Para encontrar la trayectoria de la partícula, suponiendo que $\rho(\varphi = 0) = \rho_0$, $\dot{\rho}(\varphi = 0) = 0$ y $\dot{\varphi}(\varphi = 0) = v_0$, generalmente se emplean las leyes de conservación de energía y de momento angular. En las coordenadas polares ρ, φ de estas leyes se deduce:

$$(1.2a) \quad \frac{m}{2}(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\varphi}^2) - \frac{\beta}{\rho} = E$$

$$(1.2b) \quad m\rho^2\dot{\varphi} = L$$

donde E y L son la energía mecánica total y el momento angular de la partícula, respectivamente, con respecto al centro de fuerza. Estas dos magnitudes también se pueden encontrar fácilmente de las condiciones iniciales ($\varphi = 0$), $E = mv_0^2/2 - \beta/\rho_0$ y $L = m\rho_0 v_0$

Para hallar la trayectoria de la partícula sometida al campo en función del ángulo, esto es $\rho(\varphi)$, se hace lo siguiente: Al principio, en la ecuación (1.2a), se pasa de la diferenciación conforme al tiempo a la diferenciación conforme a φ , esto se puede hacer con ayuda de la ecuación (1.2b): $dt = (m\rho^2/L)d\varphi$. Después, se separan las variables ρ , φ , es decir, se reduce la expresión obtenida al tipo $d\varphi = f(\rho)d\rho$. Finalmente, se integra esta ecuación teniendo en cuenta las condiciones iniciales. El resultado de la integración da $\rho(\varphi)$.

La solución obtenida es [20]:

$$(1.3) \quad \rho(\varphi) = \frac{\rho_0}{c + (1-c)\cos\varphi}$$

donde

$$(1.3a) \quad c = \frac{\beta}{m\rho_0 v_0^2}$$

De la geometría se sabe que la ecuación (1.3) determina una curva de segundo orden. En dependencia del parámetro c, ésta puede ser una elipse (circunferencia), una parábola o una hipérbola. Cuando $c = 1$ se tiene una circunferencia, cuando $1 > c > 1/2$ se tiene una elipse, cuando $c = 1/2$ se tiene una parábola, finalmente, cuando $c < 1/2$ se obtienen hipérbolas. Dado que uno está más familiarizado con el concepto de excentricidad ε de la curva, se da a continuación la relación entre c y ε : $c = 1/(\varepsilon + 1)$, $\varepsilon = (1 - c)/c$. Así pues, cuando $\varepsilon > 1$ se obtienen hipérbolas que corresponderían a la trayectoria de una partícula que se encuentra en un campo atractivo, pero que no llega a ser ligada. La ecuación de esta hipérbola sería:

$$(1.4) \quad \rho(\varphi) = \frac{\rho_0(1+\varepsilon)}{1 + \varepsilon \cos\varphi}$$

con $\varepsilon > 1$, definiendo β para un campo coulombiano atractivo ($\beta = Z_1 Z_2 e^2$) se tiene, según la definición de ε en términos de c, que:

Ahora bien, la definición de excentricidad es justamente

$$\varepsilon = OF/OA \text{ y } OF = \varepsilon a \text{ donde } \varepsilon > 1$$

Por lo tanto, $p_0 = OF' - OA = a(\varepsilon - 1)$, de igual manera, de la figura I.1 se puede ver que r_0 se puede expresar de la siguiente manera: $r_0 = OF' + OA = a(\varepsilon + 1)$.

Así pues, la ecuación (I.4) queda de la siguiente manera:

$$(I.7) \quad \rho(\varphi) = \frac{a(\varepsilon^2 - 1)}{\varepsilon \cos \varphi + 1} \quad \varphi \left(-\cos^{-1}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right), \cos^{-1}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right) \right)$$

Hasta ahora, se ha estado trabajando con la curva que se describe si se está trabajando con un potencial atractivo, es decir, con la rama que se llega a acercar más al foco F' donde se ha puesto el centro atrayente. Sin embargo, la curva que interesa es justamente la otra rama, la que se describe si ese centro fuera repulsivo (ver figura I.1). Pero, resulta que una vez teniendo descrita la rama 1 para los ángulos que indica la ecuación (I.7), la rama 2 queda descrita de la siguiente manera [21]:

$$(I.8) \quad r(\varphi) = \frac{a(\varepsilon^2 - 1)}{\varepsilon \cos \varphi - 1} \quad \varphi \left(-\cos^{-1}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right), \cos^{-1}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) \right)$$

Ahora que ya se tiene la curva que describe un proyectil cargado positivamente en un campo repulsivo (que por cierto tiene el mismo parámetro de impacto que la partícula en el campo atractivo, ver figura I.1), hay que notar que β ahora tiene signo negativo, llámese $\beta' = -\beta$, $\beta' < 0$. Además, la excentricidad ε , aunque es la misma para ambas ramas, se tiene en términos de p_0 y la velocidad v_0 de la partícula en el vértice de la rama 1. Considerando la misma energía inicial para ambos casos (rama 1 y 2 en campo atractivo y repulsivo, respectivamente), se tiene que:

$$(I.9) \quad \frac{1}{2} m v_0^2 - \frac{\beta}{\rho_0} = \frac{1}{2} m v_0'^2 - \frac{\beta'}{r_0} \Rightarrow \frac{1}{2} m v_0^2 - \frac{\beta}{\rho_0} = \frac{1}{2} m v_0'^2 + \frac{\beta}{r_0}$$

donde v_0' es la velocidad de la partícula en el campo repulsivo en $\varphi = 0$. Por lo tanto,

$$(I.10) \quad 2\beta - m\rho_0 v_0'^2 = \left(\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\right)(m v_0'^2 r_0 + 2\beta)$$

Por otro lado, la ecuación (I.8) se puede transformar de la siguiente manera (esto se hace para ponerla en la forma de (I.3))

$$(I.11) \quad r = \frac{r_0(\varepsilon-1)}{\varepsilon \cos \varphi - 1} = \frac{r_0}{\frac{\varepsilon}{\varepsilon-1} \cos \varphi - \frac{1}{\varepsilon-1}}$$

Definiendo una c' como:

$$(I.12) \quad c' = -\frac{1}{\varepsilon-1}$$

se obtiene:

$$(I.13) \quad r(\varphi) = \frac{r_0}{(1-c') \cos \varphi - c'}$$

Como la excentricidad es la misma para ambas ramas, de se despeja ε en función de c (Pág. 9) y también en función de c' (ec (I.12)), y luego se igualan las expresiones, resultando que la relación entre c y c' es :

$$(I.14) \quad c' = \frac{c}{2c-1}$$

Sustituyendo la ecuación (I.3a) en (I.14) e igualando a (I.12), se obtiene:

$$(I.15) \quad c' = \frac{\beta}{2\beta - m\rho_0 v_0'^2} = \frac{1}{1-\varepsilon}$$

Sustituyendo (I.10) en (I.15) se obtiene:

$$(I.16) \quad \xi = \frac{m V_0^2 r_0}{\beta} + 1$$

Véase ahora qué aspecto tendría la trayectoria del proyectil, en coordenadas polares y vista desde el núcleo-blanco, si en efecto, como supone el modelo que desarrolló HENNEBERG, la repulsión coulombiana fuera despreciable. En este caso, en lugar de describirse una hipérbola se tendría prácticamente un par de rectas, donde $\theta \rightarrow \pi$ (ver Fig. I.2) (pues, utilizar la primera aproximación de Born, como se verá, supone que el proyectil es dispersado muy levemente), que a una distancia muy grande del centro dispersor (infinita) coinciden con esta hipérbola, así pues, dichas rectas son justamente las asíntotas l_1 y l_2 (ver la línea oscura) de la figura I.2. La ecuación de l_2 , por ejemplo (nótese que para l_1 el análisis es semejante dada la simetría), en coordenadas polares con polo en el núcleo-blanco (foco F') tiene la forma siguiente:

$$(I.17) \quad R(\varphi) = \frac{a \varepsilon \sqrt{\varepsilon^2 - 1}}{\sin \varphi + \sqrt{\varepsilon^2 - 1} \cos \varphi}, \quad \varphi: (\tan^{-1}(-\sqrt{\varepsilon^2 - 1}), 0) = (-\cos^{-1}(\frac{1}{\varepsilon}), 0)$$

Nótese que cuando $\varepsilon \gg 1$, la ecuación (I.8) puede escribirse como:

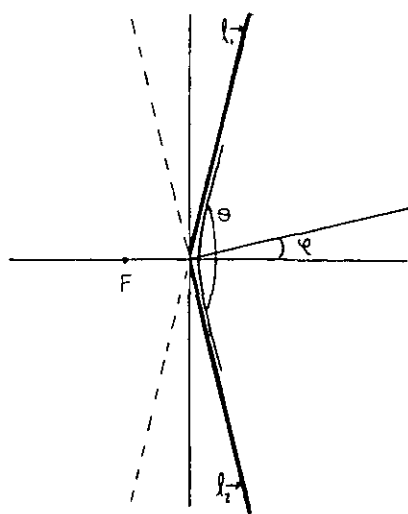
$$(I.18a) \quad r(\varphi) = \frac{a \varepsilon^2}{\varepsilon \cos \varphi - 1}$$

Mientras que la ecuación (I.17) puede escribirse como:

$$(I.18b) \quad R(\varphi) = \frac{a \varepsilon^2}{\varepsilon \cos \varphi + \sin \varphi}$$

Y sólo para ángulos próximos a $\varphi = 0$ la hipérbola y l_2 comienzan a separarse, además de que se obtiene que $\theta \rightarrow \pi$, como se puede ver de la figura I.2.

Figura 1.2.



Para evaluar de manera más precisa la condición $\varepsilon \gg 1$, considérese el cociente entre $R(\varphi)$ (ec. 1.17) y $r(\varphi)$ (ec. 1.8):

$$(1.19a) \quad \frac{R(\varphi)}{r(\varphi)} = \frac{\varepsilon(\varepsilon \cos \varphi - 1)}{\sqrt{\varepsilon^2 - 1} \sin \varphi + (\varepsilon^2 - 1) \cos \varphi}$$

Para que la primera aproximación de Born funcione, se necesitaría que este cociente fuera ~ 1 para todo ángulo φ (aquí $\varphi \in \{\tan^{-1}(-[\varepsilon^2 - 1]^{1/2}), 0\}$, la otra parte de la hipérbola se supone que se aproxima a l_1). Sin embargo, este cociente siempre es menor que 1, y sólo tiende a 1 cuando $r \rightarrow \infty$, mientras que su valor mínimo es justo en el vértice de la hipérbola, cuando $\varphi = 0$. La idea es, entonces, ver bajo qué condiciones, para ángulos pequeños, este cociente se aproxima a 1. Resulta que, independientemente del ángulo, si $\varepsilon \gg 1$, es posible aproximar el cociente como:

$$(1.19b) \quad \frac{R(\varphi)}{r(\varphi)} = \frac{\varepsilon \gg 1}{\varepsilon \gg 1} \rightarrow \frac{\varepsilon \cos \varphi - 1}{\varepsilon \cos \varphi + \sin \varphi}$$

De (1.19b) se ve que aún cuando el ángulo sea pequeño (se tendría $\cos \varphi \approx 1$ y $\sin \varphi$ sería un número negativo pequeño), si la excentricidad fuera lo suficientemente

grande, el cociente sería casi 1. De hecho, de la ecuación (I.19a), resulta que en $\varphi = 0$ se tiene que

$$(I.19c) \quad \frac{R(0)}{r(0)} = \frac{\varepsilon^2 - \varepsilon}{\varepsilon^2 - 1} = \frac{1 - \frac{1}{\varepsilon}}{1 - \frac{1}{\varepsilon^2}}$$

de donde se ve que cuando $\varepsilon \rightarrow \infty$, la trayectoria del proyectil tiende a ser una sola línea recta.

Para darse una idea, véase que de la ec.(I.19a), para un ángulo de 10° , el cociente $R(10^\circ)/r(10^\circ) \approx 0.96$, para $\varepsilon = 20$; mientras que $R(10^\circ)/r(10^\circ) \approx 0.73$ para $\varepsilon = 2$.

Así pues, se puede decir que cuando la excentricidad es muy grande, $\varepsilon \gg 1$, el modelo que supone trayectorias rectas puede funcionar. A continuación, se verá físicamente qué significa esto:

De la ecuación (I.16) se tiene que si se pide que $\varepsilon \gg 1$ ($\theta \approx \pi$), se necesita que la energía cinética del proyectil en el punto de máximo acercamiento sea mucho mayor que la energía de repulsión U_0 entre el núcleo-blanco y el proyectil en dicho punto:

$$(I.20) \quad \varepsilon = \frac{mr_0 v_0'^2}{Z_1 Z_2 e^2} + 1 \gg 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{mr_0 v_0'^2}{Z_1 Z_2 e^2} \gg 1 \quad \Rightarrow$$

$$mv_0'^2 \gg \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_0} \quad \Rightarrow \quad U_{rep}(r_0) \ll E_{cin}^{proy}(r_0)$$

Es decir, el proyectil debe tener suficiente energía cinética en el punto de máximo acercamiento para no verse perturbado por la repulsión del núcleo-blanco.

Se verá a continuación qué otras implicaciones o qué otros significados tiene pedir $\varepsilon \gg 1$. De la ecuación (I.16) y (I.9) se obtiene:

$$(\varepsilon - 1) \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2r_0} = \frac{mv_0'^2}{2} \quad \Rightarrow \quad \varepsilon \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2r_0} \right) = \frac{mv_0'^2}{2} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2r_0}$$

$$(1.21) \quad \varepsilon \frac{U(r_0)}{2} = E_{tot} - \frac{U(r_0)}{2} \Rightarrow (\varepsilon + 1) \frac{U(r_0)}{2} = E_{tot} (= E_i)$$

Luego, de la ecuación (1.8) para $\varphi = 0$ y de (1.21) se obtiene (recordando que $\beta = Z_1 Z_2 e^2$):

$$(1.22) \quad \varepsilon + 1 = \frac{2 E_i \alpha (\varepsilon + 1)}{\beta}$$

Como más adelante se ve, la distancia $OA = a$, se puede expresar en términos de la excentricidad ε de la hipérbola y el parámetro de impacto p del proyectil de la siguiente manera:

$$(1.23) \quad \alpha = p (\varepsilon^2 - 1)^{-1/2}$$

Introduciendo (1.23) en (1.22) se obtiene que:

$$(1.24) \quad \varepsilon + 1 = \frac{2 E_i (\varepsilon + 1) p}{\beta (\varepsilon^2 - 1)^{1/2}}$$

Lo cual, haciendo un simple despeje da:

$$(1.25) \quad \varepsilon = \left(1 + \frac{4 E_i^2 p^2}{\beta^2} \right)^{1/2}$$

También, de la ecuación de (1.22) se puede encontrar que:

$$(1.26) \quad \alpha = \frac{\beta}{2 E_i} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2 E_i}$$

Y, por lo tanto,

$$(1.27) \quad \varepsilon = \left(1 + \frac{p^2}{a^2} \right)^{1/2}$$

Nótese que las ecuaciones (I.25) y (I.26) definen exactamente la trayectoria del proyectil, dada la energía inicial E_i de la partícula, el parámetro de impacto p y la magnitud de las cargas, tanto del proyectil como del núcleo-blanco, Z_1 y Z_2 , respectivamente.

Además, analizando la ecuación (I.25) se puede ver que tener altas energías de colisión (es decir, la energía inicial con la que es lanzado el proyectil) y/o parámetros de impacto grandes, y/o números atómicos de las partículas colisionantes pequeños, da justamente la condición $\epsilon \gg 1$. Lo cual concuerda con la propuesta de BANG Y HANSTEEN, es decir, concuerda con el hecho de que sólo bajo estas condiciones la interacción coulombiana sería despreciable, ya que ésta depende justamente de la distancia entre las partículas que interaccionan y de sus cargas; mientras que, qué tanto se vea afectado el proyectil depende de cuánto tiempo "disponga" el núcleo-blanco para afectar su momento lineal o qué tan masivo es el proyectil para que la fuerza de repulsión sea capaz de cambiar su momento, así que, en otras palabras, las ecuaciones (I.25) y (I.26) dicen, en proporciones exactas, si el proyectil es lo suficientemente masivo o veloz (lo que equivale a decir que tenga la suficiente energía), y/o su línea de colisión está lo suficientemente lejos del núcleo (medido como la distancia recta, es decir, el parámetro de impacto), y/o el producto de las cargas es pequeño, dicho proyectil no será considerablemente perturbado.

Antes de analizar qué tiene que ver esto con el factor $\xi = aq_{\min.}$, que al inicio del capítulo se menciona, a continuación se modela, de manera sencilla, cómo es que se da la ionización.

Fueron CHADWICK[22] y SLATER[23] quienes primeramente observaron e identificaron los rayos X característicos de varios elementos expuestos a partículas- α de fuentes radioactivas. Más tarde, GERTHSEN[24] se dio cuenta que estas observaciones estaban claramente en desacuerdo con un simple modelo, el cual representaba el proceso de ionización como una colisión elástica de la partícula incidente con un electrón, el cual se considera esencialmente libre, excepto que su ligadura al átomo limita la transferencia mínima de energía que se debe proporcionar al valor de la energía de ionización de la capa atómica que se desee ionizar. Tal modelo es muy útil en una descripción cuantitativa de aquellas colisiones que son principalmente responsables por la pérdida de energía de los proyectiles a su paso por la materia [25]. Para el presente propósito, este modelo no sirve ni aún como primera aproximación, pues, resulta que la máxima energía que

una partícula pesada de masa m_p y velocidad v_i puede transferir a un electrón libre de masa m_e y velocidad u está dada por [26]:

$$(1.28) \quad \frac{2 m_p m_e}{(m_p + m_e)^2} (m_p v_i - m_e u)(v_i - u)$$

En particular, el límite superior para la transferencia de energía a un electrón en reposo es aproximadamente $2m_e v_i^2$, y por lo tanto, mientras más masivo sea el proyectil más energía se necesitaría para la ionización, para una misma energía de incidencia. Realmente, no obstante, el proceso ocurre para energías que caen por debajo de este límite, además, según MERZBACHER (1958) no hay un umbral evidente.

Dijo MERZBACHER: "GERTHSEN notó que si la colisión podía ser considerada casi libre, las altas velocidades de los electrones de la capa más interna (K) reduciría el mínimo de la energía requerida para producir rayos X característicos (aproximadamente por un factor de cuatro). Así pues, de una manera más o menos indirecta él reconoció la importancia de la energía atómica de ligadura, la cual efectivamente incrementa la masa del electrón y permite mayores transferencias de energía"

A continuación se ve el proceso de una manera que permite determinar cuál es la energía mínima para la ionización y, por otro lado, permite rescatar en un cierto límite la ecuación (1.28) (cuando la velocidad del proyectil es del mismo orden de magnitud que la velocidad del electrón de la capa K):

Fijese primero en una colisión frontal, (esto es, cuando $p = 0$ o bien, $\varepsilon = 1$) que es cuando el proyectil puede acercarse más al núcleo. De la ecuación (1.26) se obtiene la distancia de máximo acercamiento en colisión frontal es (recuérdese que a es la mitad de dicha cantidad):

$$(1.29) \quad r_o(p=0) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_i} = \frac{2 Z_1 E_K |a_K|}{E_i}$$

donde $|a_K|$ es el radio de la capa K, E_K es la energía de ligadura de un electrón en esta capa y ambas cantidades están relacionadas por la expresión: $E_K = (Z_2 e^2)/2|a_K|$.

Supóngase que el proyectil se acerca lo suficiente a la capa K (a una distancia de $|b_K|$) de tal manera que iguale el potencial de atracción del núcleo blanco, esto es:

$$(1.30) \frac{Z_2 e^2}{|a_K|} = \frac{Z_1 e^2}{|b_K|} \Rightarrow |b_K| = \frac{Z_1}{Z_2} |a_K|$$

Por lo tanto, si se necesita que el electrón esté igualmente atraído por el proyectil que por el núcleo, la distancia máxima (umbral) a la que necesita acercarse el proyectil es:

$$(1.31) r_o^{umb}(p=0) = |a_K| + \frac{Z_1}{Z_2} |a_K| = \left(\frac{Z_1 + Z_2}{Z_2} \right) |a_K|$$

De la misma manera, la energía mínima (umbral) que debe tener inicialmente el proyectil, para igualar la atracción sobre el electrón a la del núcleo, debe ser, por (1.29) y (1.31):

$$(1.32) E_i^{umb} = \frac{2Z_1 E_K |a_K|}{|a_K|} \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} = 2 \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} E_K$$

Esto significa que basta con que la energía inicial del proyectil sea “ligeramente” mayor que la energía umbral, para que el átomo pierda dicho electrón. De hecho, en su trabajo, BANG Y HANSTEEN[19] simplemente dicen que para que se dé la ionización es necesario que la mitad de la distancia de máximo acercamiento en colisión frontal, “a”, sea menor que el radio de la capa K, lo cual, ciertamente, limita la mínima energía que debe tener el proyectil. Sin embargo, con esta condición sería posible que la distancia de máximo acercamiento en colisión frontal, “2a”, fuera apenas menor que dos radios de la capa K. Además, dado que la mínima energía cedida al electrón es justamente E_K , arguyen que otra razón para que no se dé la ionización es que si $|a_K| < a$, esto implica que $E_i/Z_1 < E_K$, por lo tanto, sería imposible la ionización bajo estas condiciones. (ecs.(2.5) y (2.6) ref.[19]).

Ahora bien, supóngase que $E_i > E_{umb}$, entonces, cuando el proyectil está a una distancia r_{umb} del núcleo blanco y/o a una distancia $|b_K| = (Z_1/Z_2)|a_K|$ del electrón, todavía tendrá energía cinética que cederle al electrón y he aquí que ya se podría considerar que el electrón se encuentra en reposo, pues ya no está ligado al núcleo

y, por ello (ver ec.(I.28) para $u = 0$), el proyectil ahora sí sería capaz de cederle una energía cinética igual a

$$(I.33) \quad T_{máx} = 2 m_e [v(r_{umb})]^2$$

donde $v(r_{umb})$ es la velocidad del proyectil, en el punto donde la fuerza sobre el electrón es cero, la cual está dada por la ecuación (I.2) y por el hecho de que se trata de una colisión frontal, es decir, $v_r = dr/dt = 0$.

$$(I.34) \quad E_i = \frac{m_p}{2} v^2 - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

Por lo tanto, en el punto en el que el proyectil contrarresta la atracción del núcleo se tiene que:

$$(I.35) \quad E_i = \frac{m_p}{2} [v(r_{umb})]^2 + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_{umb}}$$

Despejando $(v(r_{umb}))^2$ y sustituyendo en (I.33), se tiene que la máxima energía cinética que puede ceder el proyectil al electrón es:

$$(I.36) \quad T_{máx} = 4 \frac{m_e}{m_p} (E_i - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_{umb}}) = 4 \frac{m_e}{m_p} (E_i - 2 \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} E_K)$$

donde también se ha sustituido (3.31) y que $E_K = (Z_1 e^2)^2 / 2 |a_K|$. Ahora, dado que en este trabajo siempre se supone que los proyectiles tienen velocidades menores que las velocidades de los electrones de la capa K, pues de lo contrario no se puede dar un tratamiento clásico al proyectil, además de que el proceso de ionización no puede ser manejado por métodos semiclásicos [19], supóngase que la velocidad del electrón en la capa K es n veces mayor que la velocidad del proyectil ($n \geq 1$), entonces, usando el teorema del virial para un potencial $V = kr^{-1}$ ($\langle T \rangle = -\langle V \rangle / 2 = -E$, donde los promedios se toman como promedios temporales) resulta que si $v_{eK} = nv_i$ (donde v_{eK} es la velocidad del electrón en la capa K) entonces:

$$(I.37) \quad E_K = n^2 \frac{m_e}{m_p} E_i \quad E_i = \frac{1}{n^2} \frac{m_p}{m_e} E_K$$

Por lo tanto,

$$(I.38) \quad T_{\text{máx}} = 4 \frac{m_e}{m_p} E_i \left(1 - 2n^2 \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} \frac{m_e}{m_p} \right), \quad E_i > E_{\text{umb}} (p=0)$$

De la ecuación (I.38) se ve que si Z_1 y Z_2 son pequeños o, en su defecto, si Z_1 es mucho menor que Z_2 o viceversa (digamos $Z_1 = 1, 2$ y $Z_2 > 10$) y v_{eK} es del orden de v_i , (digamos $n^2 < 100$) se tiene que la ecuación (I.39) sería una buena aproximación de (I.38):

$$(I.39) \quad T_{\text{máx}} \approx 4 \frac{m_e}{m_p} E_i$$

En el caso que $n \approx 1$ se tendría que la energía total máxima que puede ceder el proyectil sería:

$$(I.39a) \quad (E_{\text{per}})_{\text{máx}} = E_K + T_{\text{máx}} = 5 \frac{m_e}{m_p} E_i$$

Análogamente, si $p \neq 0$ y, por lo tanto, $\varepsilon(p) > 1$ (lo cual da como resultado una hipérbola), se tiene que la distancia de máximo acercamiento entre el proyectil y el núcleo está dada por (ver ec. (I.8) y (I.27)):

$$(I.40) \quad r_o (p \neq 0) = a (1 + \varepsilon(p)) = a + (a^2 + p^2)^{1/2} > 2a$$

Por lo tanto, la distancia del centro de ambas ramas de la hipérbola al vértice de cualquiera de ellas "a", de (I.40) se puede escribir como:

$$(I.41) \quad a = \frac{1}{2} \frac{r_o^2(p) - p^2}{r_o(p)}$$

Por lo tanto, la energía inicial del proyectil, usando la ecuación (I.26), se puede escribir como:

$$(1.42) E_i = \frac{\beta r_o(p)}{r_o^2(p) - p^2}$$

De esta manera, introduciendo la condición de la distancia máxima a la que necesita acercarse el proyectil para conseguir la ionización, " r_{umb} "(ec. (1.31), se tiene que el límite de la mínima energía para conseguir la ionización E_{umb} está dado por:

$$(1.43) E_{umb}(p) = \frac{Z_1 Z_2 e^2 r_{umb}}{r_{umb}^2 - p^2} = \frac{Z_1 (Z_1 + Z_2) |a_k| e^2}{|a_k|^2 \left(1 + \frac{Z_1}{Z_2}\right)^2 - p^2}$$

O, equivalentemente, utilizando que $a_k = \hbar^2/m_e Z_2 e^2$ (m_e : masa del electrón),

$$(1.44) E_{umb}(p) = \frac{Z_1 \left(1 + \frac{Z_1}{Z_2}\right) \frac{\hbar^2}{m_e}}{|a_k|^2 \left(1 + \frac{Z_1}{Z_2}\right)^2 - p^2}$$

De aquí se puede concluir que, dadas las cargas tanto del proyectil como del núcleo, el hecho de que la sección transversal se incremente a medida que la energía inicial del proyectil incrementa se debe a que a medida que crece la energía del proyectil se alcanza la energía umbral para un intervalo de p más grande. También, resulta que a medida que crece la carga Z_1 del proyectil (siempre conservando que $Z_1 < Z_2$), para un mismo parámetro de impacto p , la energía umbral también crece, lo mismo que ocurre si Z_2 crece (lo cual coincide con experimentos que se han hecho [27, 28 y 29]). Otra cosa que se puede observar de esta ecuación es que, dada las cargas tanto del proyectil como del núcleo, si el parámetro de impacto iguala o excede a r_{umb} la ionización sería imposible, independientemente de cuán grande sea la energía del proyectil, así pues, se esperaría que las secciones transversales tendieran asintóticamente a un valor fijo mientras la energía de los proyectiles crece, ya que, aunque el aumento en la energía permite que partículas de un mismo haz, con parámetros de impacto p más grandes, sean capaces de lograr la ionización, este incremento en la energía no

serviría de nada cuando p excede a r_{umb} , esto es, el aumento en la energía de los proyectiles no va a cambiar la disposición de éstos a través de los átomos blanco.

Bueno, otra vez, si $E_i > E_{umb}$, entonces, el proyectil todavía podría ceder energía cinética al electrón, tal como lo indica la ecuación (I.33), donde $(v(r_{umb}))^2$ está dada por la energía total del proyectil como:

$$(I.45) \quad [v(r_{umb})]^2 = (\dot{r}_{umb}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) = \frac{2}{m_p} \left(E_i - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_{umb}} \right)$$

De esta manera, la energía cinética máxima cedida al electrón por el proyectil es, nuevamente, por (I.33) y sustituyendo r_{umb} de (I.31):

$$(I.46) \quad T_{máx} = 4 \frac{m_e}{m_p} \left(E_i - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_{umb}} \right) \quad E_i > E_{umb} (p \neq 0)$$

$$T_{máx} = 4 \frac{m_e}{m_p} E_i \left(1 - 2n^2 \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} \frac{m_e}{m_p} \right)$$

Y también, si Z_1 es mucho menor que Z_2 (digase $Z_1 = 1, 2$ y $Z_2 > 10$) y v_{ek} del orden de v_i (digamos $n^2 < 100$) se tiene otra vez que:

$$(I.47) \quad T_{máx} \approx 4 \frac{m_e}{m_p} E_i \quad E_i > E_{umb} (p \neq 0)$$

Entonces, en el caso de $n \approx 1$, se tendría que la energía total máxima que puede perder el proyectil sería:

$$(I.47a) \quad (E_{per})_{máx} = E_k + T_{máx} = 5 \frac{m_e}{m_p} E_i$$

Así pues, tanto en la ecuación (I.39a) como en la ecuación (I.47a) se tiene aproximadamente lo que resultaría de la ecuación (I.28) considerando al electrón atómico en reposo. De hecho, hacer aquellas restricciones sobre Z_1 , Z_2 y v_i no es tan relevante como parece, pues, muchos de los experimentos hechos a este

respecto caen justo dentro de estas restricciones ([17, 19, 26, 27, 28, 29, 35, 41, 42, 43, 45], por ejemplo) así pues, se puede decir que bajo éstas, se va a tener que:

$$(1.48) \quad T_{\text{máx}} \ll E_i \quad \text{y} \quad E_K \ll E_i$$

Esto interesa ya que, más adelante, se verá que la magnitud del mínimo momento que puede perder el proyectil se puede escribir como:

$$(1.49) \quad \Delta p_{\text{mín}} = \hbar q_{\text{mín}} = \sqrt{2 m_p E_i} \left(1 - \left[1 - \frac{E_{\text{per}}}{E_i} \right]^{1/2} \right) \quad E_{\text{per}} = E_K + T$$

(De hecho, m_p es más bien la masa reducida entre el proyectil y el átomo blanco, pero suponiendo que éste último es más masivo que el proyectil, se puede poner como m_p). Por lo tanto, tomando en consideración la ecuación (1.48) - para aproximar la ec.(1.49) -, (1.47a) o (1.39a), (1.39) y (1.37), se tiene que:

$$(1.50) \quad \frac{\sqrt{m_p}}{\sqrt{2}\hbar} \frac{E_K}{\sqrt{E_i}} \approx q_{\text{mín}} \approx \frac{\sqrt{m_p}}{\sqrt{2}\hbar} \frac{E_{\text{per}}}{\sqrt{E_i}} \approx \frac{\sqrt{m_p}}{\sqrt{2}\hbar} \frac{E_K}{\sqrt{E_i}} \left(\frac{4}{n^2} + 1 \right)$$

Ahora, si se multiplica (1.50) por "a" (ec.(1.26)) y se toma en cuenta que $v_{eK} = Z_2 e^2 / \hbar$, que $E_i = m_p v_i^2$, $v_{eK} = n v_i$ y (1.37) se obtiene:

$$\xi_0 = \frac{\sqrt{m_p}}{\sqrt{2}\hbar} \frac{E_K}{\sqrt{E_i}} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2 E_i} = \frac{Z_1}{2\sqrt{2}} \frac{m_e}{m_p} n^3 \ll \xi = a q_{\text{mín}} \approx$$

$$(1.51) \quad \approx \left(\frac{4}{n^2} + 1 \right) \frac{\sqrt{m_p}}{\sqrt{2}\hbar} \frac{E_K}{\sqrt{E_i}} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2 E_i} = \left(\frac{4}{n^2} + 1 \right) \frac{Z_1}{2\sqrt{2}} \frac{m_e}{m_p} n^3 = \frac{4\xi_0}{n^2} + \xi_0$$

donde $\xi_0 = a q_{\text{mín}}$ cuando $E_K = E_{\text{per}}$. Al principio, la cantidad $a q_{\text{mín}}$ había sido llamada ξ y se había dicho que sólo en el límite en el que tiende a cero es que la primera aproximación de Born (lo que significa usar trayectoria rectas del proyectil) funciona y he aquí la razón. Pedir que ξ tienda a cero es pedir que el proyectil tenga la mayor masa (respecto a su carga) y velocidad posibles, y que al mismo tiempo tenga la mínima carga posible. Por otro lado, de la ecuación (1.25), después de unas pequeñas transformaciones, y usando la relación (1.37), se obtiene que la excentricidad de la trayectoria se puede escribir como:

$$\xi = \left(1 + \frac{m_p^2 V_i^4 p^2}{Z_1^2 Z_2^2 e^4} \right)^{1/2} = \left(1 + \frac{m_p^2 \frac{1}{n^4} V_{ek}^4 p^2}{Z_1^2 Z_2^2 e^4} \right)^{1/2}$$

$$(1.52) \quad \xi = \left(1 + \frac{m_p^2 \frac{1}{n^4} Z_2^4 e^8 p^2}{Z_1^2 Z_2^2 \hbar^4 e^4} \right)^{1/2} = \left(1 + \frac{m_p^2 Z_2^2 e^4 p^2}{Z_1^2 \hbar^4 n^4} \right)^{1/2}$$

Sobre p no se pueden poner restricciones, pero tener $\varepsilon \gg 1$ (lo cual da prácticamente una recta) exige justamente lo que exige tener ξ tendiendo a cero, como se puede ver de la ecuación (1.52). De hecho, se puede escribir ε en términos de ξ_0 (definido en la ec. (1.51)) como sigue:

$$\varepsilon = \left(1 + \frac{n^2 m_e^2}{8 \xi_0^2} \frac{Z_2^2 e^4 p^2}{\hbar^4} \right)^{1/2} = \left(1 + \frac{n^2 m_e^2}{8 \xi_0^2} \frac{V_{ek}^4 p^2}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

$$(1.53) \quad \varepsilon = \left(1 + \frac{m_e^2 n^4 V_i^2 p^2}{8 \xi_0^2 \hbar^2} \right)^{1/2} = \left(1 + \frac{m_e^2 V_i^2 p^2}{8 \left(\frac{\xi_0}{n^2} \right)^2 \hbar^2} \right)^{1/2}$$

(Nótese que $\xi_0 \rightarrow 0 \Leftrightarrow \xi_0/n^2 \rightarrow 0$, ya que de (1.51) se ve que ξ_0 depende de n^3). La razón por la que se ha dedicado tanto tiempo a este factor ξ es por que resulta que cuando se obtiene la expresión para la sección transversal para la producción de rayos X característicos de la capa K, considerando la deflexión coulombiana, ésta coincide exactamente con la que se obtiene usando la primera aproximación de Born (es decir, suponiendo que el proyectil sigue trayectorias rectas) justamente en el límite de $\xi \rightarrow 0$, tal como lo explica y predice el análisis anterior. Sin embargo, como se puede ver en el apéndice C [30], el origen de la primera aproximación de Born, por sí mismo, permite tener un criterio para determinar los límites de aplicabilidad de dicha aproximación en el caso de un potencial coulombiano blindado por sus electrones, así pues, se puede ver que dicho criterio (energías de colisión altas y/o un potencial débil) está en perfecto acuerdo con este análisis.

Cabe señalar que las condiciones que se piden para $\varepsilon \gg 1$, deben ajustarse a pedir que m_p debe ser considerablemente menor que la masa del átomo-blanco.

II. TRATAMIENTO DEL PROBLEMA CON Y SIN DEFLEXIÓN COULOMBIANA.

a) σ COMO FUNCIÓN DE LA AMPLITUD DE DISPERSIÓN.

Por el carácter microscópico de los corpúsculos básicos, el único método de exploración del que se dispone para investigar la estructura de sus interacciones y su dependencia de los diversos parámetros (tipo de partículas involucradas, energía, distancia relativa, etc.) consiste en el bombardeo de unas por otras y el subsecuente análisis de los resultados de la interacción [31].

Físicamente, la situación general por estudiar es: un haz de partículas con momento y energía controlados y conocidos, es lanzado contra un blanco de estructura conocida (que en el presente caso es un gas o un cristal) que generalmente se encuentra en reposo respecto al laboratorio. Debido a las colisiones que se producen en el blanco, las partículas de bombardeo (proyectiles) - las cuales son independientes entre sí, debido a la baja densidad del haz - son dispersadas y salen del blanco en todas las posibles direcciones. A su vez, a una distancia relativamente grande, respecto del lugar de la colisión, se encuentran detectores adecuados que reciben las partículas que emergen como resultado de la interacción. La zona donde se encuentran los detectores es la región que matemáticamente se llama región asintótica. A partir de los datos que proporcionan los detectores se pueden determinar propiedades del proyectil (masa, carga, energía, etc.), pero, principalmente dicen el número medio de partículas que inciden por unidad de área del detector por unidad de tiempo.

Un primer punto importante es que la descripción del experimento se realiza, naturalmente, en un sistema de coordenadas ligadas al laboratorio, en el cual se encuentra el blanco en reposo, mientras que en la descripción teórica es más fácil tratar con el sistema del centro de masa, ya que el movimiento uniforme del centro de masa es irrelevante en la descripción (dada la reducción del problema de dos cuerpos, ver apéndice B, a)). Cuando la partícula bombardeada es muy masiva respecto al proyectil, ambos sistemas son casi coincidentes, pues el centro de masa en todo momento permanece muy cerca del blanco, confundándose prácticamente con él.

Tres parámetros importantes son [31]:

θ - ángulo de dispersión

E - energía de la colisión

$n(\theta)$ - número de partículas que inciden por unidad de área, por unidad de tiempo, de apertura $d\Omega$ (dada como un ángulo sólido) y posición angular θ .

A continuación se da la relación de los parámetros vistos desde el sistema del centro de masa (CM) y el sistema del laboratorio (L) :

Por ejemplo, resulta que si se definen los ángulos de dispersión como θ_L en el sistema L y como θ_{CM} en el sistema CM [31] entre ellos existe la siguiente relación (donde m_1 es la masa del proyectil y m_2 es la masa del blanco):

$$(II.1) \quad \tan \theta_L = \frac{\sin \theta_{CM}}{\cos \theta_{CM} + \frac{m_1}{m_2}}$$

Por otro lado, una parte de la energía disponible en el sistema L está asociada al movimiento del CM y no se utiliza en la dispersión. Esto hace que la energía de la colisión sea menor que la usada para acelerar las partículas según la fórmula:

$$(II.2) \quad E_{CM} = \left(1 - \frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) E_L$$

Un resultado muy importante es el que relaciona el número de partículas que inciden por unidad de área y por unidad de tiempo en un detector cuya apertura $d\Omega_{CM}$ y posición angular se definen en el sistema CM, con el correspondiente dato, pero definido en el sistema L. Se obtiene

$$(II.3) \quad n(\theta_L) = \frac{\left[1 + 2 \frac{m_1}{m_2} \cos \theta_{CM} + \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^2\right]^{3/2}}{1 + \frac{m_1}{m_2} \cos \theta_{CM}} n(\theta_{CM})$$

En lo que sigue se considerará el problema directamente en el sistema CM ; para simplificar, se omitirán los índices CM, que quedan sobreentendidos.

En el actual problema lo que se tiene es un ion ligero (proyectil de energía E - o E_i , como es llamada a partir de este capítulo -) colisionando con un átomo así pues, primero se debe analizar el tipo de potencial de interacción ($V(r)$) que existe entre estas partículas y las funciones de onda que representan al proyectil antes y después

de la colisión. De la ec.(B-55) (para más información respecto a los temas de los apéndices ver ref. [31]) se ve que si el producto $uV(r)$ se anula en el infinito, entonces el comportamiento asintótico de la función radial u en el infinito es $u \sim e^{ikr}$ con $k = (2mE)^{1/2} / \hbar$ (m - o μ , como es llamada a partir de este capítulo - es la masa reducida del sistema, ver ec. B-62 y B-63); este comportamiento asintótico de la función se obtiene si uno se restringe a los potenciales que obedecen la condición $rV(r) \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$. Los potenciales que tienen esta propiedad son llamados potenciales "de corto alcance". Si en el estudio de procesos dispersivos, al tomar la primera aproximación de Born, uno se limita a considerar sólo potenciales de corto alcance, entonces, el potencial coulombiano - justo el que se trata en el presente trabajo- quedaría eliminado, no obstante, se verá que el efecto de blindaje de los electrones atómicos y las altas velocidades de colisión permiten utilizar la primera aproximación de Born.

Cuando la interacción es debida a un potencial de corto alcance, se puede considerar que ésta tiene lugar totalmente en el interior de una esfera de radio finito R , por lo que si la distancia entre el proyectil y el átomo-blanco es mayor que el alcance R , el movimiento es libre ($V(r) = 0$, si $r > R$). En este caso, la energía cinética del movimiento relativo de las partículas libres es la energía total del sistema.

Con se ve en el capítulo III, la función de onda que describen las partículas dispersadas en la región asintótica ($r \rightarrow \infty$) se puede escribir como el producto de la función radial asintótica $R(r) = u(r)/r$ por una función de onda angular que se denotará con $f(\theta, \varphi)$. Usando la ec. (B-62) se escribe entonces:

$$(II.4) \quad \psi_{disp} = f(\theta, \varphi) \cdot \frac{u(r)}{r} = f(\theta, \varphi) \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \quad (r \rightarrow \infty)$$

donde en donde $f(\theta, \varphi)$ es la llamada amplitud de probabilidad de dispersión (si se trata sólo con dispersión) y (ver ec. (B-64))

$$(II.5) \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E_i}}{\hbar}, \quad E_i > 0$$

Puesto que el detector se coloca invariablemente muy lejos del blanco, para garantizar que el proceso (dispersión-ionización, en este caso) se haya realizado

completamente, esta función de onda es la que se necesita para calcular en qué proporción se da el proceso estudiado, por lo que la descripción del proceso sería hasta aquí suficiente. La función de onda completa posee una componente adicional que corresponde a las partículas no dispersadas por el blanco (representando también que el electrón no salió de la capa K). Como éstas forman un paquete de partículas libres y electrones aún ligados, ψ_{inc} , se puede escribir la función de onda total, lejos del blanco, como

$$(II.6) \quad \psi = \psi_{inc} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} = \psi_{inc} + \psi_{disp}$$

Más adelante, en el siguiente capítulo, se verá que la función de onda incidente se puede escribir como

$$(II.7) \quad \psi_{inc} = Ae^{ikr}, \text{ donde } AA^* = 1$$

La ec.(II.6) aparece como la superposición de una onda incidente más una onda dispersada. También se puede entender como que el estado del sistema es igual a la superposición de un estado inicial y un estado final, cada uno con su respectiva amplitud de probabilidad (y por lo tanto una probabilidad), que en general, varía con el tiempo, pero, con valores constantes en las regiones asintóticas.

La función de onda dispersada es una onda esférica saliente multiplicada por la amplitud de probabilidad $f(\theta, \varphi)$, que más adelante se verá que contiene toda la información dinámica del problema. Se verá a continuación que esta función $f(\theta, \varphi)$ encierra también toda la información empíricamente observable. Esto es, la probabilidad de encontrar la partícula incidente en el punto r mucho antes de la colisión y al electrón en la capa K será (ver ec.(II.7))

$$(II.8) \quad |\psi_{inc}(\vec{r})|^2 d^3r = |Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}|^2 d^3r = dx dy dz, \quad AA^* = 1$$

Suponiendo la incidencia de los proyectiles a lo largo de eje z , la probabilidad de incidencia por unidad de área y unidad de tiempo será

$$(II.9) \quad \frac{|\psi_{inc}(\vec{r})|^2 d^3r}{dx dy dt} = \frac{dz}{dt} = v_i$$

donde v_i es la velocidad de la partícula incidente mucho antes de la colisión. Por otro lado, la probabilidad de encontrar una partícula dispersada mucho después de la colisión y al electrón libre será, por (II.6),

$$\begin{aligned} |\psi_{disp}(r)|^2 d^3r &= |\psi_{disp}(\bar{r})|^2 r^2 dr d\Omega \\ (II.10) \quad &\equiv |f(\theta, \varphi)|^2 dr d\Omega \\ d\Omega &= \sin\theta d\theta d\varphi \end{aligned}$$

Entonces, la probabilidad de detectar una partícula por unidad de tiempo, dispersada dentro del ángulo sólido $d\Omega$, no es más que (II.8) dividida por $dt = dr/v_f$, donde v_f es la velocidad final de la partícula mucho después de la colisión:

$$(II.11) \quad \frac{|\psi_{disp}(\bar{r})|^2 d^3r}{dt} = \frac{|f(\theta, \varphi)|^2 dr d\Omega}{dr/v_f} = v_f |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

Se le llama sección transversal diferencial al cociente de la probabilidad de detección de la partícula dispersada (con el electrón libre, en este caso) por unidad de tiempo en una diferencial de ángulo sólido, entre la probabilidad de incidencia de la partícula (con el electrón en la capa K, en este caso) por unidad de tiempo y unidad de área. Experimentalmente se debe que la sección transversal diferencial es el cociente del flujo dispersado en $d\Omega$ (consiguiendo al electrón libre), entre el flujo incidente con electrón en la capa K. Así pues,

$$(II.12) \quad d\sigma = \frac{v_f}{v_i} |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} \equiv \frac{v_f}{v_i} |f(\theta, \varphi)|^2$$

Por lo tanto, la sección transversal total se obtiene integrando (II.12) sobre el ángulo sólido de detección:

$$(II.13) \quad \sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int d\Omega |f(\theta, \varphi)|^2 \frac{v_f}{v_i}$$

b) σ COMO FUNCIÓN DEL PARÁMETRO DE IMPACTO Y DE LA PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN ENTRE DOS ESTADOS.

Es justo en la región de bajas energías, donde las grandes divergencias de los cálculos con la primera aproximación de Born aparecen, que un tratamiento clásico del proyectil es justificado. La condición para tal tratamiento es (ver ec.(1.3) de ref. [32])

$$(II.14) \quad \chi = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v_i} = \frac{2Z_1 v_{ek}}{v_i} \gg 1$$

donde Z_2 es la carga del núcleo-blanco y v_i es la velocidad del proyectil. Esto permite tomar en cuenta la repulsión coulombiana eligiendo una trayectoria apropiada para el proyectil, la cual ya se ha visto que es una hipérbola y que corresponde clásicamente a un potencial coulombiano repulsivo.

Para tratar el proceso de ionización, de tal manera que la deflexión coulombiana pueda ser tomada en cuenta, BANG y HANSTEEN propusieron un tratamiento perturbativo semiclásico. Ellos representan el problema en términos del parámetro de impacto y expresan la interacción entre el proyectil y el electrón como la perturbación

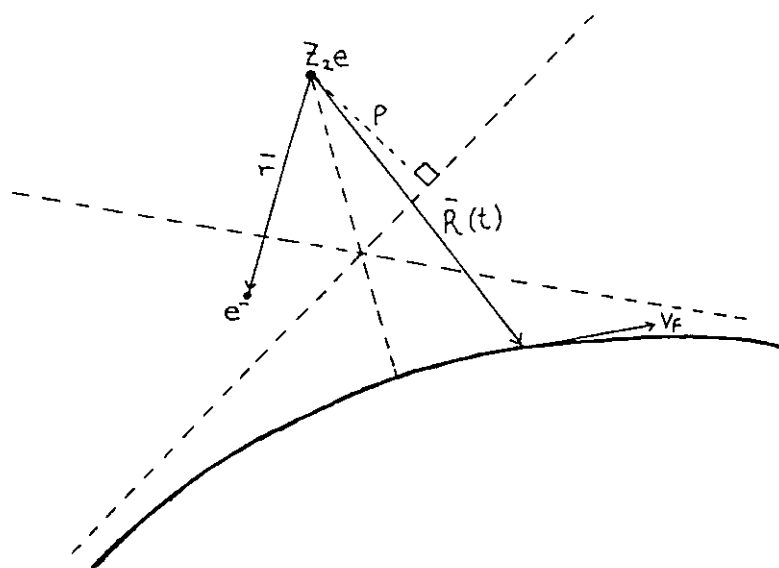


Fig. II.1

Se tiene que la aplicación de una perturbación a un sistema cuántico modifica su estado; por ejemplo, si ψ_n es el estado inicial, eigenestado de H_0 , el estado final, eigenestado de $H = H_0 + V$, se puede escribir como

$$(II.15) \quad \Psi_n = \psi_n + \sum_k C_{nk} \psi_k$$

Un cierto coeficiente C_{nk} da la amplitud del estado k de H_0 contenida en Ψ_n , así,

$$(II.16) \quad C_{nk} = \langle \psi_k | \Psi_n \rangle$$

Por lo tanto, $P_{nk} \equiv |C_{nk}|^2$ es la probabilidad de que, como producto de la perturbación, se realice la transición del estado inicial n al estado k .

Si ahora la perturbación depende del tiempo, entonces, se tiene que encontrar un tratamiento perturbativo de la ecuación completa de Schrödinger

$$(II.17) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi = (\hat{H}_0 + \hat{\mathcal{V}}(t)) \Psi$$

La solución general del problema no perturbado:

$$(II.18) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi^{(0)}}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi^{(0)}$$

se puede escribir en la forma

$$(II.19) \quad \Psi^{(0)} = \sum_k C_k e^{-iE_k t/\hbar} \varphi_k(x)$$

en donde las φ_k son la eigenfunciones de H_0 , y E_k los correspondientes eigenvalores. Los coeficientes C_k del desarrollo se pueden escribir como

$$(II.20) \quad C_k = \int \varphi_k^*(x) \Psi^{(0)}(x, t = -\infty) dx$$

(se considerará que la interacción inicia en $t = -\infty$, donde se entenderá a $-\infty$ como $-n2\pi$, donde $n \rightarrow \infty$; únicamente por las coordenadas hiperbólicas que, más adelante, se usarán para representar la interacción) Para resolver la ec.(II.17) se utiliza un método de variación de parámetros propuesto por Dirac, el cual consiste en escribir sus soluciones en la forma (II.19), pero con las constantes sustituidas por funciones del tiempo a determinar

$$(II.21) \quad \Psi = \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \varphi_k(x)$$

Sustituyendo en (II.17) se obtiene

$$\begin{aligned} & i\hbar \left(\sum_k \dot{C}_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \varphi_k(x) + \left(-i \frac{E_k}{\hbar}\right) \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \varphi_k(x) \right) = \\ & = \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} H_0 \varphi_k(x) + \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \mathcal{H}(t) \varphi_k(x) \Rightarrow \\ & i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \varphi_k(x) + E_k \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \varphi_k(x) = \\ & = \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} E_k \varphi_k(x) + \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \mathcal{H}(t) \varphi_k(x) \Rightarrow \\ (II.22) \quad & i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \varphi_k(x) = \sum_k C_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \mathcal{H}(t) \varphi_k(x) \end{aligned}$$

multiplicando por φ_l^* e integrando sobre x

$$(II.23) \quad \dot{C}_l(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k C_k(t) e^{i(E_l - E_k)t/\hbar} \mathcal{H}_{lk}(t)$$

en donde

$$(II.24) \quad \mathcal{H}_{lk}(t) = \int \varphi_l^*(x) \mathcal{H}(t) \varphi_k(x) dx$$

Si se integra sobre el tiempo, suponiendo que la perturbación se aplica en $t = -\infty$, múltiplo de -2π , se obtiene

$$(II.25) \quad C_l(t) = C_l(-\infty) - \frac{i}{\hbar} \sum_k \int_{-\infty}^t C_k(t) e^{i\omega_{lk}t} \mathcal{H}_{lk} dt$$

en donde el valor inicial $C_l(-\infty)$ es, según se sigue de (II.20)

$$(II.26) \quad C_l(-\infty) = \int \varphi_l^* \psi(t=-\infty) dx$$

Tal como en este caso, en el caso especial en que antes de la perturbación el sistema se encuentra en un eigenestado de H_0 (cuando se tiene al electrón en la capa K), que será llamado φ_n , resulta que $\psi(t=-\infty) = \varphi_n(x)$ y, por lo tanto, de (II.26) se tiene que $C_k(-\infty) = \delta_{nk}$.

Por la notación de (II.25) la función buscada ψ puede escribirse de la siguiente manera

$$(II.27) \quad \psi = \sum_l C_l(t) e^{-iE_l t/\hbar} \varphi_l(x)$$

Para resolver el sistema de ecuaciones integrales (II.25), que es exacto, se hace un desarrollo perturbativo de los coeficientes C

$$(II.28) \quad C_l(t) = C_l(t=-\infty) + C_l^{(1)}(t) + \dots = \delta_{nl} + C_l^{(1)}(t) + \dots$$

Sustituyendo en (II.25) se obtiene, cuando $n \neq l$

$$(II.29a) \quad C_l(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k \int_{-\infty}^t C_k(t) e^{i\omega_{lk}t} \mathcal{H}_{lk} dt$$

Iterando $C_k(t)$, dada por la ecuación (II.28), y suponiendo que ésta no varía mucho de su valor inicial, es decir, que $C_l^{(0)}(t)$ es pequeño, se tiene que $C_l(t)$ está dado, a primer orden, por

$$\begin{aligned} C_l^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k \int_{-\infty}^t C_k(-\infty) e^{i\omega_{lk}t'} \mathcal{H}_{lk} dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k \int_{-\infty}^t \delta_{nk} e^{i\omega_{lk}t'} \mathcal{H}_{lk} dt' \end{aligned}$$

$$(II.29b) \quad C_l^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{lk}t'} \mathcal{H}_{lk} dt'$$

Dado que estos coeficientes C se refieren a la transición $n \rightarrow l$ es conveniente agregarles el subíndice n , al igual que a la función de onda dada por (II.27)

$$(II.30) \quad \psi_n = \sum_l C_{nl}(t) e^{-iE_l t/\hbar} \varphi_l(x)$$

$$(II.31) \quad C_{nl}^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{ln}t'} \mathcal{H}_{ln}(t') dt'$$

Ahora bien, si el hamiltoniano $\mathcal{H}$ describe un potencial V que se aplica en $t = -\infty$ y que eventualmente desaparece. Para tiempos t mayores que la duración de V (digamos, para $t = \infty$), los coeficientes C habrán adquirido su valor final y la función de onda será una superposición de eigenestados de H_0 dada por

$$(II.32) \quad \psi_n = \sum_l C_{nl}(\infty) e^{-iE_l t/\hbar} \varphi_l(x)$$

El coeficiente $C_{nl}(\infty)$ es la amplitud del estado estacionario l contenida en ψ_n ; por lo tanto, la probabilidad de transición del estado estacionario inicial n al estado estacionario l durante el tiempo que dura la perturbación es (a primer orden)

$$(II.33) \quad P_{n \rightarrow l} = |C_{nl}^{(1)}(\infty)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \langle n | V | l \rangle e^{i\omega_{ln}t} dt \right|^2$$

Esta aproximación es válida cuando el coeficiente $C_m(t)$ no varía mucho de su valor inicial (que para $n \neq l$ es cero); es decir, cuando $C_l^{(1)}(t)$ (ec. (II.28)) es pequeña comparada con la unidad, por lo tanto, se estaría pidiendo lo mismo para $C_m^{(1)}(t)$, para lo cual, se necesita que la integral de la ecuación (II.31) sea mucho menor que uno, lo cual, finalmente, demanda que el potencial perturbativo cambie poco durante intervalos de tiempo $\sim (\omega_{kn})^{-1}$; pues, en este caso, debido a las oscilaciones del integrando, la integral resulta pequeña. En el presente caso, esto se puede garantizar a través de la ec. (II.1).

Para aplicar la ec. (II.33) al problema de ionización, se ha de identificar que el sistema que inicialmente se tiene es un electrón ligado al núcleo-blanco en la capa K, regido por el hamiltoniano H_0 (dado por la ecuación (B-39)) y representado por su correspondiente función de onda (la cual será tomada más adelante en la forma en la que la presentan ALDER Y WINTHER[34]), después, se tiene al proyectil acercándose al electrón con una velocidad v_i , cuya interacción con el electrón (considerada como la perturbación) cambia el estado de éste. De esta manera, el potencial perturbativo, dependiente del tiempo es (ver fig.II.1):

$$(II.34) \quad V = \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|}$$

donde $\vec{r}$ es el vector posición del electrón y $\vec{R}(t)$ el del proyectil, respecto del núcleo.

Ahora se trata de conocer la probabilidad de que este potencial saque al electrón del átomo y quede libre. Así pues, el estado final va a quedar representado por la función de onda de un electrón libre con energía T [34]. De este modo, el cambio en la energía $E_l - E_n$, asociado a este problema es justamente la energía de ionización E_k del electrón (igual a menos la energía de ligadura inicial del electrón) más la energía cinética final del electrón, T .

Se tiene, entonces, que la probabilidad de que el electrón pase de estar en la capa K del núcleo-blanco - estado $|i\rangle$ - a ser libre con energía T - estado $\langle f|$ - es, a primer orden:

$$(II.35) \quad P_{K-\text{libre}} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle i | V(\bar{R}, t) | f \rangle \right|^2$$

donde $\omega = (|E_K| + T)/\hbar$. Por otro lado, se tiene que la definición general de la sección transversal total es

$$(II.36) \quad \sigma = 2\pi \int_0^{\infty} p P(p) dp$$

donde p es el parámetro de impacto en la colisión y $P(p)$ es la probabilidad de que un evento cualquiera ocurra cuando el proyectil se aproxima con un parámetro de impacto p . Geométricamente, la sección transversal es el área circular, centrada en el blanco, dentro de la cual, si el proyectil llega ahí, el proceso al que se refiera $P(p)$ se llevará a cabo.

De este modo, entonces, se tiene que la sección transversal para la emisión de un electrón atómico con energía final T está dado por la expresión general:

$$(II.37) \quad \frac{d\sigma}{dT} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \int_0^{\infty} p dp \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle i | V(R, r, t) | f \rangle \right|^2$$

III. SECCIÓN TRANSVERSAL PARA COLISIONES SIN DEFLEXIÓN COULOMBIANA A PARTIR DE LA AMPLITUD DE DISPERSIÓN Y USANDO LA APROXIMACIÓN DE BORN

a) EC. INTEGRAL DE LIPPMAN-SCHWINGER PARA LA FUNCIÓN DE ONDA TOTAL DEL SISTEMA CONSIDERANDO UN POTENCIAL COULOMBIANO BLINDADO

En la primera aproximación de Born se va a considerar la interacción entre un átomo hidrogenoide y el proyectil en las regiones asintóticas (es decir, las regiones en donde se consideran los estados inicial y final). La función de onda del sistema, átomo-proyectil, va a ser considerada la función de onda de una cuasipartícula de masa $\mu = m_p m_e / (m_a + m_p)$, la cual, suponiendo que el potencial fuera de corto alcance, será una cuasipartícula libre (representada por una onda plana), la cual, fuera del alcance del potencial producido por el núcleo atómico, seguirá una línea recta. Donde las pérdidas de velocidad en el proyectil serán debidas a la energía que es cedida al electrón.

En el capítulo anterior se vio que, tal cual, el potencial coulombiano no es un potencial de corto alcance ($V(r) = 0$ si $r > R$, siendo R finito), sin embargo, el llamado efecto de blindaje o apantallamiento va a permitir que, en las regiones asintóticas, el potencial de interacción se pueda considerar nulo - tal como un potencial de corto alcance -. El efecto de blindaje en un átomo se debe a que los electrones orbitales blindan o aíslan parcialmente al núcleo de la carga externa. Una evaluación cuántica muestra que se puede tomar en cuenta este efecto introduciendo el factor de blindaje $e^{-\alpha r}$, en donde α depende de la estructura del átomo. De hecho, por ejemplo, se tiene que el potencial electrostático producido por un átomo hidrogenoide en su estado base es el promedio [31] de dos contribuciones: a) el potencial debido al electrón orbital, $-e/|r - x|$, y b) el potencial producido por el núcleo, $Z_2 e^2/r$, donde r es la distancia entre el núcleo y el proyectil, mientras que x es la distancia entre el electrón y el núcleo. Tomando el valor esperado de su suma entre estados base hidrogenoides, se obtiene

$$\phi = \frac{e(Z_2 - 1)}{r} + \frac{Z_2 e}{a_0} e^{-\frac{2Z_2 r}{a_0}} + \frac{e}{r} e^{-\frac{2Z_2 r}{a_0}}$$

Aquí, basado en lo anterior, se considerará que entre todos los electrones del átomo-blanco anularán el potencial del núcleo en las regiones asintóticas, no así

dentro de donde se considere el alcance del potencial del núcleo; mientras que, cuando el proyectil se acerca lo suficiente y empieza a interactuar con el electrón, dicha interacción también se verá afectada por los otros electrones atómicos, lo que permitirá introducir un factor de convergencia para obtener la amplitud de probabilidad como más adelante se verá.

Se parte de la ecuación de Schrödinger para un proyectil de masa m_p en el campo del potencial $V(r)$, que produce un átomo de masa m_a , siendo r la separación entre ambos. Entonces, se tiene que

$$(III.1) \quad E_i \psi(\bar{r}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi(\bar{r}) + V \psi(\bar{r})$$

donde $\mu = m_a m_p / (m_a + m_p)$, entonces,

$$(III.2) \quad \left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + E_i \right) \psi(\bar{r}) = V \psi(\bar{r})$$

donde E_i es la energía asociada al movimiento relativo entre las partículas (la cual está relacionada con la energía con la que es acelerado el proyectil, es decir, la energía de colisión en el laboratorio, por $E_i = \{1 - m_p/(m_a + m_p)\} [E_i]^L$

$$(III.3) \quad k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E_i > 0$$

entonces,

$$(III.4) \quad (\nabla_r^2 + k^2) \psi(\bar{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\bar{r}) \psi(\bar{r})$$

Se ve que el problema se reduce al de una partícula de masa reducida μ en el campo $V(r)$. Si este potencial es de corto alcance, a saber $V(r) = 0$ para $r > R$, R una distancia finita, entonces (III.4) se reduce, para $r > R$, a

$$(III.5) \quad (\nabla_r^2 + k^2) \phi(\vec{r}) = 0, \quad r > R$$

Por lo tanto,

$$(III.6) \quad \phi(\vec{r}) = A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad AA^* = 1$$

donde A es una constante que más adelante se definirá. La ecuación diferencial (III.4) y su condición de frontera (III.6) pueden incorporarse en una sola ecuación integral, llamada de Lippman - Schwinger. Las ecuaciones (III.4) y (III.6) son del tipo

$$(III.7a) \quad (\nabla^2 + k^2) \psi = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

$$(III.7b) \quad (\nabla^2 + k^2) \phi(\vec{r}) = 0$$

y si se considera el lado derecho de la primera ecuación como una fuente $\rho(r)$, tal que

$$(III.8) \quad \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = +\rho(\vec{r})$$

con ello la ecuación (III.7a) se transforma en

$$(III.9) \quad (\nabla^2 + k^2) \psi(\vec{r}) = +\rho(\vec{r})$$

Si L_r es un operador lineal diferencial (como $\nabla^2 + k^2$), la función de Green de L_r es la solución de la ecuación

$$(III.10) \quad \hat{L}_r G(\vec{r}, \vec{r}') = +\delta(\vec{r}, \vec{r}')$$

La función de Green permite construir la solución de la ecuación inhomogénea

$$(III.11) \hat{L}_r \psi(\bar{r}) = + \rho(\bar{r})$$

para una fuente arbitraria; en efecto, la solución es

$$(III.12) \psi(\bar{r}) = \int G(\bar{r}, \bar{r}') \rho(\bar{r}') d^3 r'$$

donde ψ y G satisfacen las mismas condiciones de frontera.

En el primer caso ($\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$) se hace referencia al potencial producido por una carga puntual localizada en el punto $\mathbf{r}$, la cual produce la densidad de carga

$$(III.13) \rho(\bar{r} - \bar{r}') = \delta(\bar{r} - \bar{r}')$$

Donde la carga es 1. En efecto, esta función es cero en todo punto salvo en el punto $\mathbf{r}$, por lo que la carga está concentrada en ese punto. En el segundo caso ($\rho(\mathbf{r}')$) se hace referencia al potencial producido por una distribución de cargas que pueden escribirse como la suma de los potenciales producidos por cada carga puntual.

Así pues, el primer problema sería resolver la ecuación (III.10), poniendo

$$(III.14) \hat{L}_r = \nabla^2 + k^2$$

esto es

$$(III.15) (\nabla^2 + k^2) G(\bar{r}, \bar{r}') = \delta(\bar{r}, \bar{r}')$$

Se expresa a $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en términos de su transformada de Fourier (tridimensional)

$$(III.16) G(\bar{r}, \bar{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{G}(\bar{q}) e^{i\bar{q}(\bar{r} - \bar{r}')} d^3 q$$

Aplicando a esta expresión el operador ∇^2 se obtiene

$$(III.17) \quad \nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{G}(\vec{q}) \nabla^2 e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 q$$

donde

$$\begin{aligned} \nabla^2 e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} &= \nabla \cdot (\nabla e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}) = \nabla \cdot (e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \nabla (i\vec{q} \cdot \vec{r})) \\ &= \nabla \cdot (e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} i\vec{q}) = i \left(q_x \frac{\partial}{\partial x} + q_y \frac{\partial}{\partial y} + q_z \frac{\partial}{\partial z} \right) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \\ &= i\vec{q} \cdot \nabla e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} = i\vec{q} \cdot e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} i\vec{q} \\ (III.18) \quad &= -q^2 e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \end{aligned}$$

Entonces

$$(III.19) \quad \nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{G}(\vec{q}) q^2 e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 q$$

$$(III.20) \quad \kappa^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{G}(\vec{q}) \kappa^2 e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 q$$

$$(III.21) \quad \delta(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{8\pi^3} \int e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 q$$

entonces,

$$(III.22) (\nabla^2 + K^2) G(\vec{r} - \vec{r}') - \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \int \left[\frac{K^2 - q^2}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{G} - \frac{1}{8\pi^3} \right] e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 q = 0$$

Puesto que esta condición debe satisfacerse para r arbitraria, el integrando debe anularse, lo que demanda que se tome

$$(III.23) \tilde{G}(\vec{q}) = \frac{(2\pi)^{3/2}}{8\pi^3} \frac{1}{K^2 - q^2} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{K^2 - q^2}$$

Introduciendo este resultado en la ecuación (III.16) se obtiene

$$(III.24) G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{K^2 - q^2} d^3 q$$

Para realizar la integración se expresa a q en un sistema de coordenadas esféricas, tomando el eje z en la dirección de r , con lo que se cumple que

$$(III.25) \vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') = q |\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta$$

entonces,

$$(III.26) G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{K^2 - q^2} \\ = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^{i\vec{q} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta}}{K^2 - q^2} q^2 \sin \theta d\theta d\varphi dr$$

luego, sea $\mu = \cos \theta$ y $d\mu = -\sin \theta d\theta$, entonces

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^1 \frac{e^{i\vec{q} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'| \mu}}{K^2 - q^2} q^2 (-1) d\varphi d\mu dq$$

$$(III.27) \quad G(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \frac{e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'| \mu}}{k^2 - q^2} q^2 dq d\mu d\varphi$$

Al integrar se obtiene

$$(III.28) \quad \begin{aligned} G(\vec{r}-\vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \frac{e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'| \mu}}{k^2 - q^2} q^2 dq d\mu = \int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2 - q^2} \left(\frac{e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{i q |\vec{r}-\vec{r}'|} \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2 - q^2} (e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|} - e^{-i q |\vec{r}-\vec{r}'|}) \frac{1}{i q |\vec{r}-\vec{r}'|} \end{aligned}$$

$$G(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{i(2\pi)^2 |\vec{r}-\vec{r}'|} \left(\int_0^\infty \frac{q e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{k^2 - q^2} dq - \int_0^\infty \frac{q e^{-i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{k^2 - q^2} dq \right)$$

En la segunda integral se hace el cambio $q \rightarrow -q$, entonces,

$$(III.29) \quad \begin{aligned} G(\vec{r}-\vec{r}') &= \frac{1}{i(2\pi)^2 |\vec{r}-\vec{r}'|} \left(\int_0^\infty \frac{q e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{k^2 - q^2} dq - \int_0^\infty \frac{e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{k^2 - q^2} (-q) (-dq) \right) \\ &= \frac{1}{i(2\pi)^2 |\vec{r}-\vec{r}'|} \left(\int_0^\infty \frac{q e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{k^2 - q^2} dq + \int_{-\infty}^0 \frac{e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{k^2 - q^2} q dq \right) \\ &= \frac{1}{i(2\pi)^2 |\vec{r}-\vec{r}'|} \int_{-\infty}^\infty \frac{q e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{k^2 - q^2} dq \end{aligned}$$

$$G(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{i}{4\pi^2 |\vec{r}-\vec{r}'|} \int_{-\infty}^\infty \frac{q e^{i q |\vec{r}-\vec{r}'|}}{q^2 - k^2} dq$$

Para determinar esta integral se necesita un método para usar el teorema del residuo y poder evaluarla. Así pues, se debe pasar al plano complejo C , donde se considera a q como un complejo.

Hay una proposición [32] que dice que:

i) Si f es una función analítica en un conjunto abierto que contiene al semiplano superior $H = \{q \mid \text{Im}(q) \geq 0\}$ excepto por un número finito de singularidades, ninguna de las cuales está en el eje real y que existen constantes M y $p > 1$ y un número R tales que $|f(q)| \leq M/|q|^p$ siempre que $q \in H$ y $|q| \geq R$. Entonces,

$$(III.30) \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(q) dq = 2\pi i \sum \{\text{residuos de } f \text{ en } H\}$$

ii) Si las condiciones de i) se satisfacen, con H remplazado por el semiplano inferior $L = \{q \mid \text{Im}(q) \leq 0\}$, entonces

$$(III.31) \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(q) dq = -2\pi i \sum \{\text{residuos de } f \text{ en } L\}$$

El integrando que se tiene es

$$(III.32) \quad f(q) = \frac{q e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}}{q^2 - k^2}$$

donde $q \in C$. Se dice que una función $f(q)$ es analítica si es diferenciable en el sentido complejo (es decir, respecto a q , en este caso) excepto en un número finito de singularidades. Se tiene que

$$(III.33a) \quad g(q) = q$$

$$(III.33b) \quad h(q) = e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

son analíticas, mientras que

$$(III.34) \quad p(q) = \frac{1}{q^2 - k^2}$$

lo es también (es 1 entre un polinomio) excepto en las singularidades $q = k$ y $q = -k$, sin embargo, $k \in \mathbb{R}$, por lo tanto, $f(q)$ no cumple la parte que pide que las singularidades no deben estar sobre el eje real. No obstante, esto se puede solucionar alejando un poco las singularidades del eje real por una cantidad imaginaria $\pm i\epsilon/2k$, la cual se hará tender a cero, como se puede ver de la figura III.1.

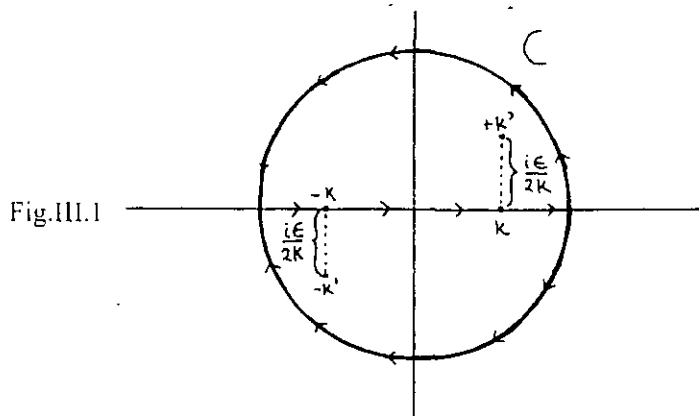


Fig.III.1

Una vez superada esta dificultad, lo que se necesita es encontrar M , p , y R en los reales, tales que, $|q|^p |f(q)| \leq M$, $\forall q \in \mathbb{H}$ y $p > 1$ y $|q| \geq R$, para así poder calcular la integral usando el teorema del residuo.

Se tiene que

$$(III.35) \quad |f(q)| = \frac{|q|^2}{|q^2 - k^2|^2}$$

Sea $p = 2$, se obtiene que

$$\frac{|q|^4}{|q^2 - k^2|^2} = \left| \frac{q^2}{q^2 - k^2} \right|^2 = \left| \frac{1}{1 + \frac{k^2}{q^2}} \right|^2 =$$

$$(III.36) \quad \frac{1}{\left|1 + \frac{k'^2}{q^2}\right|^2} \leq \frac{1}{\left\|1 - \left|\frac{k'^2}{q^2}\right|\right\|^2} = \frac{1}{\left\|1 - \frac{|k'|^2}{|q|^2}\right\|^2}$$

Si se hace $|q| \geq |k'| + 1 = R$, entonces se tiene que

$$(III.37) \quad \frac{|q|^4}{|q^2 - k'^2|^2} \leq \frac{1}{\left\|1 - \frac{|k'|}{|k'|+1}\right\|^2} = \frac{1}{\left\|1 - \frac{1}{1 + 1/|k'|}\right\|^2} = M$$

donde

$$(III.38) \quad |k'| = k^2 - \frac{\epsilon^2}{4k^2}$$

Se ve, entonces, que la función $f(q)$ cumple con las condiciones i) y ii), por lo tanto, se tienen dos soluciones, una para H y la otra para L

$$(III.39) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{iq|F-\tilde{r}|}}{q^2 - k^2} dq = 2\pi i \sum (\text{Res } f \text{ en } H)$$

aquí se tiene un solo polo simple $k' = k + i\epsilon/2k$

$$(III.40) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{iq|F-\tilde{r}|}}{q^2 - k^2} dq = 2\pi i \sum (\text{Res } f \text{ en } L)$$

aquí se tiene, también, un solo polo simple $-k' = -k - i\epsilon/2k$.

Ahora, si

$$(III.41) \quad \lim_{q \rightarrow k'} (q - k') f(q)$$

existe y es distinto de cero, el residuo de f en k' es dicho límite

$$(III.42) \lim_{q \rightarrow k^+} \frac{(q - k^+)}{q^2 - k^2} q e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{q e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|}}{q + k^+} \Big|_{q=k^+} = \frac{e^{ik^+|\vec{r} - \vec{r}'|}}{2}$$

Haciendo tender $\epsilon \rightarrow 0$, se tiene que

$$(III.43) \text{Res } f \text{ en } \mathbb{H} = \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{2}$$

Para el residuo en $\mathbb{L}$ se calcula lo siguiente

$$(III.44) \lim_{q \rightarrow -k^-} \frac{(q + k^+)}{(q^2 - k^2)} q e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|} = q \frac{e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|}}{q - k} \Big|_{q=-k} = \frac{e^{-ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{2}$$

si se hace tender $\epsilon \rightarrow 0$, se tiene que

$$(III.45) \text{Res } f \text{ en } \mathbb{L} = \frac{e^{-ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{2}$$

Sustituyendo en (III.39) y (III.40), resulta que

$$(III.46) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|}}{q^2 - k^2} dq = \pi i e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad \text{en } \mathbb{H}$$

$$(III.47) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|}}{q^2 - k^2} dq = -\pi i e^{-ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad \text{en } \mathbb{L}$$

Sustituyendo (III.46) y (III.47) en (III.29) se tiene que

$$(5.48) \quad G_H(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{i^2}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad \text{en } \mathbb{H}$$

$$(5.49) \quad G_L(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{-i^2}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{-ik|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad \text{en } \mathbb{L}$$

La amplitud de G_H , así como la de G_L , es proporcional a $1/|\vec{r}-\vec{r}'|$ por lo que la intensidad decrece como $1/r^2$, lo que corresponde a una onda esférica; si se multiplica por el factor temporal $e^{-i\omega t}$ (donde el signo menos es una convención para diferenciar las ondas salientes y las ondas entrantes), se ve que la fase de G_H es $k|\vec{r}-\vec{r}'| - \omega t$, lo cual corresponde a una onda saliente. La función de Green general es una combinación arbitraria de las dos soluciones, sin embargo, este caso exige que la solución dispersada asintótica tenga la forma de una onda esférica saliente e^{ikr}/r (ver ec. (II.4)), que es precisamente la forma de G_H . Por ello, debe tomarse $G \propto G_H$, así pues, se propone

$$(III.50) \quad G(\vec{r}-\vec{r}') = - \frac{B e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad B = \text{constante}$$

donde B es una constante que más adelante se definirá.

Sustituyendo (III.50) en (III.12) y usando (III.8) se tiene que

$$\psi(\vec{r}) = \int G(\vec{r}-\vec{r}') \rho(\vec{r}') d^3r'$$

$$(III.51) \quad \psi(\vec{r}) = -B \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

Nótese que la función incógnita $\psi(\vec{r})$ aparece también en la integral (se le denomina, pues, como ecuación de Fredholm de segunda especie). Entonces, de (III.51), se tiene que la solución general de (III.3) es

$$(III.52) \quad \psi(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) - B \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

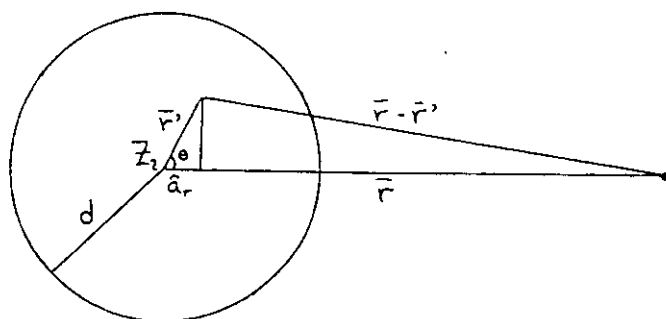
Esta última ecuación es la ecuación integral de Lippman-Schwinger.

b) FUNCIÓN DE ONDA EN LAS REGIONES ASINTÓTICAS. ITERACIÓN DE LA ECUACIÓN DE LIPPMAN-SCHWINGER. APROXIMACIÓN DE BORN.

Antes de continuar, sería bueno aclarar qué representan $\mathbf{r}$ y $\mathbf{r}'$. Se vio, desde el principio, que el vector $\mathbf{r}$ representa la distancia entre el núcleo-blanco y el proyectil, lo cual, evidentemente, sigue representándolo. Por otro lado, el vector $\mathbf{r}'$ simplemente apareció como una variable muda al introducir la función de Green y, también, sigue siendo una variable muda sin ningún significado físico, no obstante, en la ecuación integral de Lippman-Schwinger (ec. III.52), el potencial de interacción entre el proyectil y el núcleo explícitamente depende de $\mathbf{r}'$ y no de $\mathbf{r}$. Notar esto es importante puesto que el potencial que se está considerando que es un potencial de corto alcance, así, si $r' \geq R$, entonces, la integral de la ec.(III.52) se anula. Por otro lado, en este caso, bastará describir y representar las regiones asintóticas del proceso para determinar la sección transversal del proceso que interesa (Cáp. II), es decir, el estado del sistema mucho antes de la colisión y el estado del sistema mucho después de la colisión (estados inicial y final), así pues, interesan las regiones en las que r es muy grande comparado, incluso, con el alcance del potencial.

En base a la discusión precedente, resulta que la función de onda en la región asintótica se puede obtener considerando en (III.52) $r \gg R$ y, dado que V es diferente de cero sólo dentro de su alcance R , entonces $\mathbf{r}'$, de quien depende V , aunque varía en magnitud de 0 a ∞ , sólo produce contribuciones a la integral de (III.52) cuando $r' \leq R$. De este modo, sin pérdida de generalidad, se puede obtener la función de onda en la región asintótica cuando: $r' \leq R \ll r$ (Fig. II.2). En este caso, el denominador del integrando de la ec.(III.52) puede ser escrito como $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r$, mientras que en el exponencial se debe ir un orden más allá en la aproximación (ver Fig. III.2):

Fig. III.2



$$(III.53) \quad |\vec{r} - \vec{r}'| = r - \vec{r}' \cdot \hat{a}_r$$

entonces,

$$(III.54) \quad \kappa |\vec{r} - \vec{r}'| = \kappa r - \kappa \hat{a}_r \cdot \vec{r}' = \kappa r - \vec{k}' \cdot \vec{r}'$$

donde,

$$(III.55) \quad \kappa' = \kappa \frac{\vec{r}}{r}$$

Sustituyendo en (III.52) se obtiene que

$$(III.56) \quad \psi(\vec{r}) \cong \phi(\vec{r}) - B \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{i\kappa r}}{r} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

$$(III.57) \quad \psi(\vec{r}) \cong \phi(\vec{r}) - B \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\kappa r}}{r} \int d^3r' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

Sustituyendo $\phi(r)$ de (III.6)

$$(III.58) \quad \psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \gg d} A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\kappa r}}{r} = \psi_{\text{inicial}} + \psi_{\text{final}}$$

donde

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{B}{A^*} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' A^* e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

$$(III.59) \quad f(\theta, \varphi) = -\frac{B}{A^*} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \phi' | V | \psi \rangle$$

He aquí, en la ec.(III.58), la superposición de una función de estado inicial incidente, representada por

$$(III.60) \quad \psi_i = A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

más la función de estado final, representada por una onda dispersada multiplicada por la amplitud de probabilidad del proceso (Cáp. II).

$$(III.61) \quad \psi_f(\vec{r}) = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Nótese de la ecuación (III.59) que $f(\theta, \varphi)$ contiene toda la información dinámica del problema y, como ya se dijo en el capítulo II, también encierra toda la información empíricamente observable. Las constantes A y B, en este problema de ionización, también tiene que ver con el estado inicial y final del sistema, las cuales, aunque para las variables de integración de (III.59) fungen como constantes, dependen del vector $\mathbf{x}$ que va del núcleo al electrón, al igual que lo hace el potencial $V(r)$ (o $V(r')$), como se vio al inicio de este capítulo. De esta manera, tanto A como B representan eigenfunciones del electrón en el potencial producido por el núcleo atómico, sólo que A en el estado base (capa K) y B en un estado excitado:

$$(III.62) \quad A = \psi_{\text{capa K}}^{e^-} = \psi_K(\vec{x})$$

$$(III.63) \quad B = (\psi_{\text{libre}}^{e^-})^* = \psi_T^*(\vec{x})$$

Ahora, en (III.52) se tiene una integral que involucra a la propia $\psi(\mathbf{r})$, que es la que, en cierto sentido, se está buscando (pues está definida por $f(\theta, \phi)$). Este problema se puede resolver iterando (III.52) si se supone que el centro dispersor es leve (sea porque los proyectiles sean muy energéticos y crucen la región de interacción muy rápidamente, por lo que sean poco desviadas de su trayectoria inicial por los centros dispersores, sea porque el potencial dispersor sea débil, o por ambas cosas (ver. Cap. I)). En ese caso, iterando (III.52) se obtiene que

$$(III.64) \quad \psi(\bar{\mathbf{r}}) = \phi(\bar{\mathbf{r}}) - \frac{B\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{i\mathbf{k}(\bar{\mathbf{r}}-\bar{\mathbf{r}}')}}{|\bar{\mathbf{r}}-\bar{\mathbf{r}}'|} V(\bar{\mathbf{r}}') \phi(\bar{\mathbf{r}}') + \dots$$

Utilizando las aproximaciones usadas para $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ y continuando con este proceso se genera, en (III.59), la serie infinita

$$(III.65) \quad f(\theta, \varphi) \equiv - \frac{B}{A^*} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \phi' | V | \psi \rangle$$

$$= \langle \phi' | V \sum_{n=0}^{\infty} \left(- \frac{B}{A^*} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^{n+1} (QV)^n | \phi \rangle$$

La Q se define aquí de modo que

$$(III.66) \quad \langle \phi' | V Q V | \phi \rangle = \int d^3r \int d^3r' \phi'^*(\bar{\mathbf{r}}) V(\bar{\mathbf{r}}) \frac{e^{i\mathbf{k}(\bar{\mathbf{r}}-\bar{\mathbf{r}}')}}{|\bar{\mathbf{r}}-\bar{\mathbf{r}}'|} V(\bar{\mathbf{r}}') \phi(\bar{\mathbf{r}}')$$

se llama primera aproximación de Born al primer término de la serie infinita (III.65), el cual se sigue de tomar $n = 0$

$$(III.67) \quad f^B(\theta, \varphi) = - \frac{B}{A^*} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \phi' | V | \phi \rangle$$

$$= - \frac{B}{A^*} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' A A^* e^{i(\bar{\mathbf{k}}-\bar{\mathbf{k}}') \cdot \bar{\mathbf{r}}'} V(\bar{\mathbf{r}}')$$

que no es más que la transformada de Fourier del potencial.

c) SECCIÓN TRANSVERSAL TOTAL DE IONIZACIÓN DE CAPA K CON APROXIMACIÓN DE BORN

Ahora, para determinar la amplitud de probabilidad de Born para el proceso de dispersión-ionización se deben sustituir tanto las constantes A y B, dadas por las ecuaciones (III.62) y (III.63), como el potencial $V(r') = V(r', x)$, el cual, en la región donde se considera que el núcleo ya no está blindado por los otros electrones y donde la interacción entre el electrón y el proyectil es considerable, aunque afectada por la presencia de los otros electrones, está dado por

$$(III.68) \quad V(\vec{r}' - \vec{x}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r'} - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}' - \vec{x}|} e^{-\alpha |\vec{r}' - \vec{x}|}$$

(recuérdese que α se hará tender a cero, cuando se haya integrado sobre r)

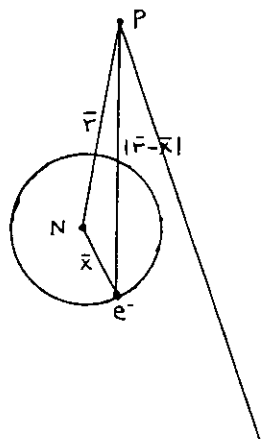


Fig. III.3

Además, se tiene que tomar en cuenta que, para obtener la $f^3(\theta, \phi)$ del proceso dispersión-ionización, se tiene también que integrar sobre todo el espacio en el que puede estar el electrón, esto es, integrar sobre x . De esta manera, la ecuación (III.67) se transforma en

$$(III.69) \quad f^3(\theta, \phi) = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \left(\psi_r^*(\vec{x}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}'} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r'} - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}' - \vec{x}|} e^{-\alpha |\vec{r}' - \vec{x}|} \right) \psi_k(\vec{x}) d^3x d^3r' \right)$$

Separando la ec.(III.69) en los sumandos que corresponden a cada parte del potencial se ve que el primer sumando es cero, dada la ortogonalidad de las eigenfunciones de los electrones en el campo del núcleo:

$$f^B(\theta, \varphi) = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}'} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r'} \left[\int d^3x \psi_T^*(\vec{x}) \psi_K(\vec{x}) \right] +$$

$$(III.70) + \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \psi_T^* e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}'} e^{-\alpha|\vec{r}'-\vec{x}|} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}'-\vec{x}|} \psi_K(\vec{x}) d^3r' d^3x$$

De este modo, sustituyendo en la ecuación (II.12), se obtiene que la sección transversal diferencial está dada por:

$$(III.71) d\sigma_{KT}(\Omega) = \frac{V_F}{V_i} \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int \psi_T^* e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}'} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}'-\vec{x}|} e^{-\alpha|\vec{r}'-\vec{x}|} \psi_K d^3x d^3r' \right|^2 d\Omega$$

donde $d\Omega$ está referido a las coordenadas angulares por donde se dispersa el proyectil:

$$(III.72) d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$$

Así pues, se puede ya proceder a integrar sobre r' . Llamando q al número de onda asociado al cambio del momento del proyectil, se tiene que

$$(III.73) \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$$

Sea χ tal que

$$(III.74) d\sigma_{KT} = \frac{V_F}{V_i} \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} |\chi|^2 d\Omega$$

entonces, se tiene que

$$\chi = \int d^3x \psi_r^*(\bar{x}) \psi_k(\bar{x}) Z_1 e^2 \int d^3r' \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}'}}{|\vec{r}' - \bar{x}|} e^{-\alpha|\vec{r}' - \bar{x}|}$$

$$\chi = \int d^3x \psi_r^*(\bar{x}) \psi_k(\bar{x}) Z_1 e^2 \int d^3r' \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}'} \cdot e^{-i\vec{q} \cdot \bar{x}} \cdot e^{i\vec{q} \cdot \bar{x}}}{|\vec{r}' - \bar{x}|} e^{-\alpha|\vec{r}' - \bar{x}|}$$

$$(III.75) \quad \chi = \underbrace{\int d^3x \psi_r^*(\bar{x}) \psi_k(\bar{x}) Z_1 e^2 e^{i\vec{q} \cdot \bar{x}}}_{\rho} \int d^3r' \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}' - \bar{x})}}{|\vec{r}' - \bar{x}|} e^{-\alpha|\vec{r}' - \bar{x}|}$$

Para hacer esta integración hágase el siguiente cambio de variable:

$$(III.76) \quad \vec{r} = \vec{r}' - \bar{x}$$

donde, como la distancia proyectil-núcleo (ahora representada por $|\vec{r}'|$) es independiente de la distancia electrón-núcleo, se tiene que

$$(III.77) \quad d\vec{r} = d\vec{r}'$$

Y, dado que $|\vec{r}' - \bar{x}|$ representa la distancia entre el electrón y el proyectil, se puede afirmar que

$$(III.78) \quad |\vec{r}'| \in (0, \infty); \quad d\vec{r} = d\vec{r}'$$

Entonces, se obtiene que

$$(III.79) \quad \chi = \rho \int d^3r \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{|\vec{r}|} e^{-\alpha|\vec{r}|}$$

Para realizar esta integral se orienta el eje z del sistema de referencia en la dirección del vector $\vec{q}$, lo que proporciona que

$$(III.80) \quad \vec{q} \cdot \vec{r} = q r \cos \theta$$

integrando r en coordenadas esféricas y definiendo $\mu = \cos\theta$ y $d\mu = -\sin\theta d\theta$ se obtiene que

$$\begin{aligned}
 \chi &= \rho \int dr e^{-\alpha r} r^2 \int_0^\pi \frac{e^{iqr \cos\theta}}{r} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\
 &= \rho 2\pi \int dr e^{-\alpha r} r^2 \int_{-1}^1 \frac{e^{iqr\mu}}{r} (-d\mu) = \\
 &= \rho 2\pi \int dr e^{-\alpha r} r^2 \left(\frac{e^{iqr\mu}}{iqr^2} \right)_{-1}^1 = \rho 2\pi \int dr e^{-\alpha r} r^2 \left(\frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr^2} \right) = \\
 \text{(III.81)} \quad &= \rho \frac{2\pi}{q} \int dr 2 e^{-\alpha r} \operatorname{sen} qr = \rho \frac{4\pi}{q} \int e^{-\alpha r} \operatorname{sen} qr dr
 \end{aligned}$$

Ahora, integrando sobre r

$$\text{(III.82)} \quad \chi = \rho \frac{4\pi}{q} \int e^{-\alpha r} \operatorname{sen} qr dr = \rho \frac{4\pi}{q} \left(\frac{q}{\alpha^2 + q^2} \right)$$

Haciendo tender a cero a α y sustituyendo ρ , se obtiene que

$$\text{(III.83)} \quad \chi = \rho \frac{4\pi}{q^2} = \frac{4\pi}{q^2} Z_1 e^2 \int d^3x \psi_r^*(\bar{x}) e^{i\vec{q} \cdot \bar{x}} \psi_k(\bar{x})$$

que sustituida en (III.74) y utilizando (III.75) resulta que

$$\begin{aligned}
 \text{(III.84)} \quad d\sigma_{kr}(\theta, \varphi) &= \\
 &= \frac{v_f}{v_i} \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{1}{\hbar^4} \frac{16\pi^2}{q^4} Z_1^2 e^4 \left| \int \psi_r^*(\bar{x}) e^{i\vec{q} \cdot \bar{x}} \psi_k(\bar{x}) d^3x \right|^2 \sin\theta d\theta d\varphi
 \end{aligned}$$

Para poder proceder a calcular la integral sobre todas las posibles direcciones de dispersión ($d\Omega$) se debe tomar en cuenta la dependencia de q respecto del ángulo de dispersión θ , así pues, tal como se definió q en la ecuación (III.73), significa que

$$(III.85) \quad \hbar \bar{q} = \bar{p}' - \bar{p} = \mu (\bar{v}_f - \bar{v}_i)$$

donde p y p' denotan el momento inicial y final de la cuasipartícula de masa μ definida en la ec.(III.1) y (III.3) (en el sistema CM, ver Cáp. II, sección a) y, v_i y v_f sus velocidades inicial y final, respectivamente.

Tomando la norma de q y luego su diferencial, respecto de θ , se obtiene que

$$(III.86) \quad \hbar \bar{q} = \mu |\bar{v}_f - \bar{v}_i| = \mu (v_f^2 - 2v_f v_i \cos\theta + v_i^2)^{1/2}$$

$$(III.87) \quad dq = \frac{\mu}{\hbar} (v_f^2 - 2v_f v_i \cos\theta + v_i^2)^{1/2} v_f v_i \sin\theta d\theta =$$

$$= \frac{\mu^2}{\hbar^2} \frac{v_f v_i}{q} \sin\theta d\theta$$

Por lo tanto,

$$(III.88) \quad \frac{\hbar^2 q dq}{v_i \mu^2} = v_f \sin\theta d\theta$$

sustituyendo (III.88) en (III.84), integrando sobre ϕ y simplificando, se llega a que

$$(III.89) \quad d\sigma_{\kappa_T}(q) = \frac{8\pi Z^2 e^4}{v_i^2 \hbar^2} \frac{dq}{q^3} \left| \int \psi_r^* e^{i\bar{q} \cdot \bar{x}} \psi_x(\bar{x}) d^3x \right|^2$$

Llamándosele factor de forma a la integral que aquí aparece.

Hasta ahora se ha considerado que calcular la sección transversal para la emisión de rayos X característicos es equivalente a calcular la sección transversal de ionización, sin embargo, la primera está regida por la probabilidad de transición del electrón a cada uno de los eigenestados excitados o desligados del electrón en el campo del núcleo al que pertenece. Es decir, en realidad tener rayos X

característicos provenientes de la capa K significaría integrar sobre todos los posibles estados finales del electrón, incluyendo los estados ligados del átomo al que pertenece, esto es, considerar la sumatoria:

$$(III.90) \quad d\sigma_{K\tau}(q) = \frac{8\pi Z_1^2 e^4}{v_i^2 \hbar^2} \sum_f \frac{dq}{q^3} \left| \int \psi_{l,m}^{f*}(\lambda, \bar{x}) e^{i\vec{q} \cdot \bar{x}} \psi_{l,m}^i(\lambda, \bar{x}) d^3x \right|^2$$

Donde las $\psi_{lm}(\lambda)$ están dadas por [34]:

$$(III.91) \quad \psi_{l,m}(\lambda, x) = N_{l,\lambda} Y_{l,m}(\theta, \varphi) R(x/\lambda)$$

l y m son los números cuánticos de momento angular, λ está relacionado con la energía del electrón como

$$(III.92) \quad \hbar^{-2} = -\frac{2m}{\hbar} E \quad a_K = -\frac{\hbar^2}{Z_2 m e^2}$$

$N_{l,\lambda}$ es el factor de normalización, el cual, para estados ligados, es:

$$(III.93) \quad N_{l,\lambda} = \frac{2}{(2l+1)! n^2} \left(\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} \right)^{1/2} |a_K|^{-3/2}$$

donde n es el número cuántico principal y $|a_K|$ es el radio de la órbita K; mientras que para estados no ligados, el factor de normalización es

$$(III.94) \quad N_{l,\lambda} = e^{\frac{\pi}{2}\eta} \frac{|\Gamma(l+1+i\eta)|}{(2l+1)!} i^l$$

donde η , llamado número de Sommerfeld, queda definida por la ecuación

$$(III.95) \quad \hbar = i\eta a_K = \frac{i}{k_e} ; \quad \eta = -\frac{Z_2 e^2}{\hbar v_e}, \quad a_K < 0$$

Las cantidades $k_e = mv_e/\hbar$ y v_e son el número de onda y la velocidad del electrón, respectivamente, en infinito.

$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ son los armónicos esféricos normalizados y $R_l(r, \lambda)$, para estados ligados, está dada por

$$(III.96) \quad R_l\left(\frac{r}{\hbar}\right) = \frac{(n-l-1)!(2l+1)!}{(l+n)!} \left(\frac{2r}{n|a_k|}\right)^l e^{-\frac{r}{n|a_k|}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n|a_k|}\right)$$

mientras que para estados no ligados, está dada por,

$$(III.97) \quad R_l(r, \hbar) = \left(\frac{2r}{\hbar}\right)^l e^{-r/\hbar} \frac{(2l+1)!}{\Gamma(-) \Gamma(+)} \int_0^1 e^{2ru/\hbar} u^{l+\hbar/a_k} (1-u)^{l-\hbar/a_k} du$$

$$\text{donde, } \Gamma(-) = \Gamma(l+1 - \hbar/a_k) \quad ; \quad \Gamma(+)=\Gamma(l+1 + \hbar/a_k)$$

Así pues, volviendo a (III.90), resulta que al hacer cada una de las integrales que involucra cada término de la sumatoria, la única contribución importante a la sumatoria es el término donde la integral no tiene cambios de momento angular [35], esto es, que $l_i = l_f = 0$, de ese modo, entonces, se asegura máxima superposición de las funciones de onda final e inicial. Por esta razón, el único estado final que se toma en cuenta es aquél donde el electrón queda libre con $l = 0$ (estado-S en el continuo) [26].

Por lo tanto, las funciones de onda inicial y final serán

$$(III.97a) \quad \psi_i = \psi_k = N_{0,|a_k|} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_0(x/|a_k|) \quad ;$$

$$N_{0,|a_k|} = 2|a_k|^{-3/2} \quad , \quad R_0\left(\frac{x}{|a_k|}\right) = e^{-x/|a_k|}$$

$$(III.97b) \Psi_f^* = \Psi_T^* = N_{0;\eta} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_\infty^*(-i\eta e x)$$

$$N_{0;\eta} = N_{0;\eta}^* = e^{-\frac{\pi}{2\eta a_k}} \left| \Gamma\left(1 + \frac{i}{\eta a_k}\right) \right|$$

$$R_\infty^*(-i\eta e x) = \frac{1}{\Gamma\left(1 - \frac{i}{\eta a_k}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{\eta a_k}\right)} \int_0^1 e^{i\eta e x (2u-1)} u^{-\frac{i}{\eta a_k}} (1-u)^{\frac{i}{\eta a_k}} du$$

introduciéndolas en (III.89) se llega a que el factor de forma está dado por

$$(III.98) F_{KT} = N_{0;|a_k|} N_{0;\eta} \frac{1}{4\pi}$$

$$\times \left\{ \int R_\infty^*(x/i\eta a_k) e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} R_0(x/|a_k|) x^2 \sin\theta dx d\theta d\varphi \right\}$$

haciendo $\vec{q} \cdot \vec{x} = qx \cos\theta$ y $\mu = \cos\theta$, $d\mu = -\sin\theta d\theta$, e integrando sobre μ y φ , se obtiene que

$$(III.99) F_{KT} = N_{0;|a_k|} N_{0;\eta} \frac{1}{2} \overbrace{\int R_\infty^*(x/i\eta a_k) R_0(x/|a_k|) x^2 \frac{\sin qx}{qx} dx}^{I_{KT}}$$

Antes de continuar con la integración sobre x , hay que fijarse en los valores que puede tomar q . La conservación de la energía limita los valores de la siguiente manera, de la ecuación (III.86), se tiene que

$$(III.100) \hbar^2 q^2 = \mu^2 (v_i^2 - 2v_i v_f \cos\theta + v_f^2)$$

donde v_f y v_i son las velocidades inicial y final del movimiento relativo átomo-blanco, entonces, si el proyectil no sufre deflexión por el núcleo, se tiene que $\theta = 0$, por lo tanto,

$$\hbar^2 q_{\min}^2 = \mu^2 (v_i^2 - 2 v_i v_f + v_f^2) = \mu^2 (v_f - v_i)^2$$

$$(III.101) \quad \hbar^2 q_{\min}^2 = \mu^2 \left(\sqrt{\frac{2 E_i}{\mu}} - \sqrt{\frac{2(E_i - E_{\text{per}})}{\mu}} \right)^2 = 2\mu (\sqrt{E_i} - \sqrt{E_i - E_{\text{per}}})^2$$

Donde la energía perdida está dada por

$$(III.101a) \quad E_{\text{per}} = E_k + T$$

donde E_k es la energía de ligadura del electrón y T es la energía que cede el proyectil al electrón como energía cinética (ver ec. III.46), similarmente, si se tiene una colisión frontal, es decir $\theta = \pi$, se tiene la condición de $q_{\max}$, que corresponde a un proyectil severamente afectado por la repulsión coulombiana

$$\hbar^2 q_{\max}^2 = \mu^2 (v_i^2 + 2 v_f v_i + v_f^2) = \mu^2 (v_f + v_i)^2$$

$$(III.102) \quad \hbar^2 q_{\max}^2 = 2\mu (\sqrt{E_i} + \sqrt{E_i - E_{\text{per}}})^2$$

Ahora, en caso de que la energía que pierda el proyectil sea suficientemente menor que la energía de colisión inicial, condición que, según la ecuación (I.37) y la ecuación (II.46), es cierta si la velocidad del electrón es mayor, pero del orden de la velocidad de colisión inicial; las ecuaciones (III.101) y (III.102) se pueden aproximar de la siguiente manera:

$$\hbar^2 q_{\min}^2 = 2\mu E_i \left(1 - \sqrt{\frac{E_i - E_{\text{per}}}{E_i}} \right)^2 = 2\mu E_i \left(1 - \left(1 - \frac{E_{\text{per}}}{E_i} \right)^{1/2} \right)^2 \approx 2\mu E_i \left(1 - \left(1 - \frac{E_{\text{per}}}{2E_i} \right) \right)^2$$

$$(III.103) \quad \hbar^2 q_{\min}^2 = \mu \frac{E_{\text{per}}^2}{2E_i}$$

mientras que para $q_{\max}$, se tiene que

$$\hbar^2 q_{\text{máx}}^2 = 2\mu E_i \left(1 + \sqrt{\frac{E_i - E_{\text{per}}}{E_i}}\right)^2 = 2\mu E_i \left(1 + \left(1 - \frac{E_{\text{per}}}{E_i}\right)^{1/2}\right)^2 \cong 2\mu E_i \left(2 - \frac{E_{\text{per}}}{E_i}\right)^2$$

$$(III.104) \quad \hbar^2 q_{\text{máx}}^2 = 8\mu E_i \left(1 - \frac{E_{\text{per}}}{4E_i}\right)^2 \cong 8\mu E_i$$

No obstante, más adelante se verá, al integrar sobre q , que dados los términos en q sobre los que se integra, se puede poner sin error alguno, $q_{\text{máx}} = \infty$.

De las ecuaciones (III.103) y (III.104), se tiene entonces que

$$(III.105) \quad \frac{E_{\text{per}}^2}{E_i} = \frac{\mu}{2\hbar^2} \leq q^2 \leq \frac{8\mu E_i}{\hbar^2}$$

mientras que,

$$(III.106) \quad |a_k|^2 = \frac{\hbar^2}{2E_k m_e}$$

entonces, multiplicando (III.105) por $|a_k|^2$, se obtiene que

$$(III.107) \quad \frac{E_{\text{per}}^2 \mu}{4E_i E_k m_e} \leq |a_k|^2 q^2 \leq 4 \frac{\mu}{m_e} \frac{E_i}{E_k}$$

Utilizando las ecuaciones (I.37), (I.47) y (III.101a), tomando $\mu \approx m_p$, se obtiene

$$(III.108) \quad \left(\frac{n}{2} + \frac{2}{n}\right)^2 \lesssim |a_k|^2 q^2 \lesssim \frac{4}{n^2} \left(\frac{m_p}{m_e}\right)^2, \quad n \lesssim 10$$

Entonces, si la velocidad del electrón es varias veces más grande que la velocidad del proyectil, se puede asegurar, de la ec. (III.108), que

$$(III.109) \quad q|a_k| \gg 1$$

Volviendo a la integral de (III.99), resulta que, al integrar por partes, ésta se puede expresar como una serie de potencias: $\sum_{m=1}^{\infty} C_m/q^3 (q|a_K|)^m$, esto es

$$\begin{aligned}
 I_{KT}(q) &= \int_0^{\infty} R_{\infty}^* R_{\infty} \frac{x}{q} \operatorname{sen} qx \, dx \\
 &= \left[R_{\infty}^* R_{\infty} \left(\frac{1}{q} \right) \left(\frac{x(-\cos qx)}{q} + \frac{\operatorname{sen} qx}{q^2} \right) \right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \underbrace{\frac{dR_{\infty}^* R_{\infty}}{dx}}_{\Delta} \left(-\frac{x \cos qx}{q^2} + \frac{\operatorname{sen} qx}{q^3} \right) \\
 &= \frac{1}{q^2} \left\{ \left[\Delta \left(\frac{x \operatorname{sen} qx}{q} + \frac{\cos qx}{q^2} \right) \right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \Delta' \left(\frac{x \operatorname{sen} qx}{q} + \frac{\cos qx}{q^2} \right) \right\} - \frac{1}{q^3} \left\{ \left[-\Delta \frac{\cos qx}{q} \right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \Delta' \left(-\frac{\cos qx}{q} \right) \right\} \\
 &= -\frac{2}{q^4} \Delta_{x=0} - \frac{2}{q^4} \int_0^{\infty} \Delta' \cos qx - \frac{1}{q^3} \int_0^{\infty} \Delta' x \operatorname{sen} qx \quad \text{continuyendo el procedimiento,}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_{KT}(\bar{q}) &= -\frac{2}{q^4} \Delta_{x=0} + \frac{4}{q^6} \Delta_{x=0}'' + \frac{1}{q^4} \int_0^{\infty} \Delta''' \frac{x \operatorname{sen} qx}{q} + \frac{4}{q^6} \int_0^{\infty} \Delta''' \cos qx \\
 &= -\frac{2}{q^4} \Delta_{x=0} + \frac{4}{q^6} \Delta_{x=0}'' - \frac{6}{q^8} \Delta_{x=0}^{IV} - \frac{1}{q^6} \int_0^{\infty} \Delta^{V} \left(\frac{x \operatorname{sen} qx}{q} \right) - \frac{6}{q^8} \int_0^{\infty} \Delta^{V} \frac{\cos qx}{q}
 \end{aligned}$$

$$(III.110a) = \dots = -\frac{2}{q^4} \Delta_{x=0} + \frac{4}{q^6} \Delta_{x=0}'' - \frac{6}{q^8} \Delta_{x=0}^{IV} + \frac{8}{q^{10}} \Delta_{x=0}^{VI} + \dots$$

entonces, si la condición (III.109) se cumple, la integral de (III.99) se puede estimar tomando sólo el primer término de la serie, de hecho, no es necesario que q sea mucho mayor que $\alpha = 1/|a_K|$, dado que el primer término de la serie será proporcional a $1/|a_K|q^4$ y tan sólo el siguiente, a partir del cual se cortará la serie, será proporcional a $1/|a_K|^3 q^6$, así pues se tiene que

$$(III.110b) \quad I_{kr}(\bar{q}) = \int_0^{\infty} R_{\infty}^* R_{\infty} \frac{x}{q} \operatorname{sen} qx dx \cong -\frac{2}{q^4} \Delta_{x=0}$$

Ahora restaría evaluar en $x = 0$ la función Δ de la ecuación (III.110b). De las ecuaciones (III.97a) y (III.97b), se tiene que

$$R_{\infty}\left(\frac{x}{a_k}\right) = e^{-x/|a_k|}$$

$$(III.111) \quad R_{\infty}(0) = 1$$

$$R_{\infty}^*(-ik_e x) = \frac{1}{\Gamma\left(1 - \frac{i}{k_e a_k}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{k_e a_k}\right)} \int_0^1 e^{ik_e x(2u-1)} u^{-i/(k_e a_k)} (1-u)^{i/(k_e a_k)} du$$

$$(III.112) \quad R_{\infty}^*(0) = \frac{1}{\Gamma\left(1 - \frac{i}{k_e a_k}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{k_e a_k}\right)} \int_0^1 u^{-i/(k_e a_k)} (1-u)^{i/(k_e a_k)} du$$

$$\frac{dR_{\infty}^*(-ik_e x)}{dx} = \frac{1}{\Gamma\left(1 - \frac{i}{k_e a_k}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{k_e a_k}\right)} \int_0^1 (2u-1) i k_e e^{ik_e x(2u-1)} u^{-i/(k_e a_k)} (1-u)^{i/(k_e a_k)} du$$

$$= \frac{1}{\Gamma\left(1 - \frac{i}{k_e a_k}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{k_e a_k}\right)} \int_0^1 (2u-1) i k_e u^{-i/(k_e a_k)} (1-u)^{i/(k_e a_k)} du$$

$$\begin{aligned}
 \text{(III.113)} \quad \frac{dR_{\infty}^*}{dx}(-iK_e x) &= \\
 &= \frac{iK_e}{\Gamma\left(1 - \frac{i}{K_e a_K}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{K_e a_K}\right)} \int_0^1 (2u^{1-i/(K_e a_K)} (1-u)^{i/(K_e a_K)} - u^{-i/(K_e a_K)} (1-u)^{i/(K_e a_K)}) du \\
 \frac{dR_0}{dx}\left(\frac{x}{a_K}\right) &= -\frac{1}{|a_K|} e^{-x/|a_K|}
 \end{aligned}$$

$$\text{(III.114)} \quad \frac{dR_0}{dx}(0) = -\frac{1}{|a_K|}$$

Por otro lado, utilizando la función beta [30]

$$\begin{aligned}
 \text{(III.115)} \quad \int_0^1 du \, u^{-i/(K_e a_K)} (1-u)^{i/(K_e a_K)} &= B\left(1 - \frac{i}{K_e a_K}, 1 + \frac{i}{K_e a_K}\right) \\
 &= \Gamma\left(1 - \frac{i}{K_e a_K}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{K_e a_K}\right)
 \end{aligned}$$

por lo tanto, sustituyendo en (III.112), se tiene que

$$\text{(III.116)} \quad R_{\infty}^*(0) = 1$$

Luego,

$$\begin{aligned}
 \text{(III.117)} \quad \int_0^1 u^{1-i/(K_e a_K)} (1-u)^{i/(K_e a_K)} du &= B\left(2 - \frac{i}{K_e a_K}, 1 + \frac{i}{K_e a_K}\right) \\
 &= \frac{\Gamma\left(2 - \frac{i}{K_e a_K}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{K_e a_K}\right)}{2}
 \end{aligned}$$

usando la propiedad:

$$(III.118) \Gamma(z+1) = z \Gamma(z)$$

se tiene que

$$(III.119) \int_0^1 u^{1-i/k_e a_k} (1-u)^{i/k_e a_k} du = \frac{(1-\frac{i}{k_e a_k}) \Gamma(1-\frac{i}{k_e a_k}) \Gamma(1+\frac{i}{k_e a_k})}{2}$$

Introduciendo (III.115) y este resultado en (III.113), se tiene que

$$(III.120) \frac{dR_{\infty}^*(0)}{dx} = i k_e \left(\left(1 - \frac{i}{k_e a_k} \right) - 1 \right) = \frac{1}{a_k}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \Delta_{x=0} &= \left[\frac{d}{dx} \left(R_0 \left(\frac{x}{|a_k|} \right) R_{\infty}^*(-i k_e x) \right) \right]_{x=0} \\ &= \left[\frac{dR_0 \left(\frac{x}{|a_k|} \right)}{dx} R_{\infty}^*(-i k_e x) + \frac{dR_{\infty}^*(-i k_e x)}{dx} R_0 \left(\frac{x}{|a_k|} \right) \right]_{x=0} \\ (5.121) \quad &= \left[-\frac{1}{|a_k|} + \frac{1}{a_k} \right] = -\frac{2}{|a_k|} \end{aligned}$$

Entonces, sustituyendo en I_{KT}

$$(III.122) I_{KT} = \frac{2^2}{|a_k| q^4}$$

Luego, sustituyendo en (III.99)

$$(III.123) F_{KT} = N_{0,|a_k|} N_{0,\eta} \frac{2}{|a_k| q^4}$$

Finalmente, sustituyendo en (III.89), multiplicando por 2 - por la presencia de dos electrones en la capa K - e integrando sobre q, se tiene que

$$\mathcal{G}_{KT} = \frac{2^5}{5} \pi \frac{Z_1^2 e^4}{v_i^2 \hbar^2} \frac{-1}{q^{10} |a_K|^2} |N_{0,|a_K|}|^2 |N_{0,\eta}|^2 \Big|_{q_{\min}}^{\infty}$$

$$(III.124) \quad \mathcal{G}_{KT} = \frac{2^5}{5} \frac{\pi}{a_0^2} \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{v_i^2 \hbar^2} \frac{-1}{q^{10}} |N_{0,|a_K|}|^2 |N_{0,\eta}|^2 \Big|_{q_{\min}}^{\infty}$$

donde a_0 es el radio de Bohr del hidrógeno. Luego, evaluando en límite inferior, dado por (III.103), se tiene que

$$\mathcal{G}_{KT} = \frac{2^5}{5} \frac{\pi}{a_0^2} \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{v_i^2 \hbar^2} |N_{0,|a_K|}|^2 |N_{0,\eta}|^2 \frac{\left(\frac{Z \hbar^2 E_i}{\mu}\right)^5}{(E_K + T)^{10}}$$

$$(III.125) \quad \mathcal{G}_{KT} = \frac{2^5}{5} \frac{\pi}{a_0^2} Z_1^2 Z_2^2 e^4 \hbar^8 |N_{0,|a_K|}|^2 |N_{0,\eta}|^2 \frac{v_i^8}{(E_K + T)^{10}}$$

También restaría, entonces, integrar sobre todas las posibles energías cinéticas T del electrón emitido; antes de eso, hay que tomar en cuenta el factor de normalización $N_{0,\eta}$ dado en la ecuación (III.97b). Así, utilizando propiedades de la función gamma:

$$(III.126) \quad \Gamma(1+z) = z \Gamma(z) \quad y \quad \Gamma(1-z) \Gamma(z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}$$

y que $\sin(iy) = i \sinh(y)$, se llega a que

$$(III.127) \quad |\Gamma(1+i\eta)|^2 = \frac{2\pi \eta}{(e^{\pi|\eta|} - e^{-\pi|\eta|})}$$

Por lo tanto,

$$(III.128) \quad |N_{0,\eta}|^2 = 2\pi |\eta| \frac{e^{\pi|\eta|}}{(e^{\pi|\eta|} - e^{-\pi|\eta|})} = 2\pi |\eta| \frac{1}{1 - e^{-2\pi|\eta|}}$$

Definiendo C como:

$$(III.129) \quad C = \frac{2^5}{5} \frac{\pi}{a_0^2} Z_1^2 Z_2^2 e^4 \hbar^8 |N_0| a_K |^2 v_c^8$$

y utilizando la ec.(III.95) se tiene que

$$(III.130) \quad \mathcal{T} = C \int_0^{T_{\text{máx}}} |N_0 \eta|^2 \frac{dT}{(E_K + T)^{10}}$$

$$= C \int_0^{T_{\text{máx}}} 2\pi \frac{1}{k_e |a_K|} \frac{1}{1 - e^{-2\pi/(k_e |a_K|)}} \frac{dT}{(E_K + T)^{10}}$$

Además, con las ecuaciones (III.92) y (III.95), se pueden relacionar λ con k_e , y ésta a su vez con la energía cinética T del electrón, de tal manera que se puede hacer el siguiente cambio de variable en (III.130):

$$(III.131) \quad T = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2 m_e}, \quad dT = \frac{2 k_e dk_e \hbar^2}{2 m_e}$$

con lo que se obtiene ($v = \hbar^2/2m_e$)

$$(III.132) \quad \mathcal{T} = C \frac{2\pi \hbar^2}{m_e |a_K|} \int_0^{(k_e)_{\text{máx}}} \frac{1}{1 - e^{-2\pi/(k_e |a_K|)}} \frac{dk_e}{(E_K + v k_e^2)^{10}}$$

Para poder evaluar esta integral, será necesario hacer una aproximación del primer factor del integrando, es decir, en el que aparece la función exponencial. Así pues, véase que si k_e toma valores desde 0 hasta $(k_e)_{\text{máx}}$, entonces, el exponente de e toma valores desde $-\infty$ hasta $-2\pi/((k_e)_{\text{máx}} |a_K|)$; se verá, pues, que dicha exponencial en dicho intervalo siempre será un número mucho menor que 1. En el límite inferior de k_e , la exponencial sería estrictamente 0; para el límite superior, véase, de (III.106) y de (III.131), que

$$(III.133) \quad \frac{1}{(k_e)_{\max} |a_k|} = \frac{\sqrt{2m_e E_k}}{\sqrt{\hbar^2}} \left(\frac{\sqrt{\hbar^2}}{\sqrt{2m_e T}} \right) = \sqrt{\frac{E_k}{T_{\max}}}$$

Por lo tanto, de las ecuaciones (I.37) y (I.47), se tiene que

$$(III.134) \quad \frac{1}{(k_e)_{\max} |a_k|} = \left(\frac{n^2}{4} \right)^{1/2} = \frac{n}{2} \quad n \lesssim 10$$

Se tiene, entonces, que en el caso extremo que $n = 1$, $1/((k_e)_{\max} |a_k|) = 1/2$; en ese caso, la exponencial $e^{-2\pi/((k_e)_{\max} |a_k|)}$ alcanza su valor máximo que sería apenas de ~ 0.04 . Por ello, dicha exponencial se considerará como un número x mucho menor que 1, de tal manera que el primer factor del integrando pueda ser expresado como una serie binomial, esto es

$$(III.135) \quad (1 - x)^{-1} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots \quad (x^2 \ll 1)$$

Entonces, dada la pequeñez de los valores que toma la exponencial, la serie puede ser cortada en el segundo término y así, la integral de (III.132) puede ser aproximada como la suma de un término dominante más una pequeña corrección:

$$(III.136) \quad \mathcal{T} = C \frac{2\pi \hbar^2}{m_e |a_k|} \left[\int_0^{(k_e)_{\max}} \frac{dk_e}{(E_k + \nu k_e)^{10}} + \int_0^{(k_e)_{\max}} \frac{dk_e e^{-2\pi/(k_e |a_k|)}}{(E_k + \nu k_e^2)^{10}} \right]$$

Si uno se queda con el primer sumando, todavía es posible hacer otra aproximación sobre esa integral. Resulta que, se puede simplificar el cálculo de la primera integral si se considera una integración de 0 a ∞ , en lugar que de 0 a $(k_e)_{\max}$. Esto se puede hacer pues, el integrando tiende rápidamente a cero a medida que k_e crece. De esta manera, integrando hasta infinito (ver [36] Pág. 274 y 296, ecs. (92) y (404)) se llega a que

$$(III.137) \quad \mathcal{T} = C \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_e |a_k|} \left[\frac{34 \cdot 30 \cdot \dots \cdot 2}{9 \cdot 8 \cdot \dots \cdot 1} \right] \frac{1}{4^9 E_k^9} \frac{1}{\sqrt{E_k}} \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \right)^{-1/2}$$

$$\mathcal{T} = C \frac{\pi^2}{4^9} \left[\frac{34 \cdot 30 \cdot \dots \cdot 2}{9 \cdot 8 \cdot \dots \cdot 1} \right] \frac{1}{E_k^9} = 1.83 C \frac{1}{E_k^9}$$

Es así como de aquí se llega a la fórmula que se buscaba [27], sustituyendo C (ver ec.(III.129))

$$(5.138) \quad \sigma = C_K \frac{Z_1^2 Z_2^2 v_i^8}{E_K^4}$$

donde C_K es una constante que depende del elemento blanco, esto es, de $|N_{0,|a_K|}|$, ver ec.(III.97a):

$$(III.138a) \quad C_K = \frac{2^7}{5} \pi e^4 \hbar^8 (1.83) \frac{Z_1^6}{a_0^5}$$

Como se puede ver en (III.138), se tienen involucradas tres cantidades relacionadas entre sí: Z_2 , E_K y C_K , hay, entonces, que escribirla en términos de variables independientes:

$$(III.139) \quad \sigma = C' \cdot \frac{Z_1^2}{Z_2^{13}} v_i^8$$

donde ahora los parámetros de (III.139) son independientes entre sí y C' no depende de ningún parámetro:

$$(III.140) \quad C' = \frac{2^7}{5} \frac{\pi}{a_0^5 E_0^4} e^4 \hbar^8 (1.83)$$

Volviendo a la ecuación (III.130), si uno repara en la expresión que finalmente se obtiene para la sección transversal (III.137), es posible escribir la forma integral de ésta de tal manera que, más adelante, se pueda relacionar con la que se obtiene tomando en cuenta la deflexión coulombiana. Para ello, véase primero que, haciendo la misma aproximación de (III.135) para (III.136), el factor de normalización $|N_{0,\eta}|^2$ puede escribirse como:

$$(III.141) \quad |N_{0,\eta}|^2 \approx 2\pi\eta = \frac{2\pi}{k_e |a_K|} \quad n \lesssim 10$$

este factor de normalización varía, entonces, de ∞ (en $T = 0$) a $n\pi$ (en $T = T_{\max.}$), para $n \lesssim 10$. Sin embargo, el integrando, escrito en términos de k_e , es finito para toda k_e . De este modo, se puede interpretar que dicho factor puede salir de la

integral como un valor promedio que lo represente justo en la integral de (III.130). Así, la expresión integral de la sección transversal puede ser escrita como:

$$(III.142) \quad \bar{T} = 9(1.83)C \int_{0}^{T_{\text{máx}}} \frac{dT}{(E_k + T)^{1.0}}$$

Finalmente, otra vez, debido a la naturaleza del integrando de (III.142), la integral se puede extender hasta ∞ :

$$(5.143) \quad \bar{T} = 9(1.83)C \int_{0}^{\infty} \frac{dT}{(E_k + T)^{1.0}} = 1.83C \frac{1}{E_k^0}$$

IV. LA SECCIÓN TRANSVERSAL PARA TRAYECTORIAS HIPERBÓLICAS DEL PROYECTIL.

a) APROXIMACIONES USADAS EN LA IONIZACIÓN DE LA CAPA K POR PARTÍCULAS PESADAS

El carácter del proceso de la ionización de la capa K por partículas cargadas y pesadas se ha visto que depende de las relaciones entre k_e , α , a , y $q_{\min}$. Donde $\hbar k_e$ es el momento del electrón emitido y $\alpha = Z_2 e^2 m / \hbar^2$ es el inverso del radio de la capa K del electrón, $a = Z_1 Z_2 e^2 / 2E_i$ (ver ec.(I.26)), y $q_{\min}$ es el mínimo momento transferido por el proyectil, el cual, de la ecuación (III.103), se ve que se puede escribir como:

$$(IV.1) \quad q_{\min} = \frac{E_{\text{per}}}{\hbar v_i} \quad E_{\text{per}} = E_K + T$$

donde T es la energía cinética del electrón emitido y $E_K = Z_2^2 e^4 m / 2\hbar^2$ es, como antes, la energía de ligadura del electrón de la capa K.

Es de interés notar que los valores relativos de α , a y $q_{\min}$ están ampliamente determinados por el parámetro χ , dado por la ec. (II.14). Así pues, si se define ξ_0 (ver Cáp. I) como el valor de $\xi = a q_{\min}$ para $E_{\text{per}} = E_K$, se tiene que

$$(IV.2) \quad a\alpha = \frac{1}{4Z_1} \frac{m_e}{m_p} \chi^2$$

$$(IV.3) \quad \xi_0 = \left(\frac{1}{4Z_1} \right)^2 \frac{m_e}{m_p} \chi^3$$

y

$$(IV.4) \quad \frac{a\alpha}{\xi_0} = \left(\frac{\alpha}{q_{\min}^{\max}} \right) = \frac{4Z_1}{\chi}$$

Para dichas cantidades uno tiene cuatro posibilidades - correspondiendo, en el orden mencionado, al incremento en la energía del proyectil - :

$$(IV.5) \ 1) \ \frac{1}{q_{min}} < \frac{1}{\alpha} < a \quad , \quad \chi > 2 \sqrt{\frac{m_p}{m_e} Z_1}$$

De acuerdo con la ec. (I.31), tomando en cuenta que $Z_1 \ll Z_2$, para que se dé la ionización es necesario que se cumpla que $2a \leq 1/\alpha$, por lo tanto, dicho proyectil es incapaz de acercarse lo suficiente como para que se dé la ionización. Más aún, de (IV.26) y la fórmula dada para α , se tiene que si $a > Z_1/\alpha$, incluso entonces, $E_K > E_i$, así pues, la ionización sería imposible. Luego,

$$(IV.6) \ 2) \ \frac{1}{q_{min}} < a < \frac{1}{\alpha} \quad , \quad 2 \sqrt{\frac{m_p}{m_e} Z_1} > \chi > 4Z_1 \quad ; \quad (\xi > 1)$$

Para tales energías, el proyectil podría alcanzar la distancia umbral para que se diera la ionización (ver ec. (I.31)), sin embargo, la probabilidad de ionización se verá fuertemente afectada por la deflexión coulombiana, ya que, como se puede ver del caso 2., $a_{q_{min}} > 1$, de ese modo, como se vio en el capítulo I., esto significa que el proyectil es desviado de su trayectoria inicial, describiendo una hipérbola de excentricidad considerable y provocando que el proyectil se acerque menos de lo que lo haría si no fuese desviado. Luego,

$$(IV.7) \ 3) \ a < \frac{1}{q_{min}} < \frac{1}{\alpha} \quad , \quad \chi > 4Z_1 \quad ; \quad (\xi < 1)$$

En este caso, otra vez, el proyectil puede acercarse lo suficiente para que se dé la ionización, dado que nuevamente $a < 1/\alpha$. Por otro lado, la deflexión coulombiana todavía tiene cierta importancia, pues más adelante, se verá que sólo llega a ser despreciable en caso que $\xi \rightarrow 0$. Finalmente,

$$(IV.8) \ 4) \ a < \frac{1}{\alpha} < \frac{1}{q_{min}} \quad , \quad \chi \ll 4Z_1$$

Aquí, el proceso de ionización no puede ser tratado por métodos semiclásicos, ya que la velocidad del proyectil sería mucho mayor que la del electrón de la capa K, por lo tanto, sería cercana a la velocidad de la luz [19, 16].

Así pues, como se puede ver, este trabajo abarca básicamente los casos 2 y 3. (Cáp. III), mientras que esta sección, donde se va a suponer que la deflexión coulombiana es importante, esencialmente se apega al caso 2), en el cual χ (ver ec. (IV.7)) se ajusta a la condición (II.14) y, por lo tanto, nos garantiza que el número n (ver ec. (I.37)) de veces que es más grande la velocidad del electrón, respecto a la del proyectil, es suficientemente grande como para asegurar que (ver ec. (III.108))

$$(IV.9) \quad \frac{\alpha}{q_{\min}} \ll 1$$

Por otro lado, la relación entre el número de onda, k_e , del electrón emitido y el inverso del radio de la capa K, α , se puede escribir de la siguiente manera:

$$(IV.10) \quad \frac{k_e}{\alpha} = \frac{(2m_e T)^{1/2}}{\hbar} \frac{\hbar}{(2m_e E_K)^{1/2}} = \left(\frac{T}{E_K} \right)^{1/2}$$

Utilizando las ecs. (I.37) y (I.38) o (I.46), se tiene que

$$(IV.11) \quad \left(\frac{k_e}{\alpha} \right)_{\max} = 4 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} \frac{m_e}{m_p} \right)$$

de este modo, si, como ya se vio, n es grande, entonces, también se tiene que

$$(IV.12) \quad \left(\frac{k_e}{\alpha} \right) \ll 1$$

Por lo tanto, de la ecs. (IV.9) y (IV.12), se tendría también que

$$(IV.13) \quad \left(\frac{k_e}{q_{\min}} \right) \ll 1$$

Finalmente, para poder suponer que el átomo-blanco, el cual es neutro, permanece en una posición fija y que no es afectado por la presencia del proyectil; para poder suponer que el proyectil describe una hipérbola con foco en la posición del átomo-blanco y para garantizar que la masa del proyectil, m_p , es aproximadamente

igual a la masa reducida del sistema, μ , se pedirá que la masa del átomo-blanco sea mucho mayor que la masa del proyectil, lo cual, implícitamente, implica que la carga del proyectil sea mucho menor que la carga del átomo-blanco, $Z_1 \ll Z_2$.

La tabla IV.1 muestra los valores de los diversos parámetros para algunos casos experimentalmente investigados por bombardeo con protones [19].

TABLA IV.1

Elemento	Z_2	E_i (keV)	χ	ξ_0	$a\alpha$
Fe	25	140	21.8	0.28	0.051
		1300	7.2	0.0094	0.0052
Mo	42	240	26.8	0.56	0.084
		1600	10.5	0.033	0.013
		2400	8.6	0.018	0.0083
Pb	82	1920	18.6	0.21	0.046

b) TRATAMIENTO PERTURBATIVO DEPENDIENTE DEL TIEMPO Y A PRIMER ORDEN DE LA IONIZACIÓN DE LA CAPA K PARA EL CÁLCULO DE LA SECCIÓN TRANSVERSAL PARA TRAYECTORIAS HIPERBÓLICAS

1)PROCEDIMIENTO GENERAL

De las ecs. (II.34) y (II.37) se tiene que la sección transversal para la emisión de un electrón atómico con energía cinética final T está dado por la expresión general:

$$(IV.14) \quad \frac{d\sigma}{dT} = \frac{2\pi}{\hbar^2} Z_1^2 e^4 \int_0^\infty p dp \left| \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle \psi_k | \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} | \psi_r \rangle \right|^2$$

donde ε es la excentricidad de la trayectoria hiperbólica del proyectil (Cáp. I), suponiendo que el núcleo-blanco, centro dispersor del proyectil, se encuentra en el foco F (ver Fig. IV.1). Por otro lado, de la ec.(I.8) se tiene que

Además, en el capítulo I, también se vio que $O'A = a$ y que $O'F = a\varepsilon$. Con esto ya se puede determinar el parámetro de impacto p en términos de estas cantidades. Entonces, tomando en cuenta que el parámetro de impacto se puede ver como la distancia recta [46, Pág.63] entre la asíntota l_1 [46 Pág.79] y el núcleo-blanco (el punto F), situado en $O(0,0)$, donde se cruzan los ejes XY ; se va a definir la asíntota l_1 como

$$(IV.16) \quad \begin{aligned} l_1 : -\sqrt{\varepsilon^2 - 1}(x - a\varepsilon) - y &= 0 \\ l_1 : -\sqrt{\varepsilon^2 - 1}x + \sqrt{\varepsilon^2 - 1}a\varepsilon - y &= 0 \end{aligned}$$

Por lo tanto, la distancia recta entre O y l_1 , es decir p , es

$$(IV.17) \quad p = \frac{-\sqrt{\varepsilon^2 - 1}(0) + (-1)(0) + \sqrt{\varepsilon^2 - 1}a\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - 1 + 1}} = a\sqrt{\varepsilon^2 - 1}$$

de donde se obtiene que

$$(IV.18) \quad dp = a(\varepsilon^2 - 1)^{-1/2} \varepsilon d\varepsilon$$

y, por lo tanto,

$$(IV.19) \quad p dp = a^2 \varepsilon d\varepsilon$$

Por otro lado, se tiene que el término $1/|r-R(t)|$ puede ser expandido como [47]

$$(IV.20) \quad \begin{aligned} \frac{1}{|r - R(t)|} &= \frac{1}{r_> \left[1 + \left(\frac{r_<}{r_>} \right)^2 - 2 \frac{\vec{r}_> \cdot \vec{r}_<}{r_>^2} \right]^{1/2}} \\ &= \frac{1}{r_> \left(1 + \frac{1}{2} \left[\frac{r_<^2}{r_>^2} - 2 \frac{\vec{r}_> \cdot \vec{r}_<}{r_>^2} \right] - \frac{1}{4} \frac{1}{2!} \left[\frac{r_<^2}{r_>^2} - 2 \frac{\vec{r}_> \cdot \vec{r}_<}{r_>^2} \right]^2 + \dots \right)} \end{aligned}$$

Donde se ha definido $r_>$ como el más grande entre r y $R(t)$ y $r_<$ como el menor entre estos mismos. Así pues, este capítulo se confinará a sólo considerar el término monopolar en el potencial, asumiendo que este término es el dominante para $\alpha \ll$

$q_{\min.}$, o equivalentemente, cuando la velocidad del electrón es mucho mayor que la velocidad del proyectil. Entonces, por esta razón y dada la ec. (IV.19) y la ec. (IV.14), se tiene que

$$(IV.21) \quad \frac{d\sigma_{KT}}{dT} = \frac{2\pi}{\hbar^2} a^2 Z_1^2 e^4 \int_1^\infty \epsilon d\epsilon \left| \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \langle \psi_T | \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{R(t)}, r < R \\ \frac{1}{r}, r > R \end{array} \right\} | \psi_K \rangle \right|^2$$

Luego, para evaluar las integrales de la ec.(IV.21) se va a usar una representación paramétrica empleada por, entre otros, TER-MARTIROSYAN[40]:

$$(IV.22) \quad \begin{aligned} X &= a (\cosh w + \epsilon) \\ y &= a \sqrt{\epsilon^2 - 1} \sinh w \\ Z &= 0 \end{aligned}$$

ESTA TESIS NO SALF
DE LA BIBLIOTECA

$$t = \frac{a}{v_i} (\epsilon \sinh w + w)$$

Donde $w \in (-\infty, \infty)$. Cuando $w = -\infty$ se tiene la representación del proyectil en la región asintótica mucho antes de la colisión; mientras que en $w = \infty$, se tiene la representación del proyectil mucho después de la colisión, también en la región asintótica. Entonces, insertando en la ec.(IV.21) las funciones de onda de los estados final e inicial del electrón, ψ_T y ψ_K respectivamente, con momento angular $l = 0$ (ver Cáp. III), dadas por las ecs.(III.97a) y (III.97b) [34], se obtiene que

$$(IV.23) \quad \frac{d\sigma_{KT}}{dT} = \frac{2\pi}{\hbar^2} a^2 Z_1^2 e^4 |N_{0,1a\kappa 1}|^2 |N_{0,1}|^2 \frac{1}{(4\pi)^2} \int_1^\infty \epsilon d\epsilon \left| \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \right|^2$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\Gamma(1-i\eta)\Gamma(1+i\eta)} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^1 du (1-u)^{-i\eta} u^{i\eta} \left[\int_0^R \frac{dr}{r} r^2 e^{-rb} + \int_R^\infty dr r e^{-rb} \right] \right\}^2$$

Donde b se define como

$$(IV.24) \quad b = \alpha - i k_e + 2i k_e u$$

La integración sobre φ , I_φ , la integración sobre θ , I_θ , y la integración sobre r , I_r , se pueden llevar a cabo fácilmente y se obtiene que

$$(IV.25) \quad \frac{d\Gamma_{KT}}{dT} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \alpha^2 Z^2 e^4 |N_{0,1a_{K1}}|^2 |N_{0,\eta}|^2 \int_0^\infty \epsilon d\epsilon$$

$$\times \left| \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \left\{ \int_0^1 du (1-u)^{-i\eta} u^{i\eta} \frac{1}{\Gamma(1-i\eta)\Gamma(1+i\eta)} \left[\frac{2}{Rb^3} - \frac{e^{-bR}}{b^2} \left(1 + \frac{2}{Rb} \right) \right] \right\} \right|^2$$

Donde I_r es aquello que está encerrado en los paréntesis cuadrados. Para integrar sobre el tiempo se deben usar las expresiones de la ec. (IV.22) para sustituir las variables t ($dt = d/v_1 \{ \epsilon \cosh w + 1 \} dw = \{ R/v_1 \} dw$) y R , e integrar sobre w ; mientras que de la ec. (IV.1), ω puede ser escrita (ver Cap. II) como $\omega = E_{pcr}/\hbar \approx q_{min}.v_1$. Entonces, recordando que $aq_{min} = \xi$ (ver ec. I.51) y multiplicando por el momento y arbitrariamente por v_i se tiene que

$$(I.26) \quad v_i \dot{I}_t = v_i \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} I_R = \int_{-\infty}^\infty dw e^{i\xi(\epsilon \sinh w + w)} \left[\frac{2}{b^3} - \frac{e^{-b\alpha(\epsilon \cosh w + 1)}}{b^2} \left\{ \alpha(\epsilon \cosh w + 1) + \frac{2}{b} \right\} \right]$$

$$V_i I_t = \frac{2}{b^3} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{i\xi(\epsilon \sinh w + w)} - \left(\frac{2}{b^3} + \frac{a}{b^2} \right) e^{-ba} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{i\xi(\epsilon \sinh w + w) - ba \epsilon \cosh w} \\ - \frac{a\xi}{b^2} e^{-ba} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{i\xi(\epsilon \sinh w + w) - ba \epsilon \cosh w} \cosh w$$

Ahora, se van a representar estas integrales en términos de lo que se llaman funciones de Bessel modificadas de tercera clase y de orden complejo [39, 19]. Para ello, hay que identificar las cuatro integrales que se tienen. Así pues, primero se tiene

$$(IV.27) \quad I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{i\xi \epsilon \sinh w + i\xi w}$$

haciendo la transformación

$$w \rightarrow -w'$$

se tiene que (ver [39] Pág. 182, ec.(10))

$$(IV.28) \quad I_1 = 2e^{-\frac{\pi}{2}\xi} K_{i\xi}(\epsilon\xi)$$

La integral I_2 sería

$$(IV.29) \quad I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{i\xi(\epsilon \sinh w + w) - ba \epsilon \cosh w}$$

Para la cual se hace el siguiente cambio de variable

$$e^w = y$$

De donde se obtiene, utilizando la definición del $\sinh$ y $\cosh$ en términos de exponenciales, que

$$I_2 = \int_0^{\infty} \frac{dy}{y} e^{\frac{i\xi}{2}(y - \frac{1}{y})} y^{i\xi} e^{-\frac{ba\xi}{2}(y + \frac{1}{y})}$$

$$(IV.30) \quad I_2 = \int_0^{\infty} \frac{dy}{y^{1-i\xi}} e^{\frac{\xi}{2}[-y(-i\xi + ba) - \frac{1}{y}(i\xi + ba)]}$$

Ahora, si se hace la sustitución

$$y(\xi/2)(ba - i\xi) = t$$

se obtiene

$$(IV.31) \quad I_2 = \left(\frac{2}{\xi} \frac{1}{ba - i\xi} \right)^{i\xi} \int_0^{\infty} \frac{dt}{t^{1-i\xi}} e^{[-t - \frac{\xi^2}{4t}(b^2 a^2 + \xi^2)]}$$

Por lo tanto (ver [39] Pág. 183, ec. (15)),

$$(IV.32) \quad I_2 = 2 \left(\frac{\sqrt{b^2 a^2 + \xi^2}}{ba - i\xi} \right)^{i\xi} K_{-i\xi}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2}) =$$

$$= 2 \left(\frac{ba + i\xi}{ba - i\xi} \right)^{i\xi/2} K_{-i\xi}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2})$$

Para I_3 e I_4 se utiliza que $\cosh w = (e^w + e^{-w})/2$, entonces se tiene que

$$(IV.33) \quad I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{-i\xi(\xi \sinh w + w) + w - ba\xi \cosh w}$$

y

$$(IV.34) \quad I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{-i\xi(\epsilon \sinh w + w) - w - ba\xi \cosh w}$$

Tratándolas de la misma manera en que fue tratada I_2 , se obtiene que

$$(IV.35) \quad I_3 = 2 \left(\frac{ba + i\xi}{ba - i\xi} \right)^{\frac{1+i\xi}{2}} K_{-1-i\xi}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2})$$

mientras que

$$(IV.36) \quad I_4 = 2 \left(\frac{ba + i\xi}{ba - i\xi} \right)^{\frac{-1+i\xi}{2}} K_{1-i\xi}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2})$$

Finalmente, sustituyendo I_1 , I_2 , I_3 y I_4 , y utilizando la propiedad: $K_{-\nu}(x) = K_{\nu}(x)$ (ver [39] Pág. 79, ec.(8)), se tiene que la ec. (IV.26) se transforma en

$$(IV.37) \quad \begin{aligned} v_i I_t = & 4b^{-3} e^{-\frac{\pi}{2}\xi} K_{i\xi}(\xi\xi) - 2b^{-2}(a+2b^{-1}) e^{-ba} \left(\frac{ba+i\xi}{ba-i\xi} \right)^{\frac{i\xi}{2}} K_{i\xi}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2}) - \\ & - ab^{-2} e^{-ba} \xi \left\{ \left(\frac{ba+i\xi}{ba-i\xi} \right)^{\frac{i\xi+1}{2}} K_{i\xi+1}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2}) + \right. \\ & \left. + \left(\frac{ba+i\xi}{ba-i\xi} \right)^{\frac{i\xi-1}{2}} K_{i\xi-1}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2}) \right\} \end{aligned}$$

o bien, factorizando primero y luego utilizando la propiedad de que $K_{\nu-1}(x) - K_{\nu+1}(x) = -(2\nu/x)K_{\nu}(x)$ (ver [39], Pág. 79 ec.(1)), se obtiene que

$$(IV.38) \quad v_i I_t =$$

$$\begin{aligned}
&= 2b^{-3} \left\{ 2e^{-\frac{\pi}{2}\xi} K_{i\xi}(\xi\xi) - (2+ab)e^{-ba} \left(\frac{ba+i\xi}{ba-i\xi} \right)^{\frac{i\xi}{2}} K_{i\xi}(\xi\sqrt{b^2a^2+\xi^2}) - \right. \\
&\quad - ab\xi e^{-ba} \left[\left(\frac{ba+i\xi}{ba-i\xi} \right)^{\frac{i\xi+1}{2}} \left[\frac{K_{i\xi-1}(\xi\sqrt{b^2a^2+\xi^2})}{2} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \frac{i\xi}{\xi\sqrt{b^2a^2+\xi^2}} K_{i\xi}(\xi\sqrt{b^2a^2+\xi^2}) \right] + \left(\frac{ba+i\xi}{ba-i\xi} \right)^{\frac{i\xi-1}{2}} \frac{K_{i\xi-1}(\xi\sqrt{b^2a^2+\xi^2})}{2} \right] \left. \right\}
\end{aligned}$$

agrupando y simplificando finalmente se obtiene que

$$\begin{aligned}
(IV.39) \quad v_i I_t &= 2b^{-3} \left\{ 2e^{-\frac{\pi}{2}\xi} K_{i\xi}(\xi\xi) - e^{-ba} \left(\frac{ba+i\xi}{ba-i\xi} \right)^{\frac{i\xi}{2}} \right. \\
&\quad \times \left[\left(2 + \frac{b^2a^2}{ba-i\xi} \right) K_{i\xi}(\xi\sqrt{b^2a^2+\xi^2}) + \frac{\xi b^2a^2}{\sqrt{b^2a^2+\xi^2}} K_{i\xi-1}(\xi\sqrt{b^2a^2+\xi^2}) \right] \left. \right\}
\end{aligned}$$

Hasta este punto el desarrollo es exacto. A continuación se harán aproximaciones que estarán basadas en las condiciones (IV.9) y (IV.12). Esto es

$$(IV.40) \quad \frac{|b|a}{\xi} = \frac{|\alpha - iK_e(1+2u)|}{q_{\min}a} = \frac{\sqrt{\alpha^2 + K_e^2(1+2u)^2}}{q_{\min}}$$

Considerando (IV.12) y que $u: [0, 1]$ se tiene que

$$(IV.41) \quad \frac{|b|a}{\xi} \approx \frac{\alpha}{q_{\min}}$$

Y, de acuerdo con (IV.9), se obtiene luego que

$$(IV.42) \quad \frac{\alpha}{q_{\min}} \approx \frac{|b|a}{\xi} \ll 1, \quad |b|a = \alpha a$$

Ahora, con esto, se hará la siguiente aproximación

$$(IV.43) \left(\frac{ba + i\xi}{ba - i\xi} \right)^{1/2} = (-1)^{1/2} \left(\frac{-ba + i\xi}{ba + i\xi} \right)^{-1/2}$$

Por otro lado, utilizando (IV.42), se tiene que

$$(IV.44) \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^2 (ba + i\xi) \approx -ba + i\xi \Rightarrow \left(\frac{ba + i\xi}{ba - i\xi} \right)^{1/2} = (-1)^{1/2} \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-1}$$

elevando a la $i\xi$ -ésima potencia y utilizando que para un cierto número b ($= i\xi/2$, en este caso), irracional o con parte imaginaria distinta de cero, y un número complejo a ($= -1$ y $\arg a = \pi$ en este caso), se tiene que (ver [33] Pág.44, Prop. 1.3.10): $a^b = e^{b \log a + 2\pi i n b}$, donde $\log a = \log |a| + i \arg a$, y $n = 0$ si $\arg a \in [-\pi, \pi]$ o $[0, 2\pi]$ (ver [33] Pág.45). Así pues, se tiene que

$$(IV.45) \left(\frac{ba + i\xi}{ba - i\xi} \right)^{i\xi/2} = (-1)^{i\xi/2} \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-i\xi} = e^{\frac{i\xi}{2} \log(-1)} \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-i\xi} =$$

$$= e^{\frac{i\xi}{2} (\log |1| + i\pi)} \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-i\xi} = e^{-\frac{\pi}{2} \xi} \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-i\xi}$$

Por otro lado, de acuerdo con un teorema de multiplicación para funciones de Bessel (ver [38] 7.15 ec.(19)) se tiene que

$$(IV.46) \frac{K_\nu(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2})}{(\sqrt{b^2 a^2 + \xi^2})^\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{\xi b^2 a^2}{2} \right)^n \frac{1}{\xi^{\nu+n}} \frac{K_{\nu+n}(\xi \xi)}{n!}$$

Como se puede ver, esta expansión converge rápidamente si la condición (IV.42) se cumple. Así pues, utilizando que $K_\nu(x) = K_{-\nu}(x)$ y pasando el denominador del lado izquierdo de la ec. (IV.46) a la derecha, las rápidamente convergentes expansiones para $K_{i\xi}(\xi[b^2 a^2 + \xi^2]^{1/2})$ y para $K_{i\xi-1}(\xi[b^2 a^2 + \xi^2]^{1/2})$, escritas explícitamente hasta $n=2$ y $n=1$, respectivamente, resultan ser

$$(IV.47a) K_{i\xi}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2}) =$$

$$= \left\{ \left(\sqrt{\frac{b^2 a^2}{\xi^2} + 1} \right)^{-i\xi} K_{i\xi}(\xi\xi) - \left(\frac{\xi b^2 a^2}{2\xi} \right) \left(\sqrt{\frac{b^2 a^2}{\xi^2} + 1} \right)^{-i\xi} K_{-i\xi+1}(\xi\xi) \right. \\ \left. + \frac{\xi^2 b^4 a^4}{8\xi^2} \left(\sqrt{\frac{b^2 a^2}{\xi^2} + 1} \right)^{-i\xi} K_{-i\xi+2}(\xi\xi) + \dots \right\}$$

$$(IV.47b) K_{i\xi-1}(\xi \sqrt{b^2 a^2 + \xi^2}) =$$

$$\left\{ \left(\sqrt{\frac{b^2 a^2}{\xi^2} + 1} \right)^{1-i\xi} K_{-i\xi+1}(\xi\xi) - \frac{\xi b^2 a^2}{2\xi} \left(\sqrt{\frac{b^2 a^2}{\xi^2} + 1} \right)^{1-i\xi} K_{-i\xi+2}(\xi\xi) + \dots \right\}$$

Otra vez, tomando en cuenta que la condición (IV.42) se cumple, las raíces cuadradas elevadas a $(-i\xi)$ y $(1-i\xi)$, respectivamente, de (IV.47a) y (IV.47b) pueden ser reducidas a la unidad, así pues, el término encerrado en los paréntesis cuadrados de la ec.(IV.39), puede ser escrito como

$$(IV.48) \left[\right] = \left(2 + \frac{b^2 a^2}{ba - i\xi} \right) K_{i\xi}(\xi\xi) + \\ + \frac{\xi b^2 a^2}{\xi} \left(-1 - \frac{b^2 a^2}{2(ba - i\xi)} + \frac{1}{\sqrt{\frac{b^2 a^2}{\xi^2} + 1}} \right) K_{-i\xi+1}(\xi\xi) \\ + \frac{\xi^2 b^4 a^4}{2\xi^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{b^2 a^2}{4(ba - i\xi)} - \frac{1}{\sqrt{\frac{b^2 a^2}{\xi^2} + 1}} \right) K_{-i\xi+2}(\xi\xi) + \dots$$

Nuevamente, utilizando (IV.42) en (IV.48), ahora para aproximar las raíces cuadradas - que en ella aparecen - a la unidad, y sustituyendo lo que de ello resulte sobre (IV.39), así como sustituyendo también el resultado de (IV.45) en (IV.39), se tiene que

$$\begin{aligned}
 \text{(IV.49)} \quad I_b &= 2e^{-\frac{\pi}{2}\xi} b^{-3} \left\{ 2K_{i\xi}(\xi\xi) - e^{-ba} \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-i\xi} \right. \\
 &\quad \times \left[\left(2 + \frac{b^2 a^2}{ba - i\xi} \right) K_{i\xi}(\xi\xi) - \frac{b^4 a^4}{ba - i\xi} \frac{\xi}{2\xi} K_{-i\xi+1}(\xi\xi) \right. \\
 &\quad \left. \left. + \left(-2 + \frac{b^2 a^2}{ba - i\xi} \right) \frac{b^4 a^4}{8\xi^2} K_{-i\xi+2}(\xi\xi) + \dots \right] \right\}
 \end{aligned}$$

Ahora, utilizando otra vez que $a^b = e^{b \log a + 2\pi i n b}$ donde $n = 0$ si $\arg a \in [-\pi, \pi]$ o $[0, 2\pi]$, se tiene que

$$\text{(IV.50)} \quad \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-i\xi} = e^{-i\xi \ln \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)}$$

Luego, utilizando la expansión del $\ln(1+x)$ cuando $|x| < 1$:

$$\text{(IV.51)} \quad \ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 + \dots$$

se obtiene que

$$\text{(IV.52)} \quad \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-i\xi} = e^{-i\xi \ln \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)} = e^{ba} \left(e^{\frac{i\xi}{2} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^2 + \frac{i\xi}{3} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^3 + \frac{i\xi}{4} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^4} \right)$$

Ahora, utilizando la expansión de e^x , se obtiene que

$$\begin{aligned}
 \text{(IV.53)} \quad \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)^{-i\xi} &= e^{-i\xi \ln \left(1 - \frac{ba}{i\xi} \right)} = \\
 &= e^{ba} \left\{ 1 + \left[\frac{i\xi}{2} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^2 + \frac{i\xi}{3} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^3 + \frac{i\xi}{4} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^4 + \dots \right] + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2!} \left[\frac{i\xi}{2} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^2 + \frac{i\xi}{3} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^3 + \frac{i\xi}{4} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^4 + \dots \right]^2 + \dots \right\}
 \end{aligned}$$

$$= e^{ba} \left(1 + \frac{i\xi}{2} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^2 + \frac{i\xi}{3} \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^3 + \left(\frac{i\xi}{4} - \frac{\xi^2}{8} \right) \left(\frac{ba}{i\xi} \right)^4 + \dots \right)$$

Insertando esta expresión en (IV.49) y tomando en cuenta que $|b|a \approx \alpha a = Z_1 E_K / E_i$ debe ser un número considerablemente menor que 1 para que se dé la ionización y que, más aún, es mucho menor que ξ , se pueden aproximar los denominadores de la ec. (IV.49) a ser puramente imaginarios y, además, a partir de k_1' , sólo tomar el primer factor (ver ec.(IV.48))

$$(IV.54a) \quad v_i I_t = 2b^{-3} e^{-\frac{\pi}{2}\xi} \sum_{n=0}^{\infty} k_n' \varepsilon^n K_{-i\xi+n}(\varepsilon\xi)$$

$$k_0' = -2 \frac{b^3 a^3}{3\xi^2} + \frac{b^4 a^4}{\xi^2} \left(\frac{i}{2\xi} - \frac{1}{4} \right) \quad k_1' = i \frac{b^4 a^4}{2\xi^2}$$

$$(IV.54b) \quad k_n' = \frac{n-1}{2^{n-1} n!} \left(-\frac{b^2 a^2}{\xi} \right)^n \quad (\text{válido para } n \geq 2)$$

Insertando este resultado en la ec.(IV.25) se tiene que, definiendo unas nuevas k_n''

$$(IV.55a) \quad k_0'' = \frac{2a^3}{3\xi^2} + \frac{ba^4}{\xi^2} \left(\frac{i}{2\xi} - \frac{1}{4} \right) \quad , \quad k_1'' = i \frac{ba^4}{2\xi^2}$$

$$k_n'' = \frac{n-1}{2^{n-1} n!} \frac{1}{b^3} \left(-\frac{b^2 a^2}{\xi} \right)^n \quad \text{válida para } n \geq 2$$

$$(IV.55b) \quad \frac{d\sigma_{KT}}{dT} = \frac{2\pi}{\hbar^2} a^2 Z_1^2 e^4 |N_{0,|a_K|}|^2 |N_{0,\eta}|^2 \int \varepsilon d\varepsilon$$

$$\times \frac{1}{v_i^2} \left| 2 e^{-\frac{\pi}{2}\xi} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n K_{-i\xi+n}(\varepsilon\xi) \frac{1}{\Gamma(1+i\eta)\Gamma(1-i\eta)} \int_0^1 du (1-u)^{-i\eta} u^{i\eta} k_n'' \right|^2$$

Insertando los valores de las k_n'' , separando k_0'' y k_1'' , las cuales no están dadas por la fórmula de la sucesión k_n'' , se tiene que

$$\begin{aligned}
 \text{(IV.56)} \quad \frac{d\Gamma_{KT}}{dT} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} a^2 Z_i^2 e^4 |N_{0,1a}|^2 |N_{0,\eta}|^2 \int_0^\infty \varepsilon d\varepsilon \\
 &\times \frac{1}{v_i^2} \left| 2e^{\frac{\pi}{2}\xi} \left\{ K_{i\xi}(\varepsilon\xi) \frac{1}{\Gamma(1-i\eta)\Gamma(1+i\eta)} \int_0^1 du (1-u)^{-i\eta} u^{i\eta} K_0'' + \right. \right. \\
 &+ \varepsilon K_{-i\eta+1}(\varepsilon\xi) \frac{1}{\Gamma(1-i\eta)\Gamma(1+i\eta)} \int_0^1 du (1-u)^{-i\eta} u^{i\eta} K_1'' + \\
 &\left. \left. \sum_{n=2}^\infty \varepsilon^n K_{-i\xi+n}(\varepsilon\xi) \frac{1}{\Gamma(1-i\eta)\Gamma(1+i\eta)} \frac{n-1}{2^{n-1}n!} \left(\frac{a^2}{\xi}\right)^n (-1)^n \int_0^1 du (1-u)^{-i\eta} u^{i\eta} b^{2n-3} \right\} \right|^2
 \end{aligned}$$

Ahora ya es posible hacer la integración sobre la variable u . Para hacer las dos primeras integrales del término encerrado en las llaves de la ec.(IV.56) se recurre a la función beta ([30] Pág.223 ec.(A.10)). Para la tercera integral, que está dentro de la sumatoria para $n \geq 2$, se usa una representación integral de la función hipergeométrica ordinaria (ver [38], 2.12, ec(1)), de este modo, la integración sobre u , I_u , está dada por (ver también ec. (IV.24)):

$$\begin{aligned}
 \text{(IV.57)} \quad I_u &= \int_0^1 du (1-u)^{-i\eta} u^{i\eta} b^{2n-3} = \\
 &= \int_0^1 du (1-u)^{-i\eta} u^{i\eta} \left(1 + \frac{2iK_e u}{\alpha - iK_e}\right)^{2n-3} (\alpha - iK_e)^{2n-3} \\
 &= (\alpha - iK_e)^{2n-3} \Gamma(1-i\eta)\Gamma(1+i\eta) {}_2F_1\left(3-2n, 1+i\eta, 2, \frac{2iK_e}{iK_e - \alpha}\right) \quad n \geq 2
 \end{aligned}$$

Usando la ec.(IV.95) y cumpliéndose la condición (IV.12), que implica que $K_e \ll \alpha$ (o lo que es lo mismo, $\eta \geq 1$), la función hipergeométrica se puede escribir como ${}_2F_1(3-2n, 1+i\eta, 2, -2/(1+i\eta))$ y, por lo tanto, se puede hacer una confluencia (ver [38], secc. 6.1), de tal manera que

$$\text{(IV.58)} \quad I_u \approx \alpha^{2n-3} \Gamma(1+i\eta)\Gamma(1-i\eta) \phi(3-2n, 2, -2) \quad n \geq 2$$

Donde Φ es la función hipergeométrica confluyente. Así pues, con las dos primeras integrales del término entre llaves y la tercera dada por la ec.(IV.58), se obtiene que lo que está encerrado en las barras de valor absoluto, lo cual será llamado I_e , resultará ser

$$(IV.59a) \quad I_e = 2e^{-\frac{\pi}{2}\xi} \sum_{n=0}^{\infty} k_n \xi^n K_{-i\xi+n}(\xi\xi)$$

donde las k_n están dadas por:

$$k_0 = \frac{-2a^3}{3\xi^2} + \frac{ia^4\alpha}{\xi^3} - \frac{a^4\alpha}{2\xi^2}$$

$$k_1 = \frac{ia^4\alpha}{\xi^2}$$

$$(IV.59b) \quad k_n = \frac{n-1}{2^{n-1}n!} \left(-\frac{a^2}{\xi}\right)^n \alpha^{2n-3} \phi(3-2n, 2, -2) \quad , \quad n \geq 2$$

Como $d\alpha/\xi_0 = 4Z1/\chi$ (ver ec.(IV.4)), se ve que para valores suficientemente grandes de χ , la ec.(IV.59a) puede quedar bien aproximada tomando los tres primeros términos de la sumatoria ($n=0$, $n=1$, $n=2$). Para esto, se puede escribir $K_{-i\xi+2}$ en términos de $K_{-i\xi+1}$ y de $K_{-i\xi}$ ($=K_{i\xi}$) (ver [39], Pág. 79 ec(8) y ec(1)):

$$(IV.60) \quad K_{-i\xi+2}(\xi\xi) = 2 \left(\frac{-i}{\xi} + \frac{1}{\xi\xi} \right) K_{-i\xi+1}(\xi\xi) + K_{i\xi}(\xi\xi)$$

De este modo, I_e se puede escribir aproximadamente como

$$(IV.61) \quad I_e \cong 2e^{-\frac{\pi}{2}\xi} \left\{ \left[-\frac{2a^3}{3\xi^2} + \frac{a^4\alpha}{\xi^2} \left(\frac{\xi^2-1}{2} + \frac{i}{\xi} \right) \right] K_{i\xi}(\xi\xi) + \frac{a^4\alpha\xi}{\xi^2} K_{-i\xi+1}(\xi\xi) \right\}$$

2) SECCIÓN TRANSVERSAL TOTAL Y SU RELACIÓN CON AQUÉLLA CALCULADA CON LA APROXIMACIÓN DE BORN.

La sección transversal total para la emisión de los electrones de la capa K con energía definida puede ser obtenida de (IV.59a) integrando sobre la excentricidad. Usando una fórmula integral de Lommel (ver [39], Cáp. 5), y usando las fórmulas de recurrencia para las funciones $K_{i\pm n}$ ([38], Pág. 79) se obtiene que

$$(IV.62) \quad I_{\varepsilon} = \int_0^{\infty} \varepsilon |I_{\varepsilon}|^2 d\varepsilon$$

$$= 4e^{-\pi\xi} \left(\frac{a^3}{\xi^2} \right)^2 \left\{ A (K_{i\xi}(\xi))^2 + B \xi K'_{i\xi}(\xi) K_{i\xi}(\xi) + C (K'_{i\xi}(\xi))^2 \right\}$$

A, B, y C son polinomios cuyo número de términos depende del número incluido en (IV.59a).

La convergencia de las expresiones para A, B, y C depende, como se puede ver de (IV.59a), de los parámetros $a\alpha$ y ξ , los cuales a su tiempo pueden ser expresados en términos de χ (ver ecs. (IV.2) y (IV.3)). Para valores suficientemente grandes de χ ($\chi > 30$ para protones) una buena aproximación puede ser obtenida si uno desprecia los términos de (IV.59a) de orden mayor a $n = 2$. Entonces, para los coeficientes A, B, y C se encuentra que

$$(IV.63) \quad A = -\frac{4}{9} \frac{a\alpha}{\xi^2} + \frac{8}{5} \left(\frac{a\alpha}{\xi^2} \right)^2$$

$$B = \frac{1}{9} \frac{a\alpha}{\xi^2} - \frac{8}{5} \left(\frac{a\alpha}{\xi^2} \right)^2 \quad \cdot) \quad \left(\frac{a\alpha}{\xi_0^2} \right) = 64 Z^3 \frac{m_p}{m_e} \frac{1}{\chi^4}$$

$$C = \frac{1}{18} - \frac{4}{9} \frac{a\alpha}{\xi^2} + \frac{8}{5} \left(\frac{a\alpha}{\xi^2} \right)^2$$

Para valores más pequeños de χ , los términos de orden más alto en la ec. (IV.59a) pueden tener un efecto significativo. No obstante, para $\chi < 30$ se puede utilizar el hecho de que el tercer término en (IV.62) es altamente dominante. Entonces la

aproximación para A y B en (IV.63) es suficiente, pero, para C uno debe tomar en cuenta más términos en (IV.59a). La expresión general para C está dada por

$$C = \frac{1}{18} - \frac{4}{9} \frac{a\alpha}{\xi^2} + \frac{1}{\xi^2} \sum_{m=0}^{\infty} a_m \left(\frac{a^2 \alpha^2}{\xi^2} \right)^{m+1}$$

$$(IV.64a) \quad a_m = \frac{(-1)^m}{2(m+5)} \sum_{i,j=-m} 2(i+1)2(j+1)$$

$$\times \phi(-1-2i, 2j-2) \phi(-1-2j, 2j-2)$$

Así pues,

$$(IV.64b) \quad a_0 = \frac{8}{5}, \quad a_1 = -\frac{152}{9}, \quad a_2 = \frac{8}{5} \frac{4061}{63}$$

Debe ser notado que el término $(8/5)(a\alpha/\xi^2)$ en C (ver ecs. (IV.63) y (IV.64a)) corresponde al término dominante obtenido del cálculo hecho con la aproximación de Born (ver ec. (III.124)), a condición de que se usen las expresiones aproximadas para las funciones de Bessel en (IV.62) cuando el argumento de éstas es considerablemente menor que 1:

$$(IV.65) \quad K_{i\xi}(\epsilon\xi) \simeq -J_n(\epsilon\xi)$$

$$K'_{i\xi}(\epsilon\xi) \simeq -\frac{1}{\epsilon\xi} \quad ; \quad \epsilon\xi \ll 1$$

La expresión general para la sección transversal para la emisión de electrones de la capa K está dada por

$$(IV.66) \quad \frac{d\sigma}{dT} = \frac{2\pi}{h^2} a^2 Z^2 e^4 |N_{0,1a}|^2 |N_{0,2}|^2 \frac{1}{v_i} I$$

la cual también puede ser escrita en la forma

$$(IV.67) \quad \frac{d\sigma}{dT} = e^{-\pi\xi} \left(\frac{d\sigma}{dT} \right)_{\text{Born}} (1 - f(\chi, \xi))$$

donde $(d\sigma_K/dT)_{\text{Born}}$ es la sección transversal que se obtuvo en el capítulo anterior para trayectorias rectas y está dada por (III.125). El factor de corrección $f(\chi, \xi)$ puede, entonces, ser encontrado de (IV.63) y (IV.64a). Así pues, teniendo que χ es

lo suficientemente grande para poder hacer las aproximaciones ya mencionadas, con lo cual el factor de corrección sería mucho menor que 1, la corrección principal a la ec.(III.125) proviene del factor $e^{-\pi\xi}$, por lo tanto, ambas expresiones se aproximan sólo en el límite cuando $\xi \ll 1$. Tal como se analizó en el capítulo I.

A continuación, simplemente se relacionan las secciones transversales totales con ambos métodos, cuando $f(\chi, \xi) \ll 1$. Esto es, la sección transversal calculada a través de la primera aproximación de Born se puede escribir como (ver ec.(III.143)):

$$(IV.68) \quad \sigma_B = C_K \int_0^{\infty} \frac{dT}{(E_K + T)^{10}} = \frac{C_K}{9} \frac{1}{E_K^9}$$

donde $C_K = 9(1.83)C$ y C está definida en (III.129). Por lo tanto, de acuerdo con (IV.67), la sección transversal, tomando en cuenta la deflexión coulombiana, se puede escribir como:

$$(IV.69) \quad \sigma_c = C_K \int_0^{\infty} e^{-\pi a \left(\frac{E_K + T}{\hbar v_i} \right)} \frac{dT}{(E_K + T)^{10}}$$

haciendo el siguiente cambio de variable

$$(IV.70) \quad t = \pi a \frac{E_K + T}{\hbar v_i}$$

se tiene que

$$(IV.71) \quad \sigma_c = C_K \int_{\frac{2m_0 a T}{\hbar v_i}}^{\infty} e^{-t} \left(\frac{\hbar v_i}{\pi a} \right) \left(\frac{\hbar v_i}{\pi a} \right)^{-10} t^{-10} dt = C_K \left(\frac{\hbar v_i}{\pi a} \right)^{-9} \int_{\frac{2m_0 a T}{\hbar v_i}}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t^{10}} dt$$

Usando integrales exponenciales, mediante un cambio de variable: $t = t'/x$, se tiene que,

$$(IV.72) \quad E_n(x) = \int_1^{\infty} \frac{e^{-xt}}{t^n} dt = \int_x^{\infty} \frac{e^{-t'}}{t'^n} x^n \frac{dt'}{x} = x^{n-1} \int_x^{\infty} \frac{e^{-t'}}{t'^n} dt'$$

Por lo tanto,

$$(IV.73) \quad \int_1^{\infty} \frac{e^{-xt}}{t^n} dt = x^{n-1} \int_x^{\infty} \frac{e^{-t}}{t^n} dt$$

de donde,

$$(IV.74) \quad x^{1-n} \int_1^{\infty} \frac{e^{-xt}}{t^n} dt = \int_x^{\infty} \frac{e^{-t}}{t^n} dt$$

Utilizando esta igualdad en (IV.71), se tiene que

$$(IV.75) \quad \sigma_c = C_k \frac{1}{E_k} E_{10} (q_{min} \pi a)$$

Finalmente, comparando con (IV.68), se obtiene que

$$(IV.76) \quad \sigma_c = 9 E_{10} (q_{min} a \pi) \sigma_B$$

V. APLICACIÓN DE LOS MODELOS

En este capítulo se darán algunos resultados experimentales del cálculo de la sección transversal de ionización de la capa K por colisión con p^+ , $^3\text{He}^+$ y $^4\text{He}^+$. En cada una de las gráficas, donde lo que se tiene es E_i vs. $(\sigma_K)_{\text{exp.}}$, aparecen también las gráficas de E_i vs. $(\sigma_K)_{\text{Born}}$ y $(\sigma_K)_{\text{Coul.}}$, correspondientes a los modelos estudiados en los capítulos III y IV, respectivamente.

a) TABLAS

Tabla V.1. Energía del proyectil H^+ , E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, $\sigma_{\text{exp.}}$, para Fe. [50]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 6.1 hasta 11 para la energía más baja. Mientras que, ξ_0 va de 0.04 hasta 0.26, para la energía más baja.

$E_i(\text{KeV})$	$(\sigma_K)_{\text{exp.}}(\text{cm}^2)$
140	$2.45 \cdot 10^{-26}$
152	$3.35 \cdot 10^{-26}$
160	$4.50 \cdot 10^{-26}$
180	$8.00 \cdot 10^{-26}$
202	$1.28 \cdot 10^{-25}$
224	$1.89 \cdot 10^{-25}$
242	$2.77 \cdot 10^{-25}$
262	$3.63 \cdot 10^{-25}$
282	$5.20 \cdot 10^{-25}$
304	$6.60 \cdot 10^{-25}$
324	$8.42 \cdot 10^{-25}$
342	$9.65 \cdot 10^{-25}$
364	$1.27 \cdot 10^{-24}$
406	$1.92 \cdot 10^{-24}$
448	$2.70 \cdot 10^{-24}$

Tabla V.2. Energía del proyectil H^+ , E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, σ_{exp} , para Cu. [50]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 6.8 hasta 11.8, para la energía más baja. Mientras que, ξ_0 va de 0.06 hasta 0.32 para la energía más baja.

$E_i(\text{KeV})$	$\sigma_{exp}(\text{cm}^2)$
143	$4.61 \cdot 10^{-27}$
153	$6.98 \cdot 10^{-27}$
163	$1.29 \cdot 10^{-26}$
182	$1.93 \cdot 10^{-26}$
204	$3.43 \cdot 10^{-26}$
224	$5.26 \cdot 10^{-26}$
245	$8.22 \cdot 10^{-26}$
263	$1.16 \cdot 10^{-25}$
288	$1.63 \cdot 10^{-25}$
308	$2.29 \cdot 10^{-25}$
329	$2.95 \cdot 10^{-25}$
349	$4.17 \cdot 10^{-25}$
369	$5.18 \cdot 10^{-25}$
392	$6.60 \cdot 10^{-25}$
411	$8.00 \cdot 10^{-25}$
456	$1.04 \cdot 10^{-24}$

Tabla V.3. Energía del proyectil H^+ , E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, σ_{exp} , para Mo. [50]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 6.8 hasta 13.2 para la energía más baja. Mientras que ξ_0 va de 0.06 hasta 0.44, para la energía más baja.

$E_i(\text{KeV})$	$\sigma_{exp}(\text{cm}^2)$
240	$7.40 \cdot 10^{-28}$
260	$1.08 \cdot 10^{-27}$
280	$1.62 \cdot 10^{-27}$
300	$2.40 \cdot 10^{-27}$
320	$3.45 \cdot 10^{-27}$
340	$4.75 \cdot 10^{-27}$
360	$6.42 \cdot 10^{-27}$
380	$8.45 \cdot 10^{-27}$
400	$1.13 \cdot 10^{-26}$
440	$1.62 \cdot 10^{-26}$
600	$4.50 \cdot 10^{-26}$
740	$1.18 \cdot 10^{-25}$
940	$3.08 \cdot 10^{-25}$

Tabla V.4. Energía del proyectil H^+ , E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, $\sigma_{exp.}$, para Ag. [50, 51]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 7.2 hasta 14.5, para la energía más baja. Mientras que va de 0.072 a 0.588, para la energía más baja.

$E_i(\text{KeV})$	$\sigma_{exp.}(\text{cm}^2)$ [50]
260	$1.58 \cdot 10^{-28}$
280	$2.55 \cdot 10^{-28}$
300	$3.56 \cdot 10^{-28}$
320	$5.24 \cdot 10^{-28}$
340	$9.18 \cdot 10^{-28}$
360	$1.32 \cdot 10^{-27}$
380	$1.87 \cdot 10^{-27}$
400	$2.62 \cdot 10^{-27}$
600	$1.39 \cdot 10^{-26}$
740	$3.20 \cdot 10^{-26}$
940	$8.40 \cdot 10^{-26}$
1040	$1.28 \cdot 10^{-25}$

$E_i(\text{KeV})$	$\sigma_{exp.}(\text{cm}^2)$ [51]
600	$4.55 \cdot 10^{-27}$
700	$1.08 \cdot 10^{-26}$
800	$1.83 \cdot 10^{-26}$
900	$3.52 \cdot 10^{-26}$
1000	$4.58 \cdot 10^{-26}$

Tabla V.5. Energía del proyectil H^+ , E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, $\sigma_{exp.}$, para Al [43]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 1.3 hasta 3.3 para la energía más baja. Mientras que ξ_0 va de 0.00042 hasta 0.0069 para la energía más baja.

$E_i(\text{MeV})$	$\sigma_{exp.}(\text{barn})$
0.375	130
0.5	230
0.6	300
0.7	340
0.8	410
0.9	490
1.0	550
1.1	620
1.2	680
1.3	700
1.4	780

1.5	900
1.6	890
1.7	910
1.8	710
1.9	700
2.0	800
2.1	780
2.2	760
2.3	890

Tabla V.6. Energía del proyectil H^+ , E_i , contra la sección transversal experimental de producción de rayos X de la capa K, σ_{exp} , para Cu. [43]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 3 hasta 6.4 para la energía más baja. Mientras que ξ_0 va de 0.0052 hasta 0.05 para la energía más baja

$E_i(\text{MeV})$	$\sigma_{exp}(\text{barn})$
0.5	0.9
0.6	1.9
0.7	3.0
0.8	4.8
0.9	6.5
1.0	9.0
1.1	12.0
1.2	16.0
1.3	19.0
1.4	22.0
1.5	26.0
1.6	32.0
1.7	36.0
1.8	41.0
1.9	48.0
2.0	53.0
2.1	59.0
2.2	61.0
2.3	68.0

Tabla V.7. Energía del proyectil H^+ , E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, σ_{exp} , para In. [43]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 5 hasta 12.1 para la energía más baja. Mientras que ξ_0 va de 0.024 hasta 0.34 para la energía más baja.

$E_i(\text{MeV})$	$\sigma_{exp}(\text{barn})$
0.4	0.00036
0.5	0.0015
0.6	0.0056
0.7	0.0084
0.8	0.016
0.9	0.025
1.0	0.037
1.2	0.075
1.3	0.07
1.4	0.14
1.5	0.13
1.6	0.21
1.7	0.20
1.8	0.30
1.9	0.26
2.0	0.42
2.1	0.38
2.2	0.60
2.3	0.95

Tabla V.8. Energía del proyectil H^+ , E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, σ_{exp} , para Al. [29]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 4.5 hasta 14.4 para la energía más baja. Mientras que ξ_0 va de 0.018 hasta 0.58 para la energía más baja.

$E_i(\text{KeV})$	$\sigma_{exp}(\text{barn})$
25	0.06
30	0.25
40	1.05
50	4.00
60	7.00
70	16.00
80	30.00
90	40.00
100	55.00
120	120.00
140	200.00

160	350.00
180	400.00
200	600.00

Tabla V.9. Energía del proyectil $^3\text{He}^+$, E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, σ_{exp} , para Al. [29]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 8.0 hasta 16.8 para la energía más baja. Mientras que ξ_0 va de 0.03 hasta 0.3 para la energía más baja.

$E_i(\text{KeV})$	$\sigma_{\text{exp.}}(\text{barn})$
45	$4.06 \cdot 10^{-3}$
50	$1.02 \cdot 10^{-2}$
60	$3.95 \cdot 10^{-2}$
70	$1.38 \cdot 10^{-1}$
80	$3.12 \cdot 10^{-1}$
90	$7.58 \cdot 10^{-1}$
100	$1.14 \cdot 10^0$
120	$2.58 \cdot 10^0$
140	$5.20 \cdot 10^0$
160	$9.25 \cdot 10^0$
180	$1.38 \cdot 10^1$
200	$2.31 \cdot 10^1$

Tabla V.10. Energía del proyectil $^4\text{He}^+$, E_i , contra la sección transversal experimental de la producción de rayos X de la capa K, σ_{exp} , para Al. [29]. Aquí, los valores de n van aproximadamente de 9.2 hasta 16.7 para la energía más baja. Mientras que ξ_0 va de 0.04 hasta 0.23 para la energía más baja.

$E_i(\text{KeV})$	$\sigma_{\text{exp.}}(\text{barn})$
60	$6.98 \cdot 10^{-3}$
70	$2.52 \cdot 10^{-2}$
80	$6.24 \cdot 10^{-2}$
90	$1.27 \cdot 10^{-1}$
100	$2.53 \cdot 10^{-1}$
120	$6.92 \cdot 10^{-1}$
140	$1.68 \cdot 10^0$
160	$3.21 \cdot 10^0$
180	$5.25 \cdot 10^0$
200	$8.13 \cdot 10^0$

A continuación se presentan las gráficas de estos datos y la comparación de éstos con las gráficas teóricas.

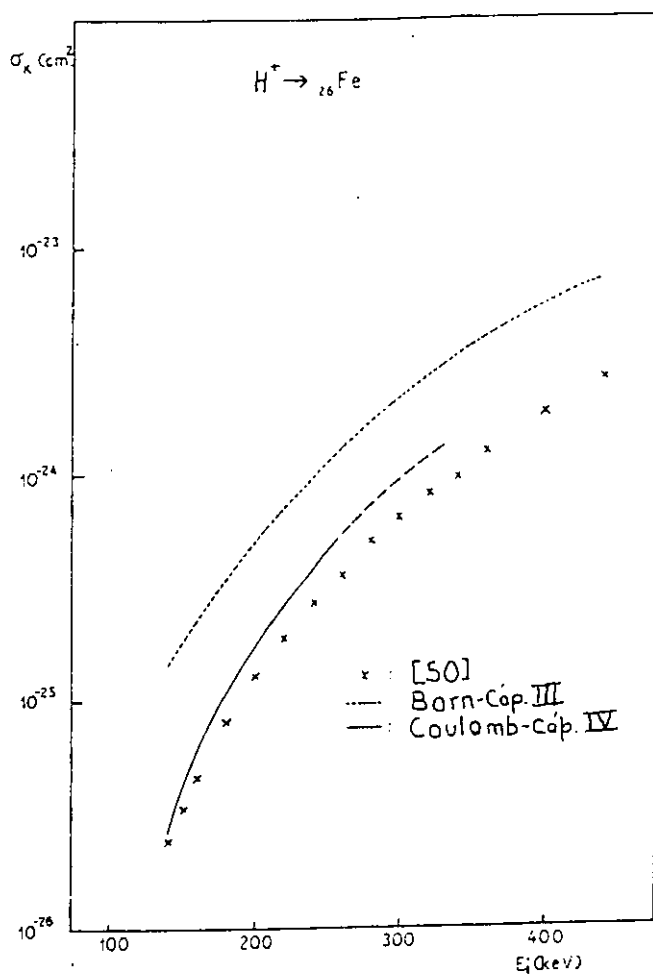


Figura V.1.

En ésta y las cuatro siguientes secciones transversales con deflexión coulombiana, se toman en cuenta cinco términos de la serie (IV.64a). La parte punteada de esa curva indica la región de la energía donde la convergencia de la serie se torna lenta y en la cual multipolos más altos en la interacción pueden empezar a contribuir de manera importante (ver ec.(IV.20)).

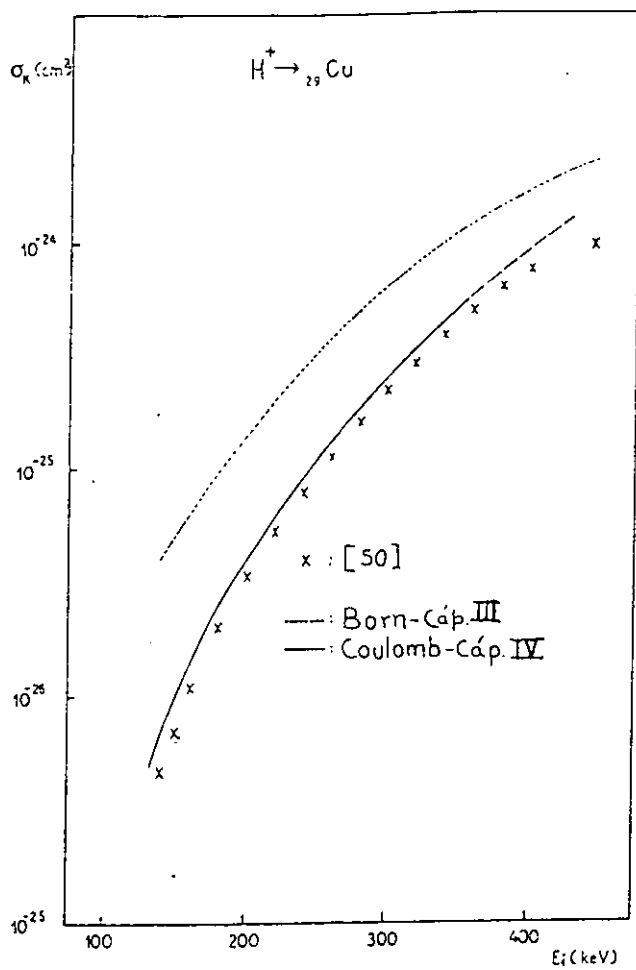


Figura V.2.

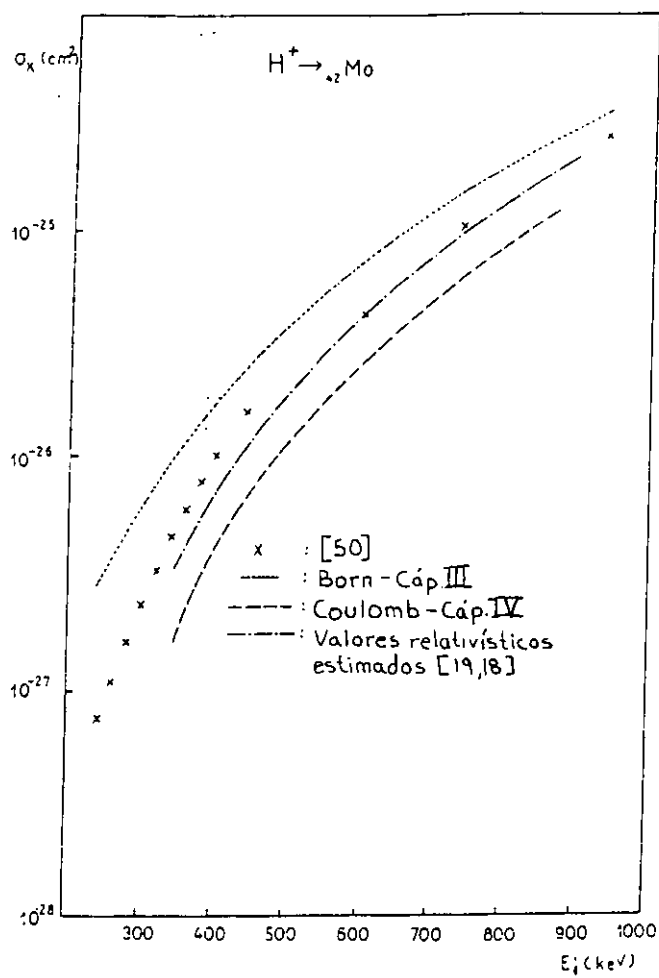


Figura V.3.

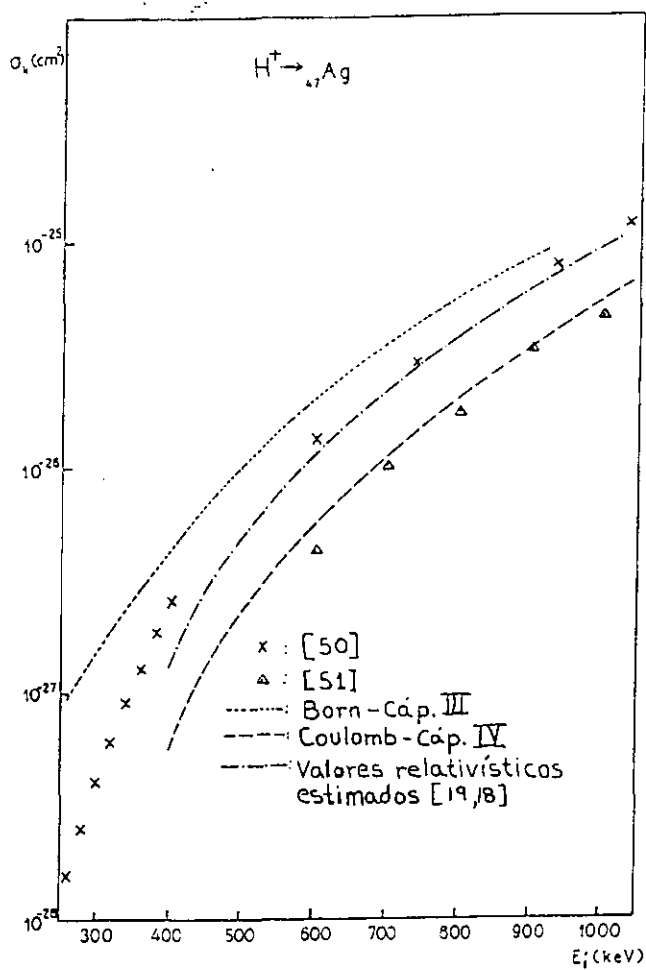


Figura V.4.

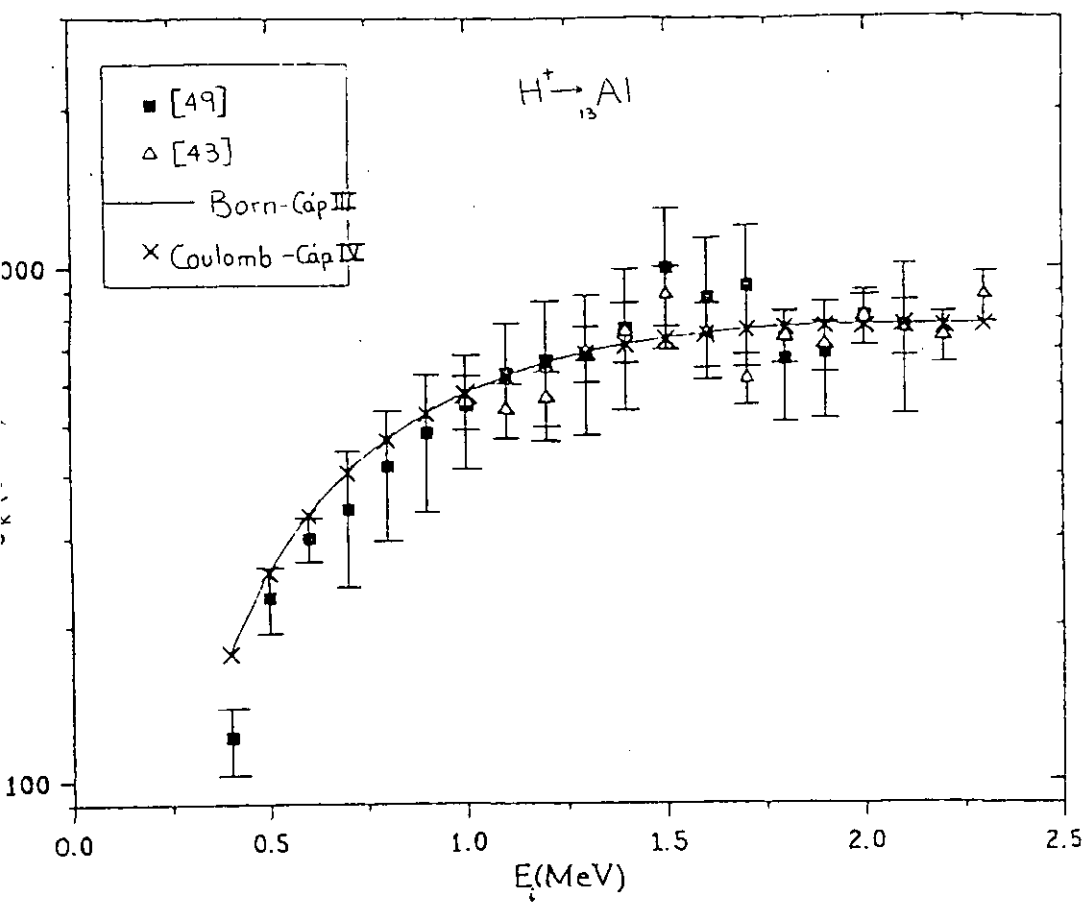


Figura V.5.

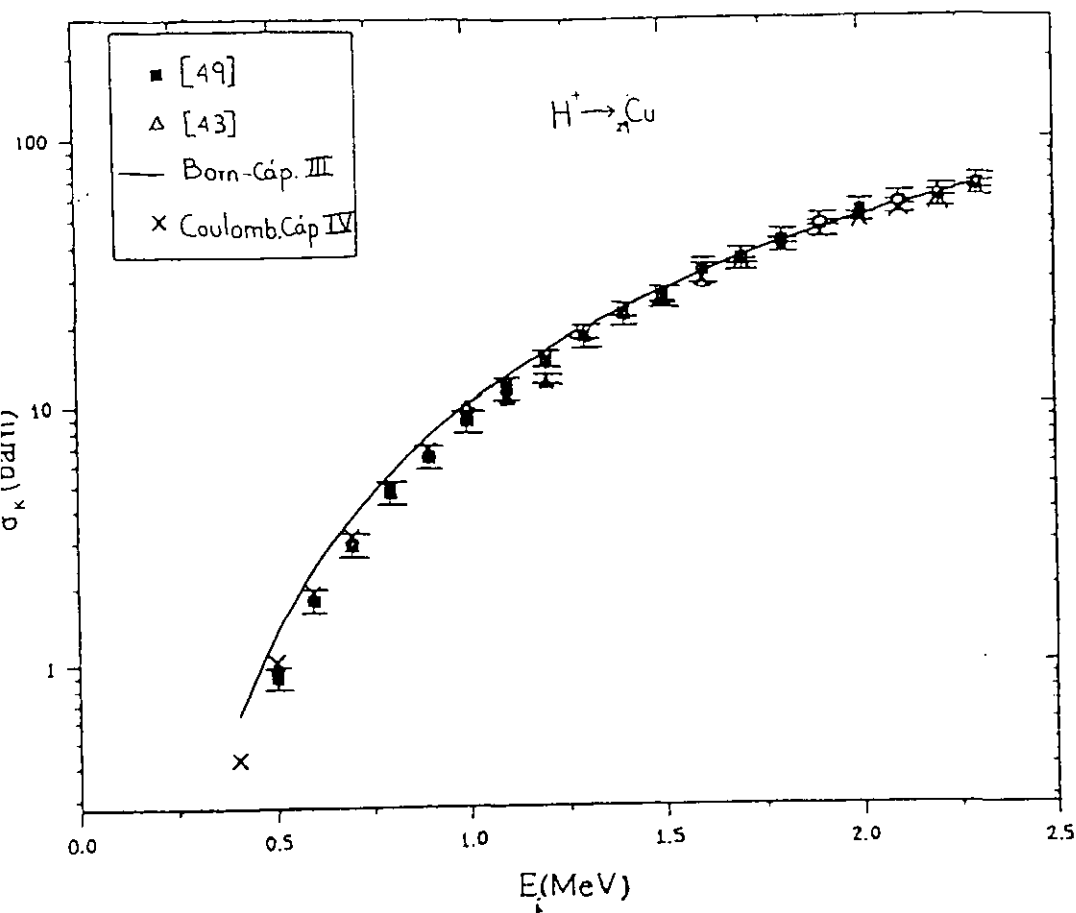


Figura V.6.

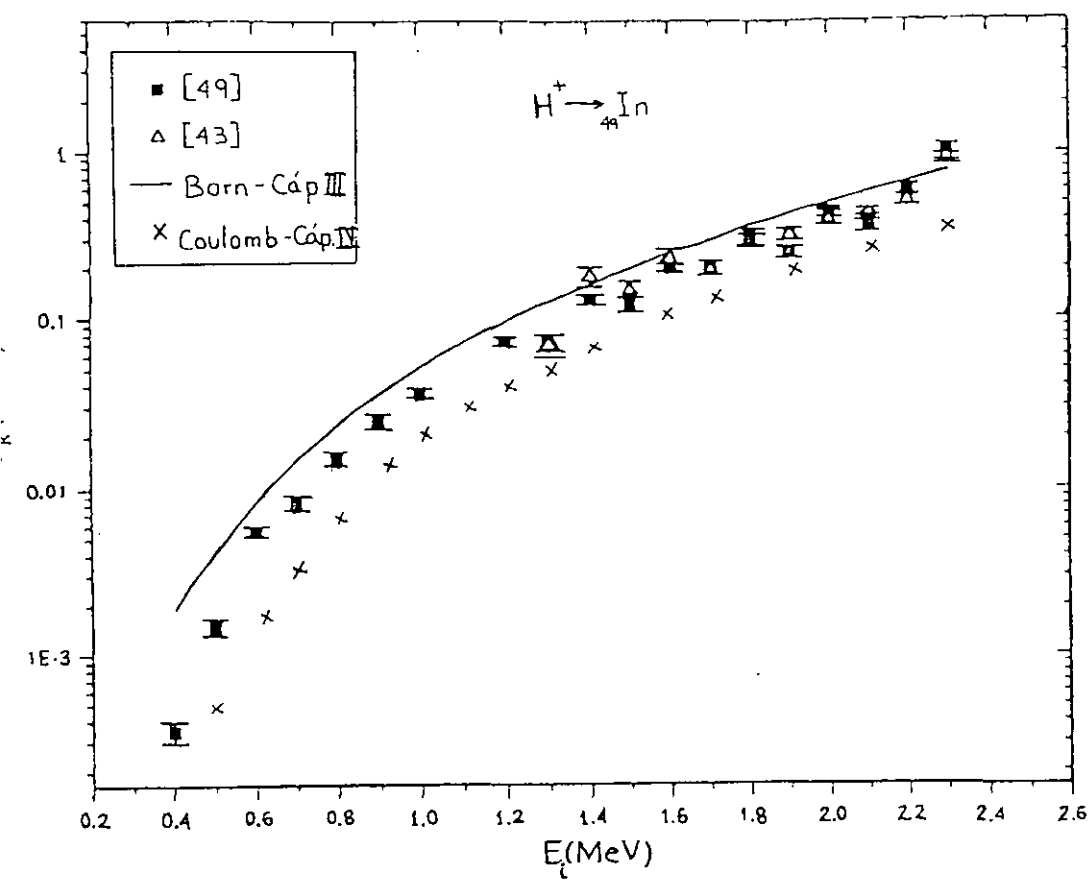


Figura V.7.

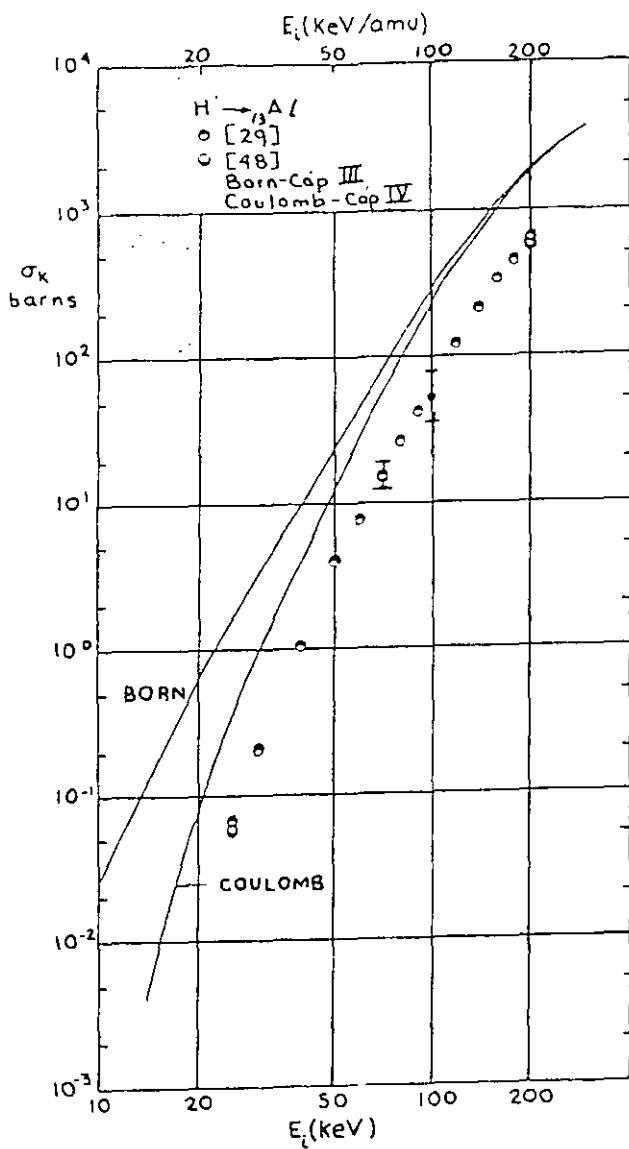


Figura V.8.

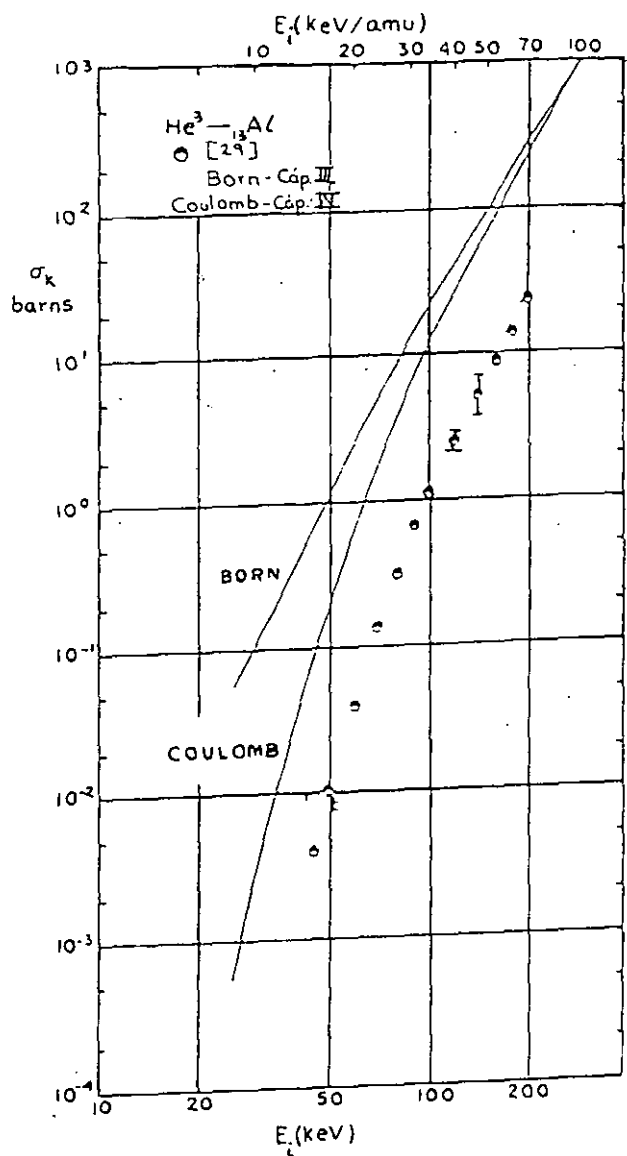


Figura V.9.

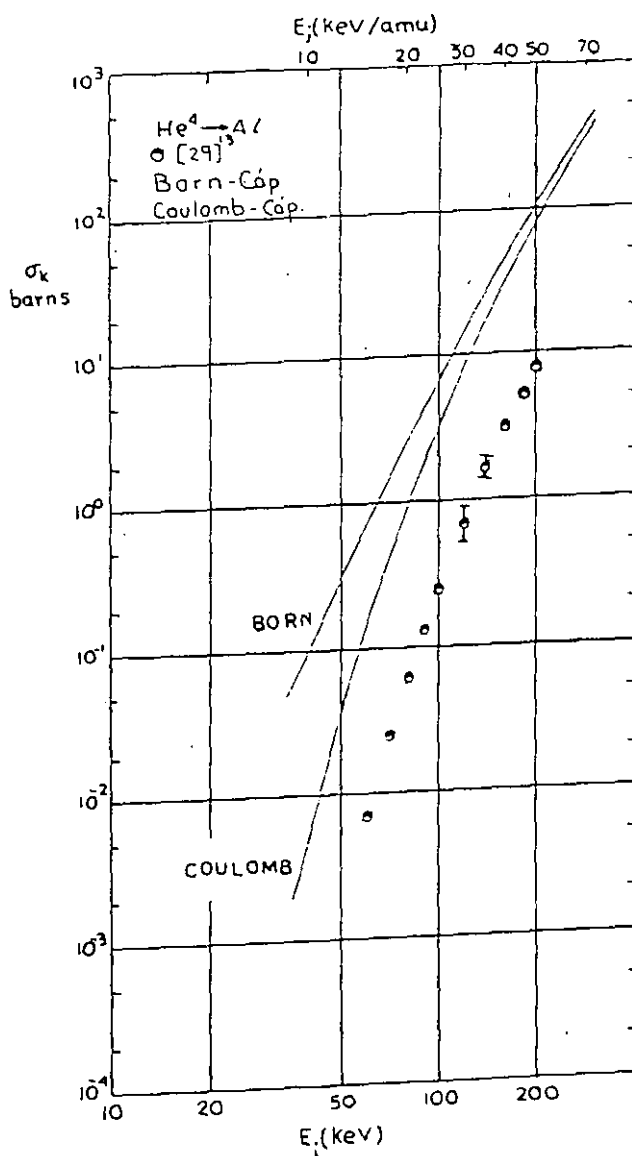


Figura V.10.

VI. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

1) Sistema $H^+ \rightarrow {}_{26}\text{Fe}$.

Como se puede ver de la figura V.1, los valores teóricos de sección transversal, en donde se considera la deflexión coulombiana, reproducen los valores experimentales de manera bastante aceptable. Además, se puede apreciar la importancia de la corrección del efecto de la repulsión coulombiana sobre la sección transversal que considera trayectorias rectas, esto es acorde con los valores que se tienen para n y ξ en estos datos. Por otro lado, se ve que a medida que aumenta la energía (el proyectil penetra más en las capas), la curva de σ_{Coul} , se va separando de los puntos experimentales. Parece ser que la explicación de esto es que, en el caso de elementos ligeros ($Z_2 < 30$), el hecho de que la energía de ligadura del electrón se incremente durante la colisión, debido a la presencia - cada vez más próxima - del proyectil [27], afecta marcadamente la probabilidad de excitación de los electrones.

2) Sistema $H^+ \rightarrow {}_{29}\text{Cu}$, (240 – 450 KeV).

En la figura V.2 se aprecia, otra vez, que los valores teóricos de la sección transversal σ_{Coul} reproducen muy bien los datos experimentales, mejor de lo que lo hace la σ_{Born} . Esto, otra vez, va de acuerdo con lo esperado, dados los valores de n y ξ para estos datos. También, aquí se puede apreciar que las dos curvas teóricas se aproximan entre sí, a medida que la energía incrementa. Por otra parte, parece ser que la corrección por perturbación en la energía de ligadura cobra menos importancia que en el caso anterior, por lo menos para energías menores a 400 keV, pero, en el último punto, se puede apreciar la separación otra vez.

3) Sistema $H^+ \rightarrow {}_{42}\text{Mo}$.

Respecto de la figura V.3 se puede decir que ambas curvas teóricas están igualmente alejadas de los valores experimentales, aunque ambas son una buena estimación. Aquí se tiene que la σ_{Coul} subestima la sección transversal, mientras que la σ_{Born} la sobrestima. La corrección en la ligadura del electrón lo único que lograría sería disminuir aún más la sección transversal, aunque muy ligeramente. Así pues, la respuesta a estas discrepancias está en el hecho de usar funciones de onda no relativísticas para los estados de los electrones pertenecientes a elementos que comienzan a ser pesados [18, 19]. Como se indica al principio del capítulo I, usar

estas funciones de onda incrementa considerablemente la sección transversal para blancos pesados, y como se puede ver, la gráfica que considera esto es la que mejor se ajusta a los datos experimentales.

Sistema $H^+ \rightarrow {}_{47}\text{Ag}$.

He en la figura V.4, que se tiene básicamente el mismo comportamiento que para el molibdeno, sin embargo, los efectos relativísticos son más notorios que en aquél. Además, en las energías más bajas, la σ_{Born} ya se aleja bastante de los datos experimentales, no tanto así la $\sigma_{\text{Coul.}}$, lo cual indica que la repulsión coulombiana está jugando ahí un papel importante.

Sistema $H^+ \rightarrow {}_{13}\text{Al}$, (0.5 – 2.5 MeV).

En la figura V.5 se tiene el mismo proyectil, ahora mucho más veloz, incidiendo sobre un blanco ligero. Aquí, tal como se esperaría de los modelos - dados los valores de n y ξ -, los valores que arrojan ambos cálculos, σ_{Born} y $\sigma_{\text{Coul.}}$, coinciden entre sí y describen muy bien los valores experimentales. De hecho, a estas velocidades, a pesar de tener un blanco ligero, la corrección en la ligadura del electrón y las correcciones relativísticas modifican despreciablemente la aproximación. Así pues, la razón de la abrupta caída del último punto se desconoce.

Sistema $H^+ \rightarrow {}_{29}\text{Cu}$, (0.5 – 2.3 MeV).

En la figura V.6 se tiene otra vez coincidencia entre σ_{Born} y $\sigma_{\text{Coul.}}$, sobre todo para las energías más altas, lo cual de nuevo está de acuerdo con los valores de n y de ξ . A su vez, se puede ver que ambas, aunque mejor la $\sigma_{\text{Coul.}}$, predicen aceptablemente los valores experimentales. Nótese que a medida que baja la energía, la σ_{Born} empieza a sobrestimar la sección transversal. Por otro lado, resulta que, para este blanco y para esas energías del proyectil, las correcciones relativísticas y de ligadura del electrón no cambian mucho las predicciones de la $\sigma_{\text{Coul.}}$. Si se compara con la figura V.2, es también alrededor de 0.5 MeV, donde las predicciones comienzan a tener problemas.

Sistema $H^+ \rightarrow {}_{49}\text{In}$.

En la figura V.7 se tiene otra vez un blanco pesado y, de nuevo, como en el caso de la plata, ambas σ 's presentan discrepancias de importancia. Al igual que en el caso de la plata, parece ser que son las correcciones relativísticas las que ofrecen una

mejor aproximación. Sin embargo, añadiendo a los modelos tanto correcciones relativísticas junto con correcciones en la ligadura del electrón, todavía se encuentra que la predicción teórica se comporta de manera distinta de lo que lo hacen los datos, por debajo 0.8 MeV. Nótese que la σ_{Born} reproduce bastante bien los datos experimentales para las energías más altas, lo cual tal vez sea engañoso, ya que la sobrestimación de la sección transversal por la σ_{Born} obedece a suponer trayectorias rectas del proyectil, lo cual no es cierto; lo que contrarresta la disminución de la sección transversal por la deflexión coulombiana es el incremento que se obtiene por el aumento en la densidad electrónica del blanco, cerca del origen, que corresponde a las correcciones relativísticas.

Sistema $\text{H}^+ \rightarrow {}_{13}\text{Al}$, (25 – 200 KeV).

En la figura V.8 se tiene el mismo sistema que en la figura V.5, pero, a diferencia de ese sistema, la energía del proyectil es mucho menor. Entonces, lo que se tiene es que tanto la σ_{Born} - principalmente - como la $\sigma_{\text{Coul.}}$ sobrestiman la sección transversal. Sin embargo, tal como se espera de los valores de n y ξ , la $\sigma_{\text{Coul.}}$ mejora la predicción de la σ_{Born} . El hecho de que todavía los datos caigan debajo de las curvas teóricas se debe a los cambios en la energía de ligadura del electrón. En efecto, si además de la corrección por deflexión coulombiana se agrega la corrección por las variaciones en la energía de ligadura del electrón, la sección transversal teórica reproduce perfectamente los datos experimentales.

Sistema ${}^3\text{He}^+ \rightarrow {}_{13}\text{Al}$.

Este sistema, correspondiente a la figura V.9, presenta un cambio en el proyectil. Se tiene un proyectil con la misma carga, pero, tres veces más masivo. De nuevo, la $\sigma_{\text{Coul.}}$ presenta una mejora sobre la σ_{Born} , sin embargo, falla todavía, ahora por poco más de un orden de magnitud - más que para el H^+ -, respecto de los datos experimentales. Resulta que, agregar la corrección de las variaciones en la energía de ligadura del electrón a la sección transversal teórica hace que ésta reproduzca perfectamente los datos experimentales. Por otro lado, puede verse que aún cuando la energía por unidad de masa es la misma, la $\sigma_{\text{Coul.}}$ falla más para ${}^3\text{He}^+$ que para H^+ , esto se debe que la variación de la ligadura del electrón no depende de la carga neta del proyectil, sino de la carga del núcleo.

Sistema ${}^4\text{He}^+ \rightarrow {}_{13}\text{Al}$.

La figura V.10 presenta un sistema donde el proyectil es más masivo que en el caso anterior, pero con la misma carga. Otra vez, aunque la σ_{Coul} mejora las predicciones que arroja la σ_{Born} , falla - igualmente que para el ${}^3\text{He}^+$ - por poco más de un orden de magnitud, y, del mismo modo que para el ${}^3\text{He}^+$, agregando la corrección de la ligadura adicional del electrón, se obtiene la sección transversal que reproduce con gran precisión los datos experimentales. Ahora, nótese que las secciones transversales experimentales casi coinciden para el ${}^3\text{He}^+$ y para ${}^4\text{He}^+$, cuando tienen la misma energía por unidad de masa. Además, se puede ver en la gráfica que, dado que el ${}^4\text{He}^+$ es isótopo del ${}^3\text{He}^+$ y, por lo tanto, tienen la misma carga, el factor de corrección por la ligadura adicional del electrón cumple con ser el mismo en ambos casos [28].

Por otra parte, hay que agregar que en ninguno de los dos modelos que se estudiaron se tomaron en cuenta los efectos de apantallamiento [19].

El apantallamiento del campo coulombiano del núcleo por los electrones atómicos puede interferir de dos maneras diferentes.

a) Realmente, el proyectil se mueve en un campo coulombiano apantallado, más que en uno no apantallado, tal como se sugiere en el capítulo IV. Entonces, la órbita descrita en (IV.22) no es del todo correcta. Por otra parte, se ha siempre supuesto que la colisión se da bajo la condición de que $a \ll |a_K|$. Esto significa que el movimiento del proyectil en la región de considerable apantallamiento es ya casi imperturbado por el campo del núcleo. Así, el efecto de apantallamiento es, entonces, despreciable.

b) El electrón - tanto en el estado ligado, como en el estado libre - se está moviendo en un campo coulombiano apantallado. Esto es tratado de las siguientes maneras:

1) El electrón adquiere una energía adicional de la repulsión por los otros electrones. Aunque esta energía es relativamente pequeña comparada con la energía de ligadura E_K , tiene cierta importancia debida a la gran dependencia de la sección transversal de ξ . No obstante, uno puede tomar en cuenta este efecto usando las energías de ionización experimental para $E_{\text{per}} = E_K + T$, en vez de las teóricas.

2) El cambio de las funciones de onda por el potencial apantallado tiene que ver en dos partes:

i) El, así llamado, efecto de apantallamiento interno [19] es tomado en cuenta usando la carga nuclear apantallada $(Z_2)_{\text{efec.}} \approx Z_2 - 0.3$, en vez de Z_2 , en la expresión para $d\sigma_K/dT$. Esto es una corrección pequeña, obviamente.

ii) El efecto de la parte externa del apantallamiento es más bien un cambio suave del potencial, apreciable sólo para distancias más grandes que $a_0/2(Z_2)^{1/3}$ (ver Cáp. 2 de [52]). Claramente, tal cambio es casi despreciable para los estados iniciales, donde las funciones de onda se extienden sólo a distancias de alrededor de $a_0/(Z_2)$.

Por otro lado, hacer las correcciones por efectos relativísticos y por efectos del cambio en la ligadura del electrón, ya no son tan simples y significan incorporar más elementos a los modelos y hacer nuevos cálculos de las secciones transversales.

CONCLUSIONES

Ambos modelos tratados en este trabajo tienen una característica común con el de JAMNIK Y ZUPANCIC [18]. En los tres tratamientos la sección transversal es obtenida como un desarrollo en serie de la cantidad $\alpha/q_{\min}$. En consecuencia, la fórmula resultante sólo puede ser aplicada a experimentos donde la desigualdad (II.14) es satisfecha, es decir, donde la energía de la partícula incidente es lo suficientemente pequeña como para que $\alpha/q_{\min}$ sea menor que 1. Las demás aproximaciones envueltas en los tres métodos, no obstante, son tales que se puede decir que tienen, a su vez, diferentes regiones de aplicación. Por ejemplo, el primer método (Cáp. III) no presenta problemas cuando las energías de incidencia alcanzan ciertos valores; mientras que el segundo método (Cáp. IV), es evidentemente más favorable aplicado a la región de bajas energías, donde la deflexión coulombiana es de importancia, sin embargo, bajo esas mismas condiciones para blancos más ligeros (Al) todavía la sección transversal está sobrestimada.

Para elementos pesados, los valores experimentales caen por arriba de las estimaciones teóricas, pero está visto que la desviación se atribuye principalmente a las correcciones relativísticas en las funciones de onda del electrón, las cuales incrementan la sección transversal para este tipo de elementos.

Por otro lado, se ha visto [28] que la sección transversal es muy sensible a la ligadura del electrón y que la presencia del proyectil la incrementa ésta de tal forma que la sección resulta afectada considerablemente para blancos ligeros y bajas velocidades.

Entonces, finalmente, el cálculo que involucra estas cuatro correcciones [43] es, hasta ahora, el que reproduce mejor los datos experimentales. En tanto, las dos calculadas en este trabajo proporcionan, bajo las condiciones antes mencionadas, una muy buena aproximación. Además, el desarrollo que hasta ellas ha llevado es fundamento de aquellas otras.

APÉNDICE A. FRAGMENTOS DE LA TEORÍA DEL MOMENTO ANGULAR

a) Momento angular orbital

El operador de momento angular orbital, $\mathbf{L}$, se define en mecánica como:

$$(A-1) \quad \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

En coordenadas esféricas se tiene que

$$(A-2) \quad \hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \left(\hat{\mathbf{a}} \frac{\partial}{\partial \theta} - a_{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

Como L^2 conmuta con cada componente L_i (L_x , L_y , L_z), se pueden construir eigenestados simultáneos de L^2 y de L_i , pero como las componentes L_i no conmutan entre sí, a lo más, una de ellas puede carecer de dispersión en un estado dado. Si se toma, en forma meramente convencional, a L_z con valor bien definido, se puede construir el estado $|LL_z\rangle$, eigenestado simultáneo de los operadores L^2 y L_z , pero que no será, en general, eigenestado de L_x ni de L_y .

b) Eigenvalores y eigenfunciones del momento angular orbital

Para determinar las eigenfunciones $Y(\theta, \varphi)$ y los eigenvalores de los operadores de momento orbital, se establecen las correspondientes ecuaciones diferenciales en coordenadas esféricas, pues con ellas resulta más sencillo. Como existen eigenfunciones simultáneas tanto de L^2 y de L_z , las ecuaciones a resolver son:

$$(A-3) \quad \hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\theta, \varphi)$$

$$(A-4) \quad \hat{L}_z Y(\theta, \varphi) = \hbar m Y(\theta, \varphi)$$

(con esta escritura, los eigenvalores λ y m son adimensionales). Tomando el cuadrado de (A-2) se obtiene

$$(A-5) \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\hat{a}_\varphi \partial_\theta - \frac{\hat{a}_\theta}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi \right)^2$$

Por lo tanto,

$$(A-6) \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\hat{a}_\varphi \cdot \partial_\theta (\hat{a}_\varphi \partial_\theta) - \hat{a}_\varphi \cdot \partial_\theta \left(\frac{\hat{a}_\theta}{\sin \theta} \partial_\varphi \right) - \right. \\ \left. - \frac{\hat{a}_\theta}{\sin \theta} \cdot \partial_\theta (\hat{a}_\varphi \partial_\theta) + \frac{\hat{a}_\theta}{\sin \theta} \cdot \partial_\theta \left(\frac{\hat{a}_\theta}{\sin \theta} \partial_\varphi \right) \right]$$

De las expresiones de los vectores $\hat{a}_r$, $\hat{a}_\theta$, $\hat{a}_\varphi$ en términos de los vectores cartesianos $\hat{a}_x$, $\hat{a}_y$, $\hat{a}_z$:

$$(A-7) \hat{a}_r = \hat{a}_x \sin \theta \cos \varphi + \hat{a}_y \sin \theta \sin \varphi + \hat{a}_z \cos \theta$$

$$(A-8) \hat{a}_\theta = \hat{a}_x \cos \theta \cos \varphi + \hat{a}_y \cos \theta \sin \varphi - \hat{a}_z \sin \theta$$

$$(A-9) \hat{a}_\varphi = -\hat{a}_x \sin \varphi + \hat{a}_y \cos \varphi$$

$$(A-10) \partial_\theta \hat{a}_\varphi = 0$$

$$(A-11) \partial_\theta \hat{a}_\theta = -\hat{a}_r$$

$$(A-12) \partial_\varphi \hat{a}_\theta = \hat{a}_\varphi \cos \theta$$

$$(A-13) \partial_\varphi \hat{a}_\varphi = -\hat{a}_r \sin \theta - \hat{a}_\theta \cos \theta$$

Usando estos resultados en la ecuación (A-6) se obtiene

$$(A-14) \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\partial_\theta^2 + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right]$$

o bien,

$$(A-15) \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) \right]$$

Para construir el operador L_z se proyecta la L , dada por la ecuación (A-2), en la dirección z :

$$(A-15a) \hat{L}_z = -i\hbar \hat{a}_z \cdot \left(\hat{a}_\varphi \partial_\theta - \frac{\hat{a}_\theta}{\sin \theta} \partial_\varphi \right)$$

como de las ecuaciones (A-8) y (A-9) se sigue que:

$$(A-16) \hat{a}_z \hat{a}_\varphi = 0 \quad ; \quad \hat{a}_z \hat{a}_\theta = -\sin \theta$$

se obtiene finalmente que

$$(A-17) \hat{L}_z = -i\hbar \partial_\varphi$$

Insertando (A-15) y (A-17) en (A-3) y (A-4) las ecuaciones de eigenvalores toman la forma

$$(A-18) \frac{\partial Y}{\partial m} = i m Y$$

$$(A-19) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -\lambda Y$$

Resolviendo primero la ecuación (A-18) para L_z , se obtiene

$$(A-20) Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) e^{im\varphi}$$

Para que esta función sea univaluada se requiere que su valor sea el mismo para φ y $\varphi+2\pi$, por lo que debe cumplirse la condición de que $e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi)}$, es decir

$$(A-21) e^{i2\pi m} = 1$$

lo que demanda que

$$(A-22) |m| = 0, 1, 2, \dots$$

Esto quiere decir que la función de onda es invariante frente a una rotación de 2π . Además, los eigenvalores $\hbar m$ de L_z son múltiplos enteros de $\hbar$: $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots$; puesto que la dirección de z es arbitraria, este resultado debe entenderse en el sentido de que la proyección del momento orbital en cualquier dirección está cuantizada, por lo que los eigenvalores del operador $\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}$, donde $\mathbf{n}$ es un vector unitario en dirección arbitraria, son $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots$. Sustituyendo (A-20) en la ecuación (A-19), se obtiene

$$(A-23) \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta + \lambda \Theta = 0$$

Esta es la ecuación diferencial de Legendre y tiene soluciones para todos los valores del parámetro λ , sin embargo, en general, tales soluciones son divergentes para algún valor de la variable θ dentro del intervalo $(0, \pi)$, por lo que físicamente son inadmisibles. Pero, resulta que la ecuación (A-23) tiene soluciones aceptables para $m \geq 0$, si y sólo si:

$$(A-24) \quad \lambda = \ell(\ell+1) \quad ; \quad \ell \geq |m|$$

Donde ℓ es un número entero $\ell = 0, 1, 2, \dots$

En este caso, las soluciones de la ecuación (A-23) son las llamadas funciones asociadas de Legendre ($x = \cos \theta$):

$$(A-25) \quad P_{\ell}^m(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^{\ell}$$

Así pues se ha obtenido un resultado sumamente importante de la teoría cuántica del momento angular: los eigenvalores de L^2 son $\hbar^2 \ell(\ell+1)$.

Las funciones asociadas de Legendre son ortogonales respecto del índice ℓ :

$$(A-26) \quad \int_{-1}^1 P_{\ell}^m(x) P_{\ell'}^m(x) dx = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \delta_{\ell\ell'}$$

Usando la fórmula (A-26) se demuestra que las Y 's debidamente normalizadas son:

$$(A-27) \quad Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = \left(\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!} \right)^{1/2} (-)^m P_{\ell}^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

para $m \geq 0$. Estas funciones son llamadas armónicos esféricos; su valor para $m < 0$ se puede tomar como:

$$(A-28) \quad Y_{\ell}^m = (-)^m Y_{\ell}^{-m}$$

c) Reducción del hamiltoniano para fuerzas centrales

Cuando una fuerza es central el operador L^2 es una integral de movimiento, por lo que las eigenfunciones del hamiltoniano pueden ser eigenfunciones del movimiento orbital.

Primero, en el sistema de coordenadas esféricas, el operador laplaciano es:

$$(A-29) \quad \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Insertando la ecuación (A-15) se puede reescribir esta expresión en la forma

$$(A-30) \quad \hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \hat{L}^2$$

donde se está tomando en cuenta que $\mathbf{p}^2$ es igual a $-\hbar^2 \nabla^2$. Esta fórmula sugiere que se escriba

$$(A-31) \quad \hat{p}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{r^2} \quad \text{donde} \quad \hat{p}_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

Sea ahora $V(r)$ el potencial central; haciendo uso de la ecuación (A-31) se puede escribir el hamiltoniano en la forma

$$(A-32) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r)$$

Como toda la dependencia angular del hamiltoniano está contenida en el término proporcional a L^2 , la función de onda $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ se puede factorizar como el producto de una función radial $R_n(r)$ y la función angular $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$. En efecto, si se escribe

$$(A-33) \quad \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

y se sustituye en la ecuación de Schrödinger, tomando en cuenta que los armónicos esféricos son eigenfunciones de L^2 , es decir:

$$(A-34) \quad \hat{L}^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m$$

se obtiene que

$$(A-35a) \quad \begin{aligned} \hat{H}\Psi &= \left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) Y_l^m \\ &= \left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) Y_l^m = E R(r) Y_l^m \end{aligned}$$

Por lo tanto, si se cancela Y_l^m , la ecuación de Schrödinger se reduce a su parte puramente radial:

$$(A-35b) \quad \left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r)$$

APÉNDICE B. POTENCIALES CENTRALES

a) Reducción del problema de dos cuerpos

Ahora, supóngase un sistema compuesto de dos cuerpos o dos partículas. El hamiltoniano del sistema se construye como la suma del hamiltoniano de cada partícula más el potencial (o hamiltoniano) de interacción. Por lo tanto, si se supone que el potencial de interacción depende sólo de la posición de las partículas, se escribe:

$$(B-36) \hat{H}(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}_1(\hat{p}_1, \vec{r}_1) + \hat{H}_2(\hat{p}_2, \vec{r}_2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

los hamiltonianos H_1 y H_2 a su vez pueden escribirse en la forma

$$(B-37) \hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + V_i(\vec{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_i(\vec{r}_i) \quad i = 1, 2, \dots$$

donde p_i representa el momento de la i -ésima partícula. La ecuación de Schrödinger es, entonces (para el caso estacionario),

$$(B-38) E\Psi = \hat{H}\Psi = \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \Psi$$

Suponiendo que el sistema está aislado, y que - por lo tanto - los potenciales que producen los campos externos son nulos, por lo que sólo existe el potencial de interacción entre las partículas; la ecuación (B-38) se transforma en:

$$(B-39) E\Psi = \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \Psi$$

Para seguir adelante en la resolución de este problema hay que especificar más propiedades del sistema. Ahora sólo se está interesado en el potencial de interacción que sólo depende de la posición de las partículas, es decir:

$$(B-40) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Para este potencial la ecuación de Schrödinger es:

$$(B-41) E\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] \Psi$$

Dada la estructura del potencial, conviene pasar de las variables r_1 y r_2 a las variables relativas y de centro de masa, definidas como sigue:

$$(B-42) \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$(B-43) \quad \vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M}$$

donde M es la masa total de sistema:

$$(B-44) \quad M = m_1 + m_2$$

De (B-42) y (B-43) se sigue que

$$(B-44a) \quad \nabla_1 = \nabla_r + \frac{m_1}{M} \nabla_R$$

$$(B-44b) \quad \nabla_2 = -\nabla_r + \frac{m_2}{M} \nabla_R$$

Con el cuadrado de estos operadores se encuentra que

$$(B-45) \quad \frac{\nabla_1^2}{m_1} + \frac{\nabla_2^2}{m_2} = \frac{\nabla_r^2}{\mu} + \frac{\nabla_R^2}{M}$$

donde μ es la masa reducida del sistema

$$(B-46) \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^{-1}$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (B-41), se obtiene

$$(B-47) \quad E\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi$$

Esta ecuación se resuelve con el método de separación de variables, entonces, se hace lo siguiente

$$(B-48) \Psi(\bar{R}, \bar{r}) = \phi(\bar{R}) \psi(\bar{r})$$

descomponiendo la energía en dos partes

$$(B-49) E = E_R + E_r$$

se obtiene que

$$(E_R + E_r) \phi \psi = -\frac{\hbar^2}{2M} \psi \nabla_R^2 \phi + \phi \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(\bar{r}) \right] \psi$$

esta expresión se puede separar en el siguiente par de ecuaciones

$$(B-50) E_R \phi(\bar{R}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \phi$$

$$(B-51) E_r \psi(\bar{r}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi + V \psi$$

La ecuación (B-50) se refiere al movimiento libre de una "partícula" de masa M (a este tipo de partículas matemáticas se les llama cuasipartículas), cuya posición es R , la coordenada del centro de masa de las partículas 1 y 2; luego, se ve de la ecuación para el centro de masa, que se mueve libremente con energía E_R . Este movimiento es irrelevante para el presente propósito, basta con que se pase al sistema de coordenadas en el que el centro de masa esté en reposo (sistema del centro de masa) para que se pueda tomar la solución trivial $E_R = 0$, $\phi = \text{const.}$

La ecuación (B-51), por el contrario, describe el movimiento de una cuasipartícula de masa reducida μ , asociada al movimiento relativo de las partículas 1 y 2, sobre la que actúa el potencial $V(r)$.

Ya se vio (apéndice A), que en el caso de potenciales centrales, la ecuación (B-51) puede resolverse si se escribe $\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$, donde la ecuación radial $R(r)$ está dada por

$$(B-52) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r)$$

donde ahora $m = \mu$, $r = r_1 - r_2$, $p_r = -i\hbar(1/r)(\delta/\delta r)r = -i\hbar(\delta/\delta r + 1/r)$ y además,

$$\hat{p}_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = -\frac{\hbar^2}{r^2} \left(2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{r} \left(2 \frac{\partial}{\partial r} + r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right)$$

$$(B-53) \quad \hat{p}_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) = -\frac{\hbar^2}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \right) \right) = -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r$$

Ahora conviene introducir una nueva función radial $u(r)$ definida como

$$(B-54) \quad u(r) = r R(r) \quad ; \quad R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

Así pues, la ecuación (B-52) queda de la siguiente manera:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \cdot r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] \frac{u(r)}{r} = E \frac{u(r)}{r} \Rightarrow$$

$$(B-55) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r)$$

que es precisamente la forma de la ecuación de Schrödinger unidimensional. De esta manera, el problema central de dos cuerpos ha sido formalmente reducido al problema unidimensional de una cuasipartícula asociada al movimiento radial relativo; actuada por el potencial efectivo $V + \hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2$ en la región $r \geq 0$.

Debido a los factores $1/r$, tanto p_r (y, por lo tanto, p_r^2) como la ecuación (B-55) quedan sin definir para $r = 0$; por ello, es necesario especificar la condición de frontera que debe cumplirse en el origen de coordenadas. Para obtenerla, obsérvese que si p_r es hermitiano respecto a las eigenfunciones (cuadráticamente integrables) del hamiltoniano, entonces, el hamiltoniano también resultará hermitiano respecto a sus eigenfunciones. De una integración por partes se sigue que

$$(B-56) \quad \int_0^\infty R_2^* (\hat{p}_r R_1) r^2 dr = (-i\hbar) R_2^* R_1 r^2 \Big|_0^\infty + \int_0^\infty R_1 (\hat{p}_r^* R_2^*) r^2 dr$$

en donde R_1 y R_2 son dos funciones radiales arbitrarias. Entonces, para que se cumpla la hermiticidad de p_r respecto a las eigenfunciones del hamiltoniano es necesario que:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (r R_1) = \lim_{r \rightarrow \infty} (r R_2^*) = 0 \quad \text{y que}$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 R_1 R_2^* = 0$$

esto se cumple, en particular, si se impone la condición $u(0) = 0$. Para todos los problemas relativistas, esta condición de frontera es suficiente para seleccionar las soluciones radiales aceptables; ella es equivalente a demandar que la función radial $R(r) = u(r)/r$ permanezca finita en el origen, o bien, a considerar que en la ecuación unidimensional (B-55) el potencial V es infinito para $r < 0$. En otras palabras, las soluciones aceptables son las soluciones impares (que se anulan en el origen) del problema unidimensional de Schrödinger con potencial $V(|x|) + \hbar^2 l(l+1)/2\mu x^2$.

b) El átomo hidrogenoide

Ahora se trata de estudiar el movimiento relativo de un electrón único alrededor de un núcleo de carga positiva Ze . Como inicio del estudio del átomo hidrogenoide, se analizará el comportamiento asintótico de la función radial $u(r)$ cuando $r \rightarrow 0$ y cuando $r \rightarrow \infty$, para potenciales $V(r)$ que cumplan con las siguientes condiciones

$$a) \lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$$

$$b) \lim_{r \rightarrow \infty} r V(r) = 0$$

Véase primero el comportamiento de u en el origen. De la ecuación (B-55) y la condición a) se sigue que

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(-r^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} + V r^2 u \right) = \lim_{r \rightarrow 0} E r^2 u$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(-r^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \right) = 0$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(r^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} \right) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m}$$

entonces, muy cerca del origen,

$$r^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m}$$

Así pues, cuando $r \rightarrow 0$, se tiene que

$$(B-58) \quad \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = 0$$

Esta ecuación posee solución de la forma r^s ; sustituyendo $u = Ar^s$, se tiene que

$$\frac{d^2}{dr^2}(Ar^s) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} Ar^s = 0 \Rightarrow As(s-1)r^{s-2} - A(\ell(\ell+1))r^{s-2} = 0$$

$$\Rightarrow s(s-1) - \ell(\ell+1) = 0 \Rightarrow s^2 - s - \ell(\ell+1) = 0 \Rightarrow$$

$$(B-59) \quad s = \frac{1 \pm (1 + 4\ell(\ell+1))^{1/2}}{2} = \frac{1 \pm [(2\ell+1)^2]^{1/2}}{2} = \frac{1 \pm (2\ell+1)}{2} = \ell+1, -\ell$$

La solución con s negativa o nula, $s = -\ell$, no es aceptable, pues no cumple con la condición (B-57), $u(0) = 0$. Así pues, el comportamiento de u cerca del origen es

$$(B-60) \quad u \sim r^{\ell+1}$$

En el límite de r muy grande, el potencial efectivo se anula por la propiedad b) anterior, con lo que la ecuación (B-55) se reduce a

$$(B-61) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} = Eu$$

cuya solución es (omitiendo el factor de normalización)

$$(B-62) \quad u = e^{ar}$$

donde la constante α está dada por

$$(B-63) \quad \alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

Se ve que hay dos casos posibles para los cuales el comportamiento asintótico de u en el infinito es enteramente diferente. Si la energía E es negativa, α resulta ser real, con un valor positivo y uno negativo, de igual magnitud. En este caso, la función de onda crece o decrece exponencialmente en el infinito; la condición de integrabilidad del cuadrado de la función de onda elimina la solución con α positiva, por lo que para energías negativas, se obtiene

$$(B-64) \quad u \sim e^{-\alpha r}, \quad \alpha = \frac{(2m|E|)^{1/2}}{\hbar} \quad (r \rightarrow \infty)$$

Por el contrario, si la energía es positiva, α tiene valores imaginarios. La función de onda es oscilatoria en el infinito y la combinación requerida de las dos soluciones queda determinada por la demanda de empatao de u con la solución que viene del origen.

Es decir, cuando la energía es negativa, se forman estados ligados; este caso corresponde clásicamente a la aparición de órbitas cerradas y, naturalmente, la densidad de electrones debe decrecer rápidamente conforme uno se aleja del centro atractivo, lo que da origen al decrecimiento exponencial de u . Por otro lado, las energías positivas se obtienen, por ejemplo, lanzando partículas contra un centro atractivo, el cual las desvía de su trayectoria inicial, pero no puede capturarlas. Este caso corresponde clásicamente a órbitas abiertas. Como las partículas pueden escapar a distancias arbitrarias del centro dispersor, la función de onda se puede mantener finita conforme r crece. De esta manera, se concluye que al sistema ligado le corresponden energías negativas que forman un espectro discreto, mientras que los estados de dispersión corresponden a energías positivas con espectro continuo.

En particular, en el caso del átomo hidrogenoide; si el núcleo posee Z cargas positivas, el potencial está dado por la expresión

$$(B-65) \quad V = -\frac{Ze^2}{r}$$

entonces, la ecuación radial se escribe

$$(B-66) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right) u = E u$$

Para estudiar en lo fundamental las soluciones que corresponden a estados ligados es conveniente reescribir la ec. (B-66) en forma adimensional, cosa que se puede hacer en términos de la variable ρ definida como:

$$(B-67) \quad \rho = 2\alpha r$$

en donde α está dada por la ec. (B-64) (el factor 2 se escoge por conveniencia). Haciendo este cambio de variable se obtiene que ($u' = du/d\rho$)

$$(B-68) \quad u'' + \left(-\frac{1}{4} + \frac{Z}{\alpha a_0} \frac{1}{\rho} - l(l+1) \frac{1}{\rho^2} \right) u = 0$$

donde

$$(B-69) \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Se propone la solución

$$(B-70) \quad u = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} Q(\rho)$$

donde $e^{-\rho/2}$ garantiza el correcto comportamiento asintótico de u . La ecuación diferencial que resulta de sustituir (B-70) en (B-68) es

$$(B-71) \quad Q'' + \left(\frac{2(l+1)}{\rho} - 1 \right) Q' + \frac{(Z/\alpha a_0) - l - 1}{\rho} Q = 0$$

Para averiguar qué condiciones de frontera se deben imponer a Q , se procede como sigue. En el origen u toma la forma $u \approx \rho^{l+1} Q(0)$ y (B-60) se satisface con $Q(0) = \text{constante}$. Cuando $r \rightarrow \infty$ pueden pasar dos cosas: a) Si Q crece menos rápido que $e^{-\rho/2}$ se tendrá que $e^{-\rho/2} Q \rightarrow 0$ y ψ corresponderá a un estado ligado; b) si Q crece más rápido que $e^{-\rho/2}$, entonces, el producto $e^{-\rho/2} Q$ diverge en el infinito; como, de acuerdo con la ec. (B-62), esta divergencia deberá ser exponencial, se tendrá en este

caso que $e^{-\rho/2}Q \sim e^{-\rho/2}$ y la función de onda será físicamente inaceptable. Se concluye que si Q se expresa como una serie de potencias de ρ , esta serie deberá reducirse a un polinomio (es decir, crecer más lentamente que una exponencial) para ser físicamente aceptable. Resulta que las soluciones de (B-71) que aquí interesan son polinomiales. Un estudio de la ecuación diferencial muestra que tales soluciones existen, si y sólo si el coeficiente numérico del último término es un entero no negativo, es decir si:

$$(B-72) \quad \frac{Z}{\alpha a_0} - l - 1 = k \quad ; \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

En este caso las soluciones polinomiales de la ecuación (B-71) son los polinomios asociados de Laguerre, los cuales están dados por

$$(B-73) \quad Q \equiv Q_k^{2l+1}(\rho) = e^{\rho} \rho^{-(2l+1)} \frac{d^k}{d\rho^k} e^{-\rho} \rho^{k+2l+1}$$

Para estudiar las consecuencias de la condición de cuantización, se reescribe la ec.(B-72) en la forma:

$$(B-74) \quad \frac{Z}{\alpha a_0} = k + l + 1 = n$$

donde se ha introducido el número cuántico principal n , que puede tomar valores 1, 2, 3, ...; mientras que el momento angular $l = n - 1 - k$ queda restringido a números enteros que cumplan con la condición

$$(B-75) \quad l \leq n - 1$$

Las funciones radiales del átomo hidrogenoide se obtienen introduciendo la ecuación (B-73) en (B-70) y recordando que $R = u/r$; se obtiene así que

$$(B-76) \quad R_{n,l}(\rho) = C_{n,l} \rho^l e^{-\rho/2} Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

El coeficiente de normalización se obtiene de la condición $\int_0^\infty r^2 R_{nl}^2 dr = 1$ y resulta que

$$(B-77) C_{nl} = \frac{2}{n^2} \left(\frac{Z^3/a_0^3}{(n-l-1)!(n+l)!} \right)^{1/2}$$

APÉNDICE C. CRITERIO DE APLICABILIDAD DE LA APROXIMACIÓN DE BORN

Como criterio de aplicabilidad de la aproximación de Born se puede proponer que la segunda corrección a la función de onda (III.64) sea mucho menor que la magnitud de la primera (recuérdese que $|A| = |B| = 1$); es decir,

$$(C-1) \quad \left| \frac{\mu B}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{i\mathbf{k}(\bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}}')}}{|\bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}}'|} V(\bar{\mathbf{r}}') \phi(\bar{\mathbf{r}}') \right| \ll |\phi(\bar{\mathbf{r}})| = 1$$

o bien, como es muy común, tomando $|V(0)| > |V(r)|$ para $|r| > 0$, entonces se tiene la condición más simple, que se refiere a las correcciones en $r = 0$,

$$(C-2) \quad \left| \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty d^3r' \frac{e^{i\mathbf{k}|\bar{\mathbf{r}}'|}}{|\bar{\mathbf{r}}'|} V(\bar{\mathbf{r}}') e^{i\bar{\mathbf{r}} \cdot \bar{\mathbf{r}}'} \right| \ll 1$$

donde se ha sustituido $\phi(r')$. Si $V(r) = V(r)$, ésta se reduce a la integral simple, entonces, integrando sobre las variables angulares θ y φ , haciendo los usuales cambios de variable, se tiene que

$$(C-3) \quad \frac{\mu}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty dr' V(r') (e^{i\mathbf{k}r'} - 1) \right| \ll 1$$

Ahora sustituyendo $V(r)$ se puede ver que para la parte del potencial que contribuyó en (5.70), la condición (C-3) será

$$(C-4) \quad \mu Z_1 e^2 \left[(\ln \sqrt{1 + 4(\mu/\alpha)^2})^2 + \left(\arctan \frac{2\mu}{\alpha} \right)^2 \right]^{1/2} \ll \hbar^2 \mu$$

Así pues, se ve que se cumple la condición de aplicabilidad si el potencial es débil y/o la energía del movimiento relativo es alta.

REFERENCIAS

1. S.F.C. O'ROURKE, D.M. Mc SHERRY, D.S.F. CROTHERS
COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS 131, 129 (2000).
2. B.B. DHAL; ET AL; PHYS. REV. A,62, 022714 (2000)
3. S.G. TOLMANOV AND J.H. Mc GUIRE
PHYS. REV. A62, 032711 (2000)
4. E. MERZBACHER, THE PHYSICS OF ELECTRONIC AND ATOMIC
COLLISIONS IN: PRUC.13.INT.CENF.J.E. ERCHLER (ED.) 1983, B1
5. D.S.F. CROTHERS, J.F. Mc CANN, J.PHYS.B: AT. MOL. OPT. PHYS. 16
(1983) 3229
6. P.D. FAINTEN, V.H. PONCE, R.D RIVAROLA, J. PHYS. B: AT. MOL. OPT.
PHYS 21. (1988) 287
7. N. STOITERFUTH, D.R. DUBOIS Y R.D. RIVAROLA
ELECTRON EMISSION IN HEAVY ION-ATOM COLLISIONS
(SPRINGER VERLEG, BERHN, 1997).
8. L. SARKADI, J. PÁLINKAS, KOVER, D. BERENYI AND
T. VAJNAI. PHYS. REV. LETT 62, 527 (1989)
9. C.R. GARIBOTI AND R.O. BARRACHINA, NIM B86,96 (1994)
10. V. MERGEL, ET AL, PHYS. REV. LETT. 79, 387 (1997)
11. G.N. OGURTSOV, R.N. 11' IN, V.M. LAVROV AND S.V. AVAKYAN,
PHYS CHEM. EARTH 25, 587 (2000)
12. F.F.S. VAN DER TAK AND E.F. VAN DISHOCK. ASTRONOMY
AND ASTROPHYSICS 358, L79 (2000)
13. G.S. KUDRYASHEV AND S.V. AVAKYAN.
PHYS.CHEM. EARTH 25, 511 (2000)
14. R.V. CHIFLIKYAN PLASMA PHYS, REPORTS 22, 66 (1996)
15. N. F. MOTT, PROC. CAMBR. PHIL. SOC. 27 (1931) 553
16. H. BETHE, ANNALEN D. PHYS. 5 (1930) 325
17. W. HENNEBERG, ZS.f. PHYS. 86, (1933)592
18. D. JAMNIK AND C. ZUPANCIC, MAT. FIS. MEDD. DAN. VID. SELSK.
31, No. 2 (1957)
19. J. BANG AND J.M. HANSTEEN. MAT. FYS. MEDD. DAN. VID.
SELSK.31 No.13 (1959)
20. I.E. IRODOV. LEYES FUNDAMENTALES DE MECÁNICA.
EDITORIAL MIR. (1981)
21. D.C. MURDOCH. GEOMETRÍA ANALÍTICA. EDITORIAL LIMUSA
(1968) PAG. 267
22. J. CHADWICK: PHIL. MAG. 24, 594 (1912)

23. F.P. SLATER: PHIL. MAG. 42, 904 (1921)
24. C. GERTHSEN: Z: PHYSIK 36, 540 (1926)
25. N. BOHR: KGL. DANSKE VID. SELSK., MAT-FYS. MEDD. 18, No. 1 (1948).
26. E. MERZBACHER AND H.W. LEWIS, ENCYCLOPEDIA OF PHYSICS, EDITED BY S. FLÜGGE (SPRINGER-VERLAG, BERLIN, 1958), VOL. 34, P. 166.
27. W. BRANDT, R. LAUBERT, AND I. SELLIN, PHYS. REV. 21, 518 (1966)
28. W. BRANDT, R. LAUBERT, AND I. SELLIN, PHYS. REV. 151, 56 (1966)
29. W. BRANDT AND R. LAUBERT, PHYS. REV. 178, 225 (1968)
30. M. DE LLANO. MECÁNICA CUÁNTICA, EDITORIAL LAS PRENSAS DE CIENCIAS, FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM. (1996)
31. L. DE LA PEÑA. INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA CUÁNTICA, EDITORIAL EDICIONES CIENTÍFICAS UNIVERSITARIAS, FONDO DE CULTURA ECONÓMICA, UNAM. (1991)
32. NIELS BOHR, MAT. FYS. MEDD. DAN. VID. SELSK. 18, No. 8 (1948)
33. J. E. MARSDEN, M. J. HOFFMAN. ANÁLISIS BÁSICO DE VARIABLE COMPLEJA, EDITORIAL TRILLAS. (1996)
34. K. ALDER AND A. WINTHNER. DAN. MAT. FYS. MEDD. 29, No. 18 (1955)
35. T. HUUS, J.H. BJERREGAARD AND B. ELBEK: KGL. DANSKE., MAT-FYS. MEDD. No. 17 (1956). VER ESPECIALMENTE APÉNDICE I.
36. CHEMICAL RUBBER PUBLISHING COMPANY. STANDARD MATHEMATICAL TABLES. INTERNATIONAL COPYRIGHT UNION. 1954 U.S.A.
37. J. W. FRAME, PROC. CAMBR. SOC. 27 (1931) 511
38. A. ERDÉLYI. ET AL., HIGHER TRANSCENDENTAL FUNCTIONS (McGRAW HILL, NEW YORK, 1953)
39. G. N. WATSON, THEORY OF BESSEL FUNCTIONS (THE UNIVERSITY PRESS, CAMBRIDGE, 1944)
40. K. A. TER-MARTIROSYAN AND ZUNRNAL EKSPER. i TEOR. FIZ. 22 (1952) 284.
41. H. JANZEKOVIC, Z. SMIT, M. BUDNAR, A. MÜHLEISEN, M. RAVNIKAR, V. RAMSAK, P. PELICON. NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH B 100 (1995) 10 – 16.
42. W. M. ARIYASINGHE AND D. POWERS. PHYSICAL REVIEW A. VOLUME 59, NUMBER 2. FEBRUARY (1999).

43. S. OUZIANE, A. AMOKRANE, M. ZILABDI.
NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS
RESEARCH B 161-163 (2000) 141-144.
44. J. MIRANDA, L. RODRÍGUEZ – FERNÁNDEZ, O. G. DE LUCIO,
K. LÓPEZ, AND J. A. HARADA. INSTRUMENTACIÓN.
REVISTA MEXICANA DE FÍSICA 46 (4) 367-372. (2000).
45. A. GHEBREMEDHIN, W. M. ARIYASINGHE, AND D. POWERS.
PHYSICAL REVIEW A. VOLUME 53, NUMBER 3. (1996).
46. F. S. WOODS, F. H. BAILEY. ANALITIC GEOMETRY AND CALCULUS.
ED. THE ATHENEUM PRESS. (1938) U.S.A.
47. JACK VANDERLINDE. CLASSICAL ELECTROMAGNETIC.
ED. JOHN WILEY & SONNS, INC. (1993) CANADA.
48. J. M. KHAN, D. L. POTTER, AND R. D. WORELY, PHYS. REV. 139, A1735
(1965)
49. H. PAUL, J. SACHERT, ATOMIC DATA AND NUCLEAR DATA TABLES
42 (1989) 105
50. S. MESSELT, NUCL. PHYS. 5 (1958) 435
51. B. SINGH, PHYS. REV. 107 (1957) 711
52. P.GOMBÁS, DIE STATISCHE THEORIE DES ATOMS (SPRINGER –
VERLAG WIEN, 1949)