

24.31

EL FORMALISMO DE OPERADORES DE PROYECCION Y PROYECTORES  
EN LA TEORIA DE DISPERSION

Tesis que para obtener el titulo de  
Fisico presenta:

HERNAN LARRALDE RIDAURA

Facultad de Ciencias, U.N.A.M.  
México D.F. Julio 1988



## **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 está 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.

## INDICE

Introducción	1
Capítulo I	5
Capítulo II	9
Capítulo III	25
Capítulo IV	37
Bibliografía	60

## INTRODUCCION

El objetivo principal de este trabajo es presentar y desarrollar la matriz de transición para las reacciones de dispersión en general, bajo el esquema del formalismo de Feshbach; pero en lugar de hacer uso de los operadores de proyección de Feshbach, el desarrollo se realiza con operadores de proyección finitos y discretos, a los que se llamó proyectores, dando lugar a una expresión cerrada para la matriz de transición tan sólo en términos de las funciones que se dan por conocidas en el formalismo de Feshbach. Se muestra que la matriz de transición tiene la estructura característica de las matrices de transición con resonancias.

El interés que reviste este trabajo se debe, en primera instancia, a la belleza del formalismo de Feshbach, que mediante una transformación formal de la ecuación de Shroedinger obtiene de manera sencilla, resultados muy ricos conceptualmente, que son directamente aplicables a la teoría de dispersión. Sin embargo, cuantitativamente las expresiones son muy complicadas y difíciles de aplicar. La matriz que se obtiene en este trabajo, además de ser finita y discreta, está expresada en términos de las funciones que se dan por conocidas en el formalismo de Feshbach, por lo que, en principio, debe ser más fácil de aplicar a cálculos.

La tesis se divide en cuatro capítulos. El capítulo I es una breve introducción al tema de dispersión. En este capítulo se define el fenómeno de dispersión, de manera general, como el proceso en que dos o más partículas penetran a una región de interacción,

de la cual emergen una, dos o más partículas. Se plantea la predicción de probabilidad de cada configuración del estado final, como el objetivo de las teorías de dispersión.

En el capítulo II se introducen y explican los elementos fundamentales de la descripción cuántica del fenómeno de dispersión. Estos son la sección transversal,  $\sigma(\Theta, \psi)$ ; la amplitud de dispersión,  $f(\Theta, \psi)$ ; la matriz de dispersión,  $S$ ; y la matriz de transición,  $T$ ; y se muestra la relación entre ellos.

En el capítulo III se explica el fenómeno de resonancia como un evento propio de la dispersión por sistemas complejos. Como consecuencia de este fenómeno, el espectro de la sección transversal tiene una estructura característica que se explica a través de una matriz de transición del tipo:

$$T = T_p + \frac{A}{E - E_r + i\Gamma/2}, \quad (1.1)$$

que se conoce como matriz de transición con resonancias.

Para hacer la descripción de las resonancias a través del formalismo de Feshbach, se introducen los conceptos de canal y de operadores de proyección. El capítulo termina con el desarrollo y obtención de la matriz de transición mediante el formalismo de Feshbach.

En el último capítulo, el IV, se presenta la matriz de transición:

$$T_{ab} = \langle \Psi_a | V_{opt} | \Psi_b \rangle , \quad (1.2)$$

donde  $\Psi_a$  es eigenfunción de  $H_{pp}$ , basada en la similitud entre la ecuación de Schroedinger y la del hamiltoniano equivalente de Feshbach. Se demuestra que esta matriz de transición coincide con la fórmula de Feshbach:

$$T = T_P + \langle \omega_o^{(-)} | H_{PQ} | \Phi_n \rangle \Lambda_n , \quad (1.3)$$

donde:

$$\Lambda_n = \frac{\langle \Phi_n | H_{QP} | \omega_o^{(+)} \rangle}{E - \epsilon_n - \langle \Phi_n | H_{QP} \frac{1}{E - H_0} H_{PQ} | \Phi_n \rangle} . \quad (1.4)$$

Con esta expresión, se desarrolla la matriz de transición siguiendo el método de Domcke; es decir a través de operadores de proyección finitos y discretos, a los que se hará referencia como proyectores. Se llega a que :

$$T_{ab} = [(D^{-1} - \Lambda)_{ab}^{-1}] \quad (1.5)$$

con:

$$\Lambda_{\alpha\beta} = \frac{1}{E_{\beta}^{+} - E_{\beta}} \delta_{\alpha\beta} \quad \gamma \quad D_{\beta\alpha} = \langle \Psi_{\beta} | V_{opt} | \Psi_{\alpha} \rangle \quad (1.6)$$

En el camino se obtienen y comentan las matrices de transición ortogonal y directa de Domcke. Todas estas matrices son discretas y finitas gracias a las características de los proyectores, con lo cual presentan menos problemas de cálculo que la de Feshbach.

Por último, se muestra que la expresión final para la matriz de transición si adquiere la estructura característica en la vecindad de una resonancia. Y se concluye comentando la construcción de la matriz de transición completa y la aplicabilidad de los resultados.

Para terminar esta introducción se hacen notar dos cosas: la primera es que la tesis trata sobre los formalismos de la teoría de dispersión, y por lo tanto no aparece ningún ejemplo numérico; la segunda es que gran parte de los desarrollos aparecen en una variada gama de libros y artículos, y, excepto en los casos especiales, no aparecen las referencias en el texto, por lo cual me disculpo de antemano.

## CAPITULO I

Existen básicamente dos métodos para obtener información sobre un objeto. Estos métodos son: analizar la información que el objeto emite espontáneamente; o interactuar con el objeto bajo condiciones controladas y observar los efectos de la interacción. El estudio de la radioactividad es un ejemplo del primer método, mientras que el bombardeo con partículas alfa sobre núcleos es un ejemplo del segundo. Otros ejemplos de interacción serían calentar un gas, o someterlo a una diferencia de potencial y medir la luz emitida, pero es precisamente el bombardeo el ejemplo que interesa en este trabajo; éste es, la obtención de información sobre un objeto por medio de lanzarle partículas y ver qué pasa; y lo que pasa se conoce como dispersión. Este método es una herramienta extremadamente útil para averiguar, entre otras cosas, las propiedades, estructuras, energías de excitación, etc. de una gran variedad de sistemas: nucleares, atómicos, moleculares, etc.

El primer resultado espectacular obtenido a través de la dispersión de partículas alfa fue el modelo atómico de Rutherford. El experimento consistió en bombardear un lámina de oro con partículas alfa y observar los ángulos en que éstas eran dispersadas. El modelo atómico de Thompson, aceptado en ese tiempo, no era capaz de explicar los resultados obtenidos por Rutherford, mientras que el modelo planetario de Rutherford predecía con exactitud los resultados experimentales.

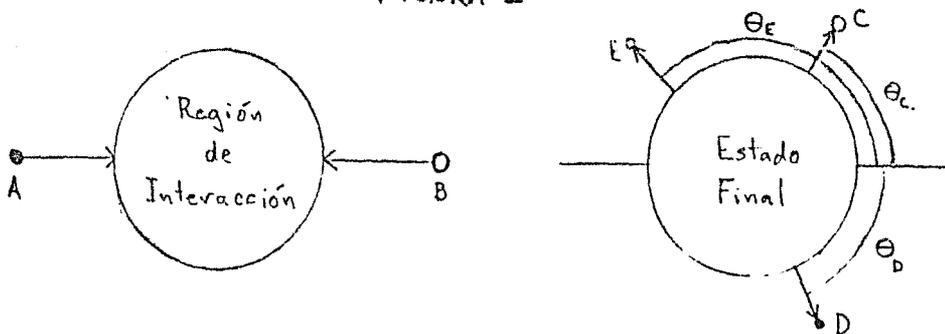
El tratamiento hecho por Rutherford para el fenómeno de dispersión es el ejemplo típico de dispersión clásica. Actualmente, se reconoce a la dispersión como un fenómeno netamente cuántico, y es en este terreno en el que se describe.

Para hacer la descripción del fenómeno, es necesario definir bien lo que se va a entender por dispersión.

En general, una reacción de dispersión puede ser considerada como un proceso en donde dos o más partículas, A, B, C, etc., penetran en una región de interacción, de la cual emergen una, dos o más partículas, D, E, etc.

La siguiente figura representa de manera esquemática un proceso dispersivo, desde un sistema inercial en el cual el centro de masas está en reposo.

FIGURA 1



Dado que la reacción entre las partículas del tipo A y B puede dar lugar a distintos estados finales, es de interés conocer la probabilidad de que, como resultado de la reacción, se obtenga uno u

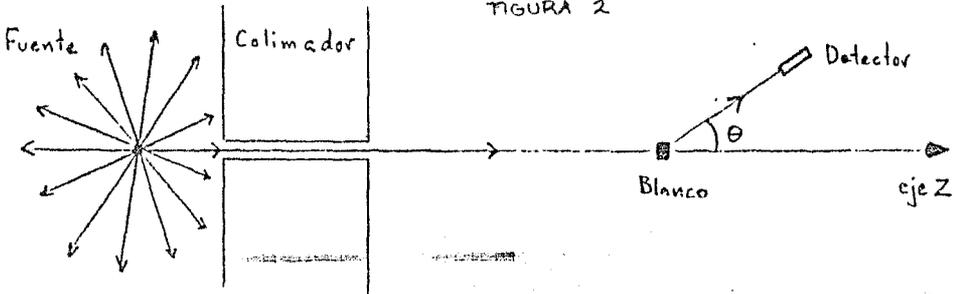
otro estado final. También es de interés conocer la probabilidad de que una partícula con una energía dada salga de la zona de interacción a un ángulo y con una energía determinados. Estos estados finales, energías y ángulos, son, a fin de cuentas, lo que se va a medir en un experimento de dispersión. La energía y la naturaleza de las partículas incidentes definen al estado inicial de la reacción; el número, naturaleza, energías y ángulos de dispersión de las partículas producidas por la reacción definen al estado final.

Entonces, el resultado de un experimento de dispersión se puede expresar, en términos generales, como la distribución de probabilidades correspondientes a un conjunto de estados finales que difieren, por ejemplo, en las energías y los ángulos de dispersión de las partículas emergentes. De esta distribución de probabilidades se puede intentar inferir las características de la interacción entre las partículas incidentes y el blanco.

Por otro lado, al igual que la teoría de colisiones, las reacciones de dispersión se clasifican en elásticas e inelásticas, según sea el balance de energía cinética entre el estado inicial y el estado final.

En términos generales, los elementos indispensables en un experimento de dispersión son: una fuente de partículas, un blanco y un detector; también es conveniente contar con un colimador que aisle al detector de la fuente y produzca un haz delgado dirigido hacia el blanco. Esquemáticamente, el experimento se podría representar de la siguiente manera:

FIGURA 2



Estas condiciones experimentales se deben reflejar en la descripción teórica que se realiza; sin perder de vista que las mediciones se van a tomar a través de un detector inevitablemente situado a una distancia muy grande comparada con la zona de interacción.

A fin de cuentas, la teoría de dispersión intenta predecir, a partir de un modelo de interacción, el espectro que se va a registrar a través del detector en el experimento de dispersión.

## CAPITULO II

En el capítulo pasado se mencionó que el predecir las probabilidades relativas de los posibles estados finales de una reacción de dispersión, es la meta de la teoría de dispersión. Esto es equivalente a predecir el espectro medido en el detector, ya que el experimento de dispersión no consiste en realizar una reacción aislada, sino en una gran cantidad de reacciones, ya sea repitiéndolas, o bombardeando con un haz continuo.

Es costumbre expresar la probabilidad de dispersión de una partícula dada, con una energía determinada, y en cierto ángulo, en términos de un parametro llamado sección transversal diferencial, que es tal que:

$$\left( \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} \right) d\Omega dE = \text{Número de partículas dispersadas en la diferencial de ángulo sólido } d\Omega \text{ con energías comprendidas en el intervalo } (E, E+dE) \text{ por unidad de tiempo por unidad de intensidad del haz incidente.}$$

Es decir:

$$\left( \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} \right) d\Omega dE = \frac{dN}{I} \quad (2.1)$$

Esta definición de sección transversal es válida en cualquier sistema de referencia inercial.

A partir de la sección transversal diferencial, se define la sección transversal total,  $\sigma_T$ , como:

$$\sigma_T = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad , \quad (2.2)$$

que no es otra cosa que el número total de partículas dispersadas por unidad de tiempo, y, en términos generales puede ser función de la energía.

De manera que el objetivo de la teoría será predecir la sección transversal de un fenómeno dispersivo. A continuación se mencionan los elementos más importantes de la teoría de dispersión cuántica, su interrelación y su conexión con la sección transversal de dispersión.

En general, el problema consiste en resolver la ecuación de Schroedinger:

$$H\Psi = E\Psi \quad , \quad (2.3)$$

en donde H es el hamiltoniano de dos partículas:

$$H = \frac{P_A^2}{2m_A} + \frac{P_B^2}{2m_B} + V_{AB} \quad , \quad (2.4)$$

y  $V_{AB}$  es el potencial de interacción entre las dos partículas. Si  $V_{AB} = V_{AB}(|\vec{r}_A - \vec{r}_B|)$ , entonces se pueden hacer los siguientes cambios de variable:

$$\vec{r} \equiv \vec{r}_A - \vec{r}_B \quad \text{y} \quad \vec{R} \equiv \frac{m_A \vec{r}_A + m_B \vec{r}_B}{m_A + m_B} \quad (2.5)$$

Sustituyendo  $P_A = -i\hbar \nabla_A$ , y  $P = -i\hbar \nabla_B$ ,  $M = m_A + m_B$ , y  $m = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$ ; la ecuación (2.3) queda:

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(r) \right] \Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B) = E \Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B) \quad (2.6)$$

Ahora, si se propone  $\Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B) = \Phi(\vec{R}) \Psi(\vec{r})$ , es posible realizar la separación de variables que da lugar a las siguientes ecuaciones:

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \Phi(\vec{R}) = E_c \Phi(\vec{R}) \quad (2.7)$$

y

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(r) \right] \Psi(\vec{r}) = E_r \Psi(\vec{r}) \quad (2.8)$$

en donde  $E_c + E_r = E$  .

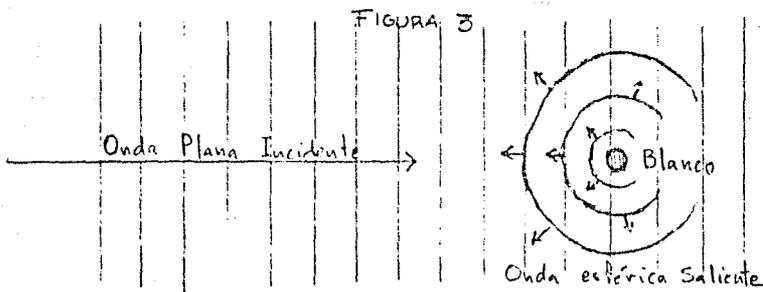
Las soluciones de estas ecuaciones deben satisfacer las condiciones de frontera impuestas por las condiciones en que se realiza el experimento. En general, recordando la descripción del experimento de dispersión del capítulo I, se supondrá que el haz incidente está perfectamente colimado y que es monoenergético, así que se le puede representar por una onda plana. Entonces la solución de la ecuación (2.7), que representa la evolución del centro de masas, es una onda plana monocromática que viaja hacia la derecha; es decir:

$$\Phi(\vec{R}) \propto e^{ikz}, \quad (2.9)$$

en donde  $k = \frac{2M}{\hbar} E$ , y  $Z$  es la componente  $z$  del vector  $R$ . Si no hubiera blanco, entonces  $V_{hp}(r) = 0$  y la ecuación (2.8) también tendría como solución una onda plana, y el problema sería trivial. Es claro que en presencia de un blanco, la solución a la ecuación (2.8) no es una onda plana; sino una función que asintóticamente cumple:

$$\Psi(\vec{r}) \longrightarrow N \left[ e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \right]. \quad (2.10)$$

Donde se introduce la amplitud de dispersión  $f(\Theta, \Psi)$ . Es decir, la función de onda debe constar de una onda plana incidente, mas una onda esférica saliente centrada en el centro dispersor. La amplitud de esta onda esférica está modulada por la amplitud de dispersión  $f(\Theta, \Psi)$ , que depende de la naturaleza de la interacción. Esta condición asintótica se puede visualizar de manera sencilla en la figura (3). La importancia de la amplitud de dispersión radica en que describe a la onda dispersada en la región en la que se realizan las mediciones experimentales. De manera que una vez determinada la función  $f(\Theta, \Psi)$ , se posee toda la información medible de la dispersión.



La ecuación (2.10) no es la solución del problema, pero es suficiente para empezar a analizar el fenómeno de dispersión. Si se toma la onda incidente  $N_{exp}(ikz)$ , la densidad de flujo:

$$\bar{J}(\vec{r}) = \text{Re}[\Psi^* (\hbar/i m) \nabla \Psi] \quad (2.11)$$

queda:

$$\bar{J}(\vec{r}) = \frac{\hbar k |N|^2}{m} \hat{z} \equiv J_i \hat{z} \quad (2.12)$$

Si ahora se calcula la densidad de flujo para la onda esférica saliente se obtiene:

$$\bar{J}(\vec{r}) = |N|^2 \frac{|f(\theta, \varphi)|^2 \hbar k}{r^2} \hat{z} + \dots = J_i \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2} \hat{r} + \dots \quad (2.13)$$

en donde  $\hat{z}$  y  $\hat{r}$  son los vectores unitarios en la dirección  $z$  y en la dirección radial respectivamente. Los demás términos de la ecuación (2.13) son términos en potencias mayores de  $1/r$ , y dado que se está utilizando la expresión asintótica de  $\Psi$ , se pueden ignorar.

Por otro lado, el número de partículas dispersadas al ángulo sólido  $d\Omega$  por unidad de tiempo será:

$$\frac{dN_d}{dt} = J_i \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega = J_i \int \sigma(\theta, \varphi) \frac{dA}{r^2} \quad (2.14)$$

en donde el factor de proporcionalidad  $\sigma(\theta, \varphi)$ , es precisamente la sección transversal diferencial que se mencionó anteriormente. De hecho, esta ecuación contiene exactamente la misma información que la ecuación (2.1).

De la segunda igualdad de la ecuación (2.14), se tiene que la densidad de flujo es:

$$|\bar{J}(\bar{r})| = J; \frac{\sigma(\theta, \varphi)}{r^2}, \quad (2.15)$$

y comparando con la ecuación (2.13) se obtiene:

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2. \quad (2.16)$$

Esta ecuación es la relación fundamental entre el experimento de dispersión y la teoría.

Sin embargo, en la teoría cuántica aparecen otros elementos fundamentales para la descripción del fenómeno de dispersión, uno de ellos es la matriz de dispersión, que a continuación se desarrolla.

A partir de la ecuación de Schroedinger del problema:

$$(E - H_0)\Psi = V\Psi; \quad (2.17)$$

definiendo a las funciones  $\phi_i$ , que son las soluciones de partícula libre, mediante:

$$(E_i - H_0)\phi_i = 0 \quad , \quad (2.18)$$

y resolviendo formalmente la ecuación (2.17) es decir:

$$\Psi_i^{(+)} = \phi_i + \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V \Psi_i^{(+)} \quad ; \quad (2.19)$$

se puede construir un paquete de ondas como sigue:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \Lambda(\vec{k}) \Psi_k^{(+)} \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)E_k t\right] \quad , \quad (2.20)$$

de manera que satisfaga la ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo. Sustituyendo la ecuación (2.19) en la ecuación (2.20) se obtiene:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t) + \Psi_{dis}(\vec{r}, t) \quad , \quad (2.21)$$

en donde:

$$\Psi_{dis}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k A(\vec{k}) \frac{1}{E_k - H_0 + \epsilon i} V \Psi_k^{(+)} \exp[-(i/\hbar) E_k t], \quad (2.22)$$

y haciendo el cambio de variable  $E_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$  queda:

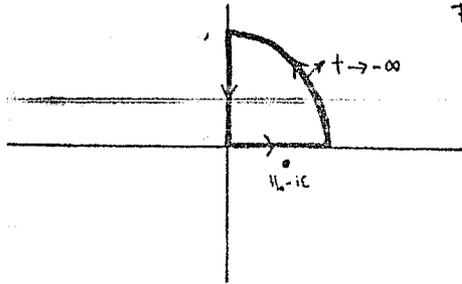
$$\Psi_{dis} = \int_0^\infty dE_k \frac{1}{E_k - H_0 + \epsilon i} \gamma(E_k) \exp[-(i/\hbar) E_k t], \quad (2.23)$$

en donde:

$$\gamma(E_k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int k^2 d\Omega_k \frac{dk}{dE_k} A(\vec{k}) V \Psi_k^{(+)} . \quad (2.24)$$

La ecuación (2.22) se puede integrar sobre el siguiente contorno si se supone que  $\gamma(E_k)$  es continua y suave:

FIGURA 4



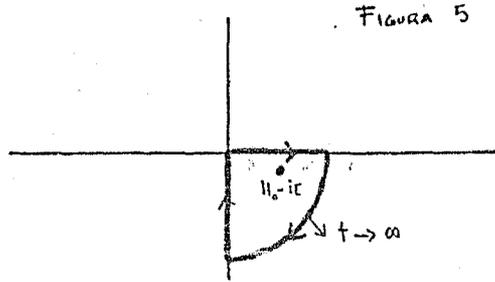
Y dado que la singularidad no está contenida en el contorno de integración, la integral vale cero; además sobre la parte fuera del eje real, el integrando tiende a cero si  $t \rightarrow -\infty$ , por lo que se obtiene:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_{dis}(\bar{r}, t) = 0 \quad (2.25)$$

Este resultado se conoce como condición de onda saliente.

Si ahora se integra la ecuación (2.22) sobre el siguiente

contorno:



se toma el limite cuando  $t$  tiende a infinito y  $\epsilon$  a cero, y se evalúa la integral por residuos, se obtiene:

$$\Psi_{d_{12}} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{-2\pi i}{(2\pi)^3} \int d^3 k \delta(E_k - H_0) A(\bar{k}) V \Psi_k^+ \exp[-(i/\hbar) E_k t]. \quad (2.26)$$

Entonces:

$$\Psi \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k A(\bar{k}) [\phi_k - 2\pi i \delta(E_k - H_0) V \Psi_k] \exp[-(i/\hbar) E_k t]. \quad (2.27)$$

Se define la matriz de dispersión como:

$$S \phi_k = \phi_k - 2\pi i \delta(E_k - H_0) V \Psi_k. \quad (2.28)$$

Ahora, introduciendo el operador de onda  $\Omega^{(+)}$ , tal que:

$$\Psi_i^{(+)} = \Omega^{(+)} \phi_i \quad (2.29)$$

Se puede escribir:

$$S = 1 - 2\pi i \delta(E_k - H_0) V \Omega^{(+)} \quad (2.30)$$

de manera que:

$$\Psi(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} S \phi(t) \quad (2.31)$$

Y dado que  $\Psi_{div}$  tiende a cero cuando  $t \rightarrow -\infty$ , como se vió anteriormente, entonces:

$$\Psi(\vec{r}, t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \phi(\vec{r}, t) \quad (2.32)$$

Así, se puede pensar en una reacción de dispersión como la evolución de una función de onda que, mucho antes de llegar al centro dispersor es prácticamente una función de partícula libre, y mucho tiempo después vuelve a ser función de partícula libre. De manera que se puede interpretar a  $S$  como el operador que transforma a la función de partícula libre inicial en la función de partícula libre final. De esto se puede intuir que la matriz  $S$  debe ser unitaria, que es un resultado bien conocido.

De la expresión (2.30), el operador  $V\Omega^+$  se conoce como operador de transición,  $T$ , es decir:

$$T = V\Omega^{(+)} \quad (2.33)$$

De manera que la matriz de dispersión queda:

$$S = 1 - 2\pi i \delta(E_k - H_0) T \quad (2.34)$$

Es decir, el estado de onda libre final va a ser, como es de esperarse, la onda incidente original más las transiciones de ésta, a causa de la interacción.

Por otro lado, es fácil demostrar que (Rodberg & Thaler, capítulo 6, pag.180):

$$\Omega^{(+)} = 1 + \frac{1}{E - H + i\epsilon} V, \quad (2.35)$$

con lo cual la matriz de transición queda:

$$T = V + V \frac{1}{E - H + i\epsilon} V. \quad (2.36)$$

De manera que:

$$T \phi_i = V \Psi \quad (2.37)$$

Y los elementos de la matriz de transición se definen mediante:

$$T_{ij} = \langle \phi_i | T \phi_j \rangle \quad (2.38)$$

La matriz de transición determina la probabilidad de que el estado de partícula libre inicial  $\phi_j$ , se transforme en otro estado

de partícula libre final  $\Phi_i$ . Es decir, la matriz de transición determina la probabilidad de transición entre un estado inicial y uno final, como resultado de la dispersión.

A continuación se mostrará cómo la matriz de transición aporta directamente la amplitud de dispersión, y por lo tanto también determina la sección transversal.

Escribiendo la ecuación de Schroedinger como sigue:

$$(E - H_0) \Psi_i = V \Psi_i, \quad (2.39)$$

la solución estará dada por:

$$\Psi_i(\vec{r}) = \Phi_i(\vec{r}) + \int d^3 r' G_0(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_i(\vec{r}'), \quad (2.40)$$

en donde  $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$  es la función de Green de partícula libre; haciendo explícitas las condiciones de frontera de la ecuación (2.10) se tiene (tomando  $N=1$ ):

$$\Psi_i^{(+)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + \int d^3 r' G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_i(\vec{r}'). \quad (2.41)$$

Si  $r$  tiende a infinito:

$$G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') \longrightarrow - \left( \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \right) \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}'}, \quad (2.42)$$

y dado que  $\phi_j = e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}}$ , se obtiene:

$$\Psi_i(\vec{r}) \longrightarrow e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} \left( \frac{-2m}{4\pi\hbar^2} \right) \int d^3r' \phi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_i^{(+)}(\vec{r}'). \quad (2.43)$$

Comparando con la ecuación (2.10) se llega a que:

$$f(\theta) = \left( \frac{-2m}{4\pi\hbar^2} \right) \int d^3r' \phi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}') \bar{\Psi}_i^{(+)}(\vec{r}'), \quad (2.44)$$

y dada la definición de  $T_{ij}$ , se tiene:

$$f(\theta) = \left( \frac{-2m}{4\pi\hbar^2} \right) T_{ij} \quad (2.45)$$

De manera que un formalismo que dé lugar a la matriz de transición para una reacción de dispersión, aporta también, a fin de cuentas, la sección transversal.

Con ésto queda clara la importancia de conocer, a través de la teoría, cualquiera de los elementos que se acaban de describir y cuál es la conexión que éstos tienen con los resultados experimentales.

### CAPITULO III

Hasta 1960 se consideraba que el espectro de la sección transversal de la dispersión atómica, cuando se bombardeaba al átomo con electrones cuyas energías fueran mayores al primer umbral de ionización, no tenía mayor interés, por que se consideraba que carecía de estructura. Sin embargo, conforme fue en aumento la resolución de los espectrómetros, se empezaron a detectar cambios abruptos en la sección transversal en intervalos pequeños de la energía.

El fenómeno que ocasiona estos cambios abruptos de la sección transversal como función de la energía, se conoce como resonancia; y a la energía alrededor de la cual sucede, es la energía de resonancia. Este fenómeno es característico de la dispersión por sistemas complejos, y actualmente se conocen miles de resonancias en sistemas nucleares, atómicos, moleculares, etc.

La explicación del fenómeno resulta bastante simple en palabras; el proyectil puede quedar atrapado en uno de los estados ligados del blanco, formándose un estado compuesto excitado de vida larga, comparado con el tiempo que dura una interacción no resonante; este estado compuesto eventualmente decae. Esto tiene como consecuencia el aumento de la sección transversal para energías cercanas a las energías en que estos estados ligados se pueden formar. Esta explicación supone la existencia de estados ligados de energía positiva, o, equivalentemente, que haya en alguna región del

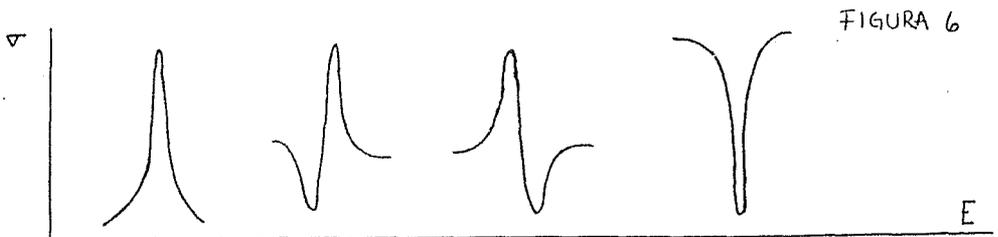
espectro, estados discretos mezclados con estados del continuo. Para ver que esto es posible basta recordar que la ecuación de Schroedinger para el sistema es:

$$H\Psi = (T + V_b + V_p)\Psi = E\Psi, \quad (3.1)$$

donde  $V_b$  es el potencial del blanco,  $V_p$  la interacción entre el blanco y la partícula incidente y  $T$  es el término de energía cinética. Entonces, si bien los estados ligados del blanco son discretos, algunos de éstos quedan dentro del espectro continuo del hamiltoniano completo debido a la presencia de  $V_p$ .

En otras palabras, se puede pensar que una resonancia es la formación de un estado excitado metaestable, seguido de una emisión espontánea que regresa al blanco a su estado base.

Se sabe que la forma característica de la parte resonante pura de la sección transversal es una lorenziana centrada en la energía de resonancia. Sin embargo esto no se observa frecuentemente, debido a que aparecen efectos de interferencia que se deben a la dispersión no resonante. En general, la sección transversal en una resonancia puede tener alguna de estas formas:



dependiendo de cómo sea la dispersión directa en esa dirección.

La matriz de transición que da lugar a este tipo de espectros es:

$$T = T_p + \frac{A}{E - E_r + i\Gamma/2}, \quad (3.2)$$

donde  $\Gamma$  tiene que ver con la anchura de la resonancia;  $T_p$  es la parte no resonante, o directa, de la matriz de transición, y varía lentamente con la energía;  $E_r$  es la energía de resonancia; y  $A$  es la amplitud de la resonancia.

Para ver que una matriz de transición de este tipo da lugar a las secciones transversales que se muestran en la figura (6), se escribe  $T_p$  explícitamente como sigue:

$$T_p = T_a + iT_b. \quad (3.3)$$

De manera que la sección transversal será proporcional a:

$$|T|^2 = (T_a^2 + T_b^2) + \frac{1}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2} \left[ A^2 + 2A(E - E_r) - \frac{\Gamma T_b}{2} \right] \quad (3.4)$$

y se ve claramente que según sean los valores relativos de  $T_a$ ,  $T_b$ ,

y A; se obtendrá una u otra forma para el espectro de  $\nabla$ .

Cualquier formalismo que pretenda describir correctamente al fenómeno de resonancia debe dar lugar a una matriz de transición de la forma presentada en la ecuación (3.2).

Existen varios formalismos para describir las reacciones de dispersión resonantes. De entre ellos, el formalismo de operadores de proyección de Feshbach, que es el que interesa para este trabajo, tiene la ventaja de ser conceptualmente transparente y cualitativamente rico, además de ser completamente general, aunque difícil de usar cálculos. Para captar la esencia de este formalismo, desarrollado por Feshbach en 1962 originalmente para reacciones nucleares, es necesario introducir los conceptos de canal y de operadores de proyección.

Por costumbre, a cada configuración posible del blanco y el proyectil se la llama canal. La configuración inicial es el canal de entrada, mientras que las posibles configuraciones finales son los canales de salida. A éstos también se les llama canales abiertos, mientras que las configuraciones que, dado el canal de entrada, son imposibles, se les llama canales cerrados.

La idea fundamental del formalismo de Feshbach es expresar la mezcla de estados discretos y continuos a través de la interacción entre canales abiertos y cerrados.

El otro elemento fundamental del formalismo de Feshbach es el uso operadores de proyección P y Q. Estos operadores deben cumplir las siguientes condiciones:

- a) deben ser idempotentes:

$$P^2 = P \quad \text{y} \quad Q^2 = Q, \quad (3.5)$$

y b) deben definir una partición del espacio completo:

$$P + Q = 1 \quad (3.6)$$

Si cumplen estas condiciones, es fácil demostrar que:

$$PQ = QP = 0 \quad (3.7)$$

De estas características se ve que P y Q definen subespacios ortogonales en el espacio de Hilbert.

Fuera de estas condiciones P y Q son completamente arbitrarios y el formalismo que se presenta mas adelante es independiente de la forma de los operadores de proyección.

Sin embargo, por lo general los operadores de proyección se definen de manera que:

$$P\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \psi, \quad (3.8)$$

y por lo tanto:

$$Q\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (3.9)$$

para cualquier  $\Psi$ . De manera que la partición que inducen en el espacio de Hilbert es tal que el espacio P contiene a todas las funciones que asintóticamente se pueden expandir en términos de las funciones de canal abierto; mientras que el espacio Q contiene a las funciones que asintóticamente no tienen proyección en los canales abiertos. Es decir, el operador P selecciona la parte experimentalmente medible de una función; mientras que Q selecciona la parte de la función que no repercute en la región asintótica.

Bajo estas hipótesis, es evidente que lo que interesa conocer es la parte de la solución que esta en el espacio P.

Feshbach propone que si existen funciones que sean eigenfunciones de la proyección en el canal cerrado del hamiltoniano, pero que el hamiltoniano actuando sobre ellas sí tenga proyección en los canales abiertos, esto da lugar a las resonancias. Es decir, si existe un conjunto  $\{\Phi_n\}$  tal que:

$$QH\Phi_n = \epsilon_n \Phi_n, \quad (3.10)$$

pero:

$$PH\Phi_n \neq 0$$

(3.11)

entonces las funciones de canal abierto van a verse afectadas por la proyección  $PH\Phi_n$ , dando lugar a las resonancias. Para ver que es así, a continuación se presenta el desarrollo de Feshbach hasta obtener la matriz de transición, que tiene la forma típica de la matriz de transición con resonancias que se presentó anteriormente.

Sea  $\Psi$  la solución a la ecuación de Schroedinger independiente del tiempo:

$$H\Psi = E\Psi$$

(3.12)

Si se aplica  $P$  a esta ecuación se tiene:

$$PH\Psi = EP\Psi$$

(3.13)

Usando la condición (3.6) se puede escribir:

$$PH(P\Psi + Q\Psi) = EP\Psi,$$

(3.14)

y dado que P y Q son idempotentes se llega a que:

$$(H_{PP} - E)P\psi = -H_{PQ}Q\psi, \quad (3.15)$$

en donde:

$$H_{PP} \equiv PHP \quad \text{y} \quad H_{PQ} \equiv PHQ. \quad (3.16)$$

Análogamente, si se aplica Q a la ecuación (3.12) se llega a:

$$(H_{QQ} - E)Q\psi = -H_{QP}P\psi \quad (3.17)$$

Resolviendo esta última ecuación formalmente se obtiene:

$$Q\psi = \frac{1}{E^+ - H_{QQ}} H_{QP} P\psi, \quad (3.18)$$

y sustituyendo esta expresión para  $Q\psi$  en la ecuación (3.15) se

llega a :

$$\left[ H_{PP} + H_{Pa} \frac{1}{E^+ - H_{aa}} H_{aP} \right] P\psi = EP\psi, \quad (3.19)$$

con lo cual se define el potencial óptico generalizado como:

$$V_{opt} = H_{Pa} \frac{1}{E^+ - H_{aa}} H_{aP} \quad (3.20)$$

Este potencial es, evidentemente, el causante de la interacción entre los canales abiertos y cerrados, de la que se habló al principio. De manera que si existe el conjunto de funciones,  $\Phi_n$ , tales que:

$$H_{aa} \Phi_n = \epsilon_n \Phi_n \quad (3.21)$$

(esta ecuación es exactamente la misma que la ecuación (3.10) ya que dado que  $Q$  es idempotente:  $\Phi_n = Q\Phi_n$ ), y dado que  $H$  es hermitiano, entonces el conjunto  $\{\Phi_n\}$  genera al espacio  $Q$  y por lo tanto el potencial óptico se puede escribir como:

$$V_{opt} = \sum_n \frac{H_{pa} \phi_n \langle \phi_n | H_{ap} \rangle}{E^+ - E_n} + \int d\alpha \int dE \frac{H_{pa} \phi(E, \alpha) \langle \phi(E, \alpha) | H_{ap} \rangle}{E^+ - E} \quad (3.22)$$

Para obtener explícitamente la expresión de la matriz de transición, se supondrá que  $E = E_n$ , entonces sólo un término del desarrollo espectral del potencial óptico varía rápidamente con la energía; recuérdese que ésta es la característica de una resonancia; mientras que los demás términos son funciones que varían lentamente con la energía. De manera que es conveniente escribir al potencial óptico como sigue:

$$V_{opt} \approx U_n + \frac{H_{pa} \phi_n \langle \phi_n | H_{ap} \rangle}{E - E_n}, \quad (3.23)$$

en donde:

$$U_n = \sum_{m \neq n} \frac{H_{ap} \phi_m \langle \phi_m | H_{ap} \rangle}{E_n - E_m} + \int d\alpha \int dE \frac{H_{pa} \phi(E, \alpha) \langle \phi(E, \alpha) | H_{ap} \rangle}{E_n - E} \quad (3.24)$$

La ecuación (3.19) queda entonces:

$$\left( H_{pp} + U_n + \frac{H_{pa} \phi_n}{E - \epsilon_n} \langle \phi_n H_{ap} - E. \rangle \right) P\psi = 0 \quad (3.25)$$

Si se define  $H_o = H_{pp} + U_n$ , la ecuación (3.25) se puede escribir como:

$$(E - H_o)P\psi = \frac{H_{pa} \phi_n}{E - \epsilon_n} \langle \phi_n H_{ap} P\psi \rangle \equiv \Lambda_n H_{pa} \phi_n, \quad (3.26)$$

que tiene como solución formal:

$$P\psi = w_o^{(+)} + \frac{1}{E - H_o} H_{pa} \phi_n \Lambda_n, \quad (3.27)$$

en donde  $w_o^{(+)}$  es la solución de onda saliente de la ecuación

$(H_o - E)w_o^{(+)} = 0$ . Sustituyendo esta expresión en la identidad de la ecuación (3.26) se obtiene:

$$\langle \phi_n H_{ap} w_o^{(+)} \rangle + \Lambda_n \langle \phi_n H_{ap} \frac{1}{E - H_o} H_{pa} \phi_n \rangle = (E - \epsilon_n) \Lambda_n, \quad (3.28)$$

de donde:

$$\Lambda_n = \frac{\langle \Phi_n H_{AP} \omega_o^{(+)} \rangle}{E - \epsilon_n - \langle \Phi_n H_{AP} \frac{1}{E - H_0} H_{PA} \Phi_n \rangle} \quad (3.29)$$

con la cual se obtiene la matriz de transición a partir de la fórmula ( Feshbach 1962 ):

$$T = T_p + \langle \omega_o^{(-)} H_{PA} \Phi_n \rangle \Lambda_n \quad (3.30)$$

Es decir:

$$T = T_p + \frac{\langle \omega_o^{(-)} H_{PA} \Phi_n \rangle \langle \Phi_n H_{AP} \omega_o^{(+)} \rangle}{E - \epsilon_n - \langle \Phi_n H_{AP} \frac{1}{E - H_0} H_{PA} \Phi_n \rangle} \quad (3.31)$$

donde  $T_p$  es el término de transición no resonante inducida por  $U_n$ ; de manera que la interacción entre los canales abiertos y los canales cerrados, que se expresa a través del potencial óptico, no sólo produce transiciones resonantes sino que también puede producir transiciones directas.

Cabe mencionar que la matriz de transición que se acaba de obtener, tiene exactamente la misma forma que la de la ecuación (3.2).

## CAPITULO IV

La matriz de transición que se presentó en el capítulo pasado presenta serios problemas de cálculo. Además de que sólo representa transiciones debidas a la interacción de canales y no incluye a la dispersión potencial.

A continuación se presenta una variante del formalismo de Feshbach, en la que se usan operadores de proyección discretos y finitos, siguiendo el método presentado por Domcke ( Domcke 1983 ), y se desarrolla explícitamente la matriz de transición en términos del conjunto de eigenfunciones de  $H_{\alpha\alpha}$ ,  $\{\Phi_\alpha\}$ , y de las funciones de onda libre. En el camino se obtienen también las expresiones explícitas de la matriz de transición potencial, y la matriz que Domcke llama de transición ortogonal, que se comentarán conforme aparezcan.

Para hacer al desarrollo de la matriz de transición, primero se requiere una expresión explícita para ésta. Para esto, el primer paso consiste en notar la similitud entre la ecuación de Schroedinger:

$$(H_0 + V)\Psi = E\Psi \quad (4.1)$$

y la de Feshbach:

$$(H_{pp} + V_{opt})P\Psi = EP\Psi ; \quad (4.2)$$

para la ecuación de Schroedinger, la matriz de transición está dada por:

$$T_{ab} = \langle \omega_{(s)_a} | V | \Psi_b \rangle = \langle \omega_{(s)_a} | T | \omega_{(s)_b} \rangle , \quad (4.3)$$

en donde  $\omega_{(s)_a}$  es solución de  $(H_0 - E_s)\omega_{(s)_a} = 0$ , y  $T = V\Omega$ , como se vio en el capítulo II. Entonces parecería que se puede definir la matriz de transición de Feshbach como sigue (Taylor et al.):

$$T_{ab}^{(F)} = \langle \Psi_a | V_{opt} | P\Psi_b \rangle = \langle \Psi_a | T^{(F)} | \Psi_b \rangle , \quad (4.4)$$

en donde, en analogía al caso anterior:  $T = V_{opt} \Omega^{(F)}$ , con:

$$\Omega^{(F)} = \left( 1 - \frac{1}{H_{pp} + V_{opt} - E^+} V_{opt} \right) \quad (4.5)$$

y  $\Psi_a$  es solución de  $(H_{pp} - E_a)\Psi_a = 0$ .

A continuación se demostrará que esta matriz coincide con la fórmula de Feshbach, ecuación (3.30), siguiendo los pasos mencionados por Taylor et al.

Primero, es fácil demostrar que:

$$T_{ab} = (E_b - E_a) \langle \Psi_a | P \Psi_b \rangle, \quad (4.6)$$

donde  $E_a$  y  $E_b$  son los eigenvalores de:

$$H_{pp} \Psi_a = E_a \Psi_a \quad (4.7)$$

y:

$$(H_{pp} + V_{opt}) P \Psi_b = E_b P \Psi_b. \quad (4.8)$$

Ahora, usando la expresión de  $P\Psi$  que se obtuvo en el desarrollo de Feshbach:

$$P \Psi_b = \omega_b^{(+)} + \frac{1}{E - H_0} H_{pa} \Phi_n \Lambda_n, \quad (4.9)$$

y sustituyéndola en la ecuación (4.6) se llega a que:

$$T = \langle \psi_n | H_0 - H_{pp} | \omega_b \rangle + \Lambda \left[ E_b \langle \psi_n \left| \frac{1}{E_b - H_0} H_{pa} \phi_n \right. \rangle - \langle H_{pp} \psi_n \left| \frac{1}{E_b - H_0} H_{pa} \phi_n \right. \rangle \right] \quad (4.10)$$

El primer término corresponde a  $T_p = \langle \psi_n | U_n | \omega_b \rangle$  que es el término no resonante; para desarrollar el término resonante, es necesario usar:

$$\omega_b = \psi_b - \frac{1}{H_0 - E_b} U_n \psi_b \quad \text{y} \quad H_{pp} = H_0 - U_n \quad (4.11)$$

Sustituyendo esta última expresión en la ecuación (4.10), y reagrupando términos, el término resonante queda:

$$T_{res} = \Lambda \left[ \langle (E_b - H_0) \psi_n \left| \frac{1}{E_b - H_0} H_{pa} \phi_n \right. \rangle - \langle U_n \psi_n \left| \frac{1}{H_0 - E_b} H_{pa} \phi_n \right. \rangle \right] \quad (4.12)$$

Si  $E_b = E_a$  y dado que todos los operadores involucrados son hermitianos, esta ecuación se reduce a:

$$T_{res} = \Lambda \left\langle \left( \psi_n - \frac{1}{H_0 - E_a} U_n \psi_n \right) H_{pa} \phi_n \right\rangle = \Lambda \langle \omega_b | H_{pa} \phi_n \rangle, \quad (4.13)$$

que es justamente la parte resonante de la fórmula de Feshbach.

Para hacer un análisis detallado de la matriz de transición:

$$T^{(F)} = \langle \psi_a | T^{(F)} | \psi_b \rangle , \quad (4.14)$$

es necesario conocer el conjunto de funciones  $\{\psi_n\}$  que son las soluciones de:

$$H_{pp} \psi_n = E_n \psi_n . \quad (4.15)$$

Pero en el marco del formalismo de Feshbach, las funciones que se conocen son las soluciones de:

$$H_{aa} \phi_n = E_n \phi_n , \quad (4.16)$$

y se puede suponer conocido el conjunto de funciones  $\omega_n$  tales que:

$$k \omega_n = E_n \omega_n , \quad (4.17)$$

en donde  $K$  es el operador de energía cinética, o incluso puede ser un hamiltoniano con un potencial que no interactúa con el proyectil.

Para construir el conjunto  $\{\psi_n\}$ , se supondrá adicionalmente y sin perder generalidad, que  $\{\phi_n\}$  es un conjunto discreto, lo cual restringe la elección del operador  $Q$  ( sin embargo, si se elige  $Q$  de manera que  $\{\phi_n\}$  no es discreto, sino que consta tanto de una parte discreta como de una continua, se puede discretizar siguiendo el método que se describe mas adelante para discretizar a la base del espacio  $P$  ). Entonces, debido a la hermiticidad de  $H_{\alpha Q}$ ,  $\{\phi_n\}$  es base ortogonal del espacio  $Q$  y se puede definir el proyector:

$$Q = \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad ; \quad (4.18)$$

que en el limite en que  $N$  tiende a infinito es el operador de proyección  $Q$  que aparece en el capítulo anterior.

El primer paso consiste en encontrar el conjunto  $\{\chi_i\}$  de funciones tales que:

$$K_{pp} \chi_i = E_i \chi_i \quad ; \quad (4.19)$$

donde, como es usual,  $K_{pp} = PKP$ . De esta ecuación, es evidente que  $P\chi_i = \chi_i$  y que  $Q\chi_i = 0$  entonces:

$$(k_{pp} - k)\chi_i = (E_i - k)\chi_i \quad (4.20)$$

Pero es fácil ver que:  $(k_{pp} - k)\chi_i = -Qk\chi_i$ , con lo cual se tiene que:

$$(k - E_i)\chi_i = Qk\chi_i \quad (4.21)$$

de donde:

$$\chi_i = w_i + \frac{1}{k - E_i^+} Qk\chi_i \quad (4.22)$$

Para expresar  $\chi_i$  de manera cerrada se hace uso de  $Q\chi_i = 0$ , entonces, ya que el proyector  $Q$  es idempotente, se tiene:

$$\sum_j \phi_j \langle \phi_j | Q w_i \rangle = \sum_j \sum_k \phi_j \langle \phi_j | \frac{1}{k - E_i^+} \phi_k \rangle \langle \phi_k | Q k \chi_i \rangle \quad (4.23)$$

Esta ecuación se puede escribir en forma matricial como sigue:

$$\overline{(Qw_i)}_j = A_{jk} \overline{(QK\chi_i)}_k, \quad (4.24)$$

en donde A es la matriz de N\*N cuyos elementos son:

$$A_{jk} = \left\langle \phi_j \frac{1}{E_i^+ - K} \phi_k \right\rangle; \quad (4.25)$$

y,  $\overline{(Qw_i)}$  y  $\overline{(QK\chi_i)}$  son los vectores columna de las cantidades representadas, en la base  $\{\phi_i\}$ . Despejando  $\overline{(QK\chi_i)}$  de la ecuación (4.24) se tiene:

$$\overline{(QK\chi_i)}_k = (A^{-1})_{kj} \overline{(Qw_i)}_j, \quad (4.26)$$

en donde se ha supuesto que A es invertible. Sustituyendo esta expresión en la ecuación (4.22) se llega a:

$$\chi_i \rangle = w_i \rangle + \sum_j \sum_k \frac{1}{K - E_i^+} \phi_j \rangle (A^{-1})_{jk} \langle \phi_k w_i \rangle \quad (4.27)$$

en donde por construcción,  $\chi_i$  cumple la ecuación (4.19). De esta expresión se obtiene la matriz de transición que Domcke llama matriz de transición de ortogonalidad:

$$(\mathcal{T}_0)_{km} = \langle \omega_k \phi_i \rangle (A^{-1})_{ij} \langle \phi_i \omega_m \rangle \quad (4.28)$$

Este término no aparece usualmente en el formalismo de Feshbach, en este formalismo aparece debido a que los operadores no cubren completamente el espacio de Hilbert como se verá mas adelante. Esta matriz se puede interpretar en términos de la necesidad de representar a la onda incidente como eigenfunción de  $K_{pp}$ , dando lugar a una transición causada por el potencial  $K_{pp} - K$ . Cuando los proyectores están definidos con respecto a los canales abiertos y cerrados y no se considera la dispersión potencial, las ondas libres están en canales ortogonales a los canales cerrados y por lo tanto  $\mathcal{T}_0 = 0$ . Mientras que cuando si se considera la dispersión potencial, y en general, las ondas libres no necesariamente son ortogonales al subespacio  $Q$  que se elija, y para describir la dispersión en el subespacio  $F$  se van a requerir las eigenfunciones de  $K_{pp}$ .

Ahora, ya conocido el conjunto  $\{\chi_i\}$  en base a los conjuntos conocidos inicialmente, y dado que  $K_{pp}$  es hermitiano, se tiene una base ortogonal del espacio  $F$ ; pero  $\{\chi_i\}$  es un conjunto continuo en principio, así que se define el proyector  $P$  como:

$$P = \sum_{n=-M}^M \chi_n \rangle \langle \chi_n$$

(4.29)

Donde los eigenvalores  $E_n$ , de  $K_{FP} \chi_n = E_n \chi_n$ , definen, por comodidad, una división regular en  $2M$  partes del intervalo  $[-E_M, E_M]$ , y  $\chi_{-j}$ , significa que  $K_{FP} \chi_{-j} = -E_j \chi_{-j}$ . El hecho de que sea una división regular implica que  $E_{n+1} - E_n = \Delta E$  constante, y que  $M \cdot \Delta E = E_M$ . Entonces, es claro que:

$$\lim_{\substack{\Delta E \rightarrow 0 \\ M \rightarrow \infty}} P = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_E \rangle \langle \chi_E dE$$

(4.30)

es el operador de proyección  $P$  que aparece en el capítulo III.

Tal y como se han definido los proyectores  $P$  y  $Q$ , cumplen con las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} P^2 &= P, & PQ &= QP = 0, \\ Q^2 &= Q, & \lim_{N \rightarrow \infty} Q + \lim_{\substack{M \rightarrow \infty \\ \Delta E \rightarrow 0}} P &= 1. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Es esta última condición la que los diferencia de los operadores de proyección de Feshbach; a cambio tienen la ventaja de estar definidos

a través de expresiones finitas y discretas, dando lugar a matrices cuyas inversas tienen sentido, e incluso son calculables.

Ya definido el proyector P, se está en condiciones de construir el conjunto  $\{\varphi_j\}$  de funciones tales que:

$$H_{PP} \varphi_0 = E_0 \varphi_0 \quad (4.32)$$

Primero se reescribe  $H_{PP} = K_{PP} + V_{PP}$  en la ecuación (4.32), de donde:

$$(E_0 - K_{PP}) \varphi_0 = V_{PP} \varphi_0 \quad (4.33)$$

Ahora, el término  $V_{PP}$  se reescribe como:

$$V_{PP} = \sum_n \sum_m \langle \chi_n | V | \chi_m \rangle \langle \chi_n | \equiv \sum_n \sum_m \langle \chi_n | B_{nm} \langle \chi_m |, \quad (4.34)$$

o, en términos matriciales como:

$$(V_{PP})_{nm} = B_{nm} = B_{n\alpha} (B^{-1})_{\alpha\beta} B_{\beta m}, \quad (4.35)$$

que finalmente se puede reescribir como:

$$V_{PP} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} PV \chi_{\alpha} \rangle (B^{-1})_{\alpha\beta} \langle \chi_{\beta} VP . \quad (4.36)$$

Entonces, la solución formal de la ecuación (4.33) es:

$$\psi_0 \rangle = \chi_0 \rangle + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{1}{E_0^+ - K_{PP}} PV \chi_{\alpha} \rangle (B^{-1})_{\alpha\beta} \langle \chi_{\beta} VP . \quad (4.37)$$

Si se aplica  $V_{PP}$  de ambos lados de la igualdad y se usa el hecho de que  $\chi = P\chi$  se llega a que:

$$V_{PP} \psi_0 \rangle = V_{PP} \chi_0 \rangle + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} V_{PP} \frac{1}{E_0^+ - K_{PP}} V_{PP} PV \chi_{\alpha} \rangle (B^{-1})_{\alpha\beta} \langle \chi_{\beta} V_{PP} \psi_0 \rangle . \quad (4.38)$$

Despejando  $V_{PP} \chi_0 \rangle$  y volviendo a usar la ecuación (4.36) se obtiene:

$$V_{PP} \chi_0 \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_n \chi_n \rangle M_{n\alpha} (B^{-1})_{\alpha\beta} \langle \chi_{\beta} V_{PP} \psi_0 \rangle , \quad (4.39)$$

donde:

$$M_{n\kappa} = \left\langle \chi_n \left( V_{PP} - V_{PP} \frac{1}{E^+ - k_{PP}} V_{PP} \right) \chi_\kappa \right\rangle, \quad (4.40)$$

ó, equivalentemente:

$$M_{n\kappa} = \left\langle \chi_n \left( V - V \frac{1}{E^+ - k_{PP}} V \right) \chi_\kappa \right\rangle. \quad (4.41)$$

La ecuación (4.39) se escribe matricialmente como sigue:

$$\overline{(V_{PP} \chi_0)_n} = M_{n\kappa} (B^{-1})_{\mu\beta} \overline{(V_{PP} \psi_0)_\mu}, \quad (4.42)$$

de donde:

$$\overline{(V_{PP} \psi_0)_\beta} = B_{\beta\kappa} (M^{-1})_{\alpha n} \overline{(V_{PP} \chi_0)_\alpha}, \quad (4.43)$$

De manera que:

$$\overline{V_{PP} \psi_0} = \sum_n \sum_\beta \sum_\alpha \langle \chi_n \rangle B_{\beta\kappa} (M^{-1})_{\alpha n} \langle \chi_n V_{PP} \chi_0 \rangle; \quad (4.44)$$

sustituyendo ésto en la ecuación (4.37) se obtiene:

$$|\Psi_0\rangle = |\chi_0\rangle + \sum_n \sum_m \sum_\alpha \sum_\beta \frac{1}{E_0^+ - k_{pp}} P V |\chi_m\rangle (B^{-1})_{mn} B_{\beta n} (M^{-1})_{\alpha n} \langle \chi_n V_{pp} \chi_0 \rangle, \quad (4.45)$$

que, usando la ecuación (4.29), queda:

$$|\Psi_0\rangle = |\chi_0\rangle + \sum_n \sum_\alpha \sum_\beta \frac{1}{E_0^+ - k_{pp}} |\chi_n\rangle B_{\beta n} (M^{-1})_{\alpha n} \langle \chi_n V_{pp} \chi_0 \rangle. \quad (4.46)$$

De esta expresión se obtiene la matriz de transición directa de Doncke:

$$(T_{dir})_{\alpha\beta} = \langle \chi_\alpha V \chi_n \rangle (M^{-1})_{nm} \langle \chi_m V \chi_\beta \rangle, \quad (4.47)$$

que corresponde a las transiciones potenciales de  $\chi_\beta$ .

Para poder evaluar la matriz de transición  $T_{ab} = \langle \Psi_a V_{op} P \Psi \rangle$  es conveniente expresar a  $P\Psi$  en términos de los proyectores. A la vista del desarrollo anterior, la obtención de  $P\Psi$  es fácil. Dado que  $H_{pp}$  es hermitiano,  $\{\Psi_n\}$  es base ortogonal del mismo espacio generado por  $\{\chi_n\}$ , y se puede redefinir el proyector  $P$  como:

$$P = \sum_{n=-M}^M |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|. \quad (4.48)$$

La ecuación de Feshbach es:

$$[H_{PP} + V_{opt}] P\Psi = EP\Psi, \quad (4.49)$$

pero como  $V_{opt} = PV_{opt}P$ , y se conocen las eigenfunciones de  $H_{PP}$ , se puede calcar el procedimiento anterior, dando lugar a:

$$P\Psi_b\rangle = |\varphi_b\rangle + \sum_n \sum_\alpha \sum_\beta \frac{1}{E_b^+ - H_{PP}} |\varphi_n\rangle D_{\beta\alpha} (N^{-1})_{\alpha n} \langle \varphi_n V_{opt} \varphi_b \rangle, \quad (4.50)$$

donde:

$$D_{\beta\alpha} = \langle \varphi_\beta V_{opt} \varphi_\alpha \rangle \quad (4.51)$$

y

$$N_{mn} = \left\langle \Psi_m \left( V_{opt} - V_{opt} \frac{1}{E_b^+ - H_{pp}} V_{opt} \right) \Psi_n \right\rangle . \quad (4.52)$$

Ahora si se tiene todos los elementos para analizar  $T_{ab}$  ; y para simplificar las cosas, se puede volver a usar que:

$$T_{ab} = (E_b - E_a) \langle \Psi_a P \Psi_b \rangle , \quad (4.53)$$

con lo cual, usando las ecuaciones (4.50) y (4.53), y haciendo el desarrollo espectral del operador  $\frac{1}{E_a^+ - H_{pp}}$ , la matriz de transición queda:

$$T_{ab} = D_{an} (N^{-1})_{nm} D_{mb} . \quad (4.54)$$

Esta expresión se puede reducir expresando a N como sigue:

$$N_{mn} = D_{mn} - D_{m\beta} \Lambda_{\beta\alpha} D_{\alpha n} , \quad (4.55)$$

donde  $\Lambda_{\beta\alpha}$  es la matriz diagonal:

$$\Lambda_{\beta\alpha} = \frac{1}{E_b^+ - E_a^-} \delta_{\alpha\beta} \quad (4.56)$$

Entonces:

$$N_{mn} = D_{mi} [D^{-1} - \Lambda]_{ij} D_{jn} \quad (4.57)$$

con lo cual, sustituyendo en la ecuación (4.54) se tiene:

$$T_{ab} = [D^{-1} - \Lambda]_{ab}^{-1} \quad (4.58)$$

Esta expresión para la matriz de transición, si bien es cerrada y hasta bonita, no presenta de manera evidente la forma típica de la matriz de transición con resonancias que se esperaba.

A continuación se demuestra que esta matriz de transición se puede reescribir de manera que se reconozca la estructura característica de las matrices de transición con resonancias.

Para la discusión que se presenta a continuación se usará la siguiente fórmula:

$$\left[ A - \frac{1}{a} dd^T \right]^{-1} = A^{-1} + \frac{1}{a-b} A^{-1} dd^T A^{-1}, \quad (4.59)$$

en donde A es cualquier matriz invertible, d es un vector,  $dd^T$  es la matriz dada por  $B_{\nu\rho} = d_\nu d_\rho^T$  y b es el escalar  $b = d^T A^{-1} d$ . La demostración de esta fórmula es directa.

Para analizar el caso de una resonancia en la matriz definida por la ecuación (4.58), se supondrá que  $E_b \approx \epsilon_n$ , entonces:

$$D_{ij} = \sum_m \frac{\langle \Psi_i | H_{PA} \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | H_{AP} \Psi_j \rangle}{E_b - \epsilon_m} \approx \frac{[\hat{H}_n]_{ij}}{E_b - \epsilon_n} + [U_n]_{ij}, \quad (4.60)$$

donde:

$$[\hat{H}_n]_{ij} = \langle \Psi_i | H_{PA} \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | H_{AP} \Psi_j \rangle \quad (4.61)$$

y

$$[U_n]_{ij} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_i | H_{PA} \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | H_{AP} \Psi_j \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m}. \quad (4.62)$$

Es claro que la matriz  $[\hat{H}_n]_{ij}$  se puede reescribir como  $d_i d_j^T$  si  $d$  es el vector cuyos elementos son  $d_i = \langle \psi_i | H_{pa} | \phi_n \rangle$ .

Usando la fórmula (4.59),  $\mathbb{D}^{-1}$  queda:

$$\mathbb{D}^{-1} = U_n^{-1} + \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_k - b_1} U_n^{-1} d d^T U_n^{-1}, \quad (4.63)$$

donde  $b_1 = d^T (U_n^{-1}) d$ . Sustituyendo esta ecuación en la ecuación (4.58) se tiene:

$$T = \left[ (U_n^{-1} - \Lambda) - \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_n + b_1} (U_n d)(d^T U_n) \right]^{-1}. \quad (4.64)$$

Para poder volver a usar la fórmula (4.59) es necesario notar que:

$$(U_n)^T_{ji} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_i | H_{pa} | \phi_m \rangle^* \langle \phi_m | H_{ap} | \psi_j \rangle^*}{\epsilon_n - \epsilon_m} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_i | H_{pa} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | H_{ap} | \psi_j \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} = (U_n)_{ji}, \quad (4.65)$$

es decir, que  $U_n$  es hermitiana, por lo tanto se puede definir al vector  $\Omega = (U_n^{-1} d)$  y  $\Omega^T = (d^T U_n^{-1})$ , con lo cual se obtiene la matriz de transición:

$$\mathbb{T} = (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} + \frac{1}{E_b - \varepsilon_n - (b_2 - b_1)} (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} U_n^{-1} \hat{H}_n U_n^{-1} (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1}, \quad (4.66)$$

donde el término:

$$\begin{aligned} (b_2 - b_1) &= d^T (U_n^{-1}) (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} (U_n^{-1}) d - d^T (U_n^{-1}) d \\ &= d^T (U_n^{-1}) (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} (\Lambda - \Lambda U_n \Lambda) (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} (U_n^{-1}) d, \end{aligned} \quad (4.67)$$

con lo cual:

$$\mathbb{T} = (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} + \frac{(U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} U_n^{-1} \hat{H}_n U_n^{-1} (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1}}{E_b - \varepsilon_n - d^T (U_n^{-1}) (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} (\Lambda - \Lambda U_n \Lambda) (U_n^{-1} - \Lambda)^{-1} (U_n^{-1}) d} \quad (4.68)$$

Esta ecuación muestra la forma característica que se esperaba en la cercanía de una resonancia. De manera que la expresión:

$$\mathbb{T}_{\alpha\beta} = (D^{-1} - \Lambda)^{-1}_{\alpha\beta} \quad (4.69)$$

efectivamente contiene toda la información del fenómeno dispersivo del sistema complejo a pesar de ser una matriz discreta y finita, con todas las facilidades computacionales que ello implica, y de las que la expresión de Feshbach carece.

Por otro lado, en al proceso para obtener la matriz de transición resonante, se obtuvieron las matrices de transición de ortogonalidad y directa de Domcke, que junto con la resonante se pueden combinar para dar lugar a una matriz de transición total. Domcke la propone como sigue:

$$T_{\alpha,\beta} = T_o(\omega, \omega') + T_d(\chi, \chi') + \mathbb{T}(\varphi, \varphi'). \quad (4.70)$$

Donde cada término forma parte de una matriz de dispersión como sigue:

$$S_o = 1 - 2\pi i T_o,$$

$$S_d = 1 - 2\pi i T_d, \quad (4.71)$$

$$y \quad S_{res} = 1 - 2\pi i \mathbb{T}.$$

Cabe mencionar que la matriz de transición total de Demeke parece <sup>que</sup> incompleta ya la matriz de dispersión correspondiente sería:

$$S_{T_{0+}} = 1 - 2\pi i T_{T_{0+}} = S_0 S_d S_{res} \quad (4.72)$$

$$= 1 - 2\pi i \left[ (T_0 + T_d + U) - 2\pi i (T_0 T_d + T_0 U + T_d U) + (2\pi)^2 T_0 T_d U \right].$$

O, mas estrictamente:

$$T_{T_{0+}} = (E_i - E_j) \langle \omega_j P \psi_i \rangle \quad (4.73)$$

Que da lugar a un resultado similar al anterior.

De cualquier forma, la aplicabilidad de las expresiones que se presentan en este capítulo también es limitada. El problema radica en definir, a priori, el proyector Q. Esto se debe hacer a partir de un modelo del blanco independiente de este formalismo, o bien escogerlo de manera arbitraria, en cuyo caso se debe resolver la ecuación:

$$H_{00} \phi_n = \epsilon_n \phi_n, \quad (4.74)$$

que no necesariamente será cosa fácil. Estos problemas los presenta también el formalismo de Feshbach, con el agravante de que, una vez resueltos, el cómputo de la matriz de transición sigue siendo complicado; en cambio, con las matrices de transición que se presentan en este capítulo, una vez conocido el conjunto  $\{\phi_n\}$ , el cómputo es, tan sólo, un problema numérico.

## BIBLIOGRAFIA

### Libros:

- Blampied, William. Modern Physics. Holt Rinehart & Winston Inc.  
U.S.A. 1971.
- Burge E.J. Atomic Nuclei and their Particles. Oxford Physics  
Series, Clarendon Press; Oxford 1977.
- Farina J.E.G. Quantum Theory of Scattering Processes: General  
Principals & Advanced Topics. The International  
Encyclopedia of Physical Chemistry and Chemical Physics;  
Topic 2, Volume 5; Pergamon Press; Hungary 1975.
- Goldstein, Herbert. Classical Mechanics; Addison Wesley  
Publishing Company Inc. Reading Mass. U.S.A.; 1959.
- Marquina, Vivianne. Estudio de Resonancias en Ne, Ar y Kr por  
medio de espectroscopía electrónica; Tesis de Maestría,  
Facultad de Ciencias, U.N.A.M., México, D.F. 1983.
- Rodberg & Thaler. Introduction to the Quantum Theory of  
Scattering. Academic Press, U.S.A. 1970.
- Schiff, Leonard. Quantum Mechanics; McGraw Hill, 3era edición,  
U.S.A. 1968.

Articulos:

Biondi et al. Resonances in Atoms and Molecules; Physics Today.  
~~October 1979.~~

Domcke W. Projection Operator Approach to Potential Scattering.  
Physical Review A, Volume 28, Number 5; November 1983.

Feshbach, H. Unified Theory of Nuclear Reactions; Annals of  
Physics; 5, 1958.

Feshbach, H. Unified Theory of Nuclear Reactions II; Annals of  
Physics; 19, 1962.

Gell-Mann, M. et al. The Formal Theory of Scattering; Physical  
Review, Volume 91, Number 2, Julio 1953.

Heller, K. Elementary Approach to Scattering Theory; American  
Journal of Physics, 52 (9), September 1984.

Newton, R. Optical Theorem and Beyond; American Journal of  
Physics; 44 (7), Julio 1976.

Taylor , H. et al. Quantitative Aspects of Resonances in Electron-Atom and Electron-Molecule Scattering. Excitation, and Reactions; The Journal of Chemical Physics. Vol. 31, Number 3, Marzo 1985.

Temkin et al. Construction of Resonance Projection Operators: Application to Two-Electron Targets; Physical Review A, Volume 31, Number 3, marzo 1985.

e