

# UNA ECUACIÓN INTEGRAL PARA EL ESTUDIO DE COLISIONES INELÁSTICAS

por

Héctor R. Maya<sup>1,2</sup> & Diógenes Campos<sup>3,4</sup>

## Resumen

**Maya H., & Campos D.:** Una ecuación integral para el estudio de colisiones inelásticas. Rev. Acad. Colomb. Cienc. **24**(93): 521-527, 2000. ISSN 0370-3908.

Se propone una ecuación integral para determinar la matriz de dispersión ( $S$ ) y se hace uso de un método de aproximación para encontrar su solución. El método se aplica en una aproximación de dos estados al sistema  $\text{He}^+ + \text{Ne}$ , para energía de  $E = 70.9 \text{ eV}$ . Los resultados teóricos se comparan con datos de otras aproximaciones (LZS, DW, UWKB) y tienen buena concordancia con el experimento.

**Palabras clave:** Matriz  $S$ , colisiones, ecuaciones radiales acopladas.

## Abstract

We propose an integral equation to determine the  $S$ - matrix and an approximate method to determine its solution. The method is applied to the system  $\text{He}^+ + \text{Ne}$  in a two states model and for an energy of  $E = 70.9 \text{ eV}$ . The theoretical results are compared with data of other methods (LZS, DW, UWKB) and they have also a good agreement with the experiment.

**Key words:**  $S$ -Matrix, scattering, radial coupled equations.

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidad de Córdoba, Montería

<sup>2</sup> E-mail: rmaya@168.176.9.40

<sup>3</sup> Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá

<sup>4</sup> E-mail: dcamposr@168.176.9.40

## 1. Introducción

Existen abundantes datos experimentales de colisiones inelásticas entre sistemas atómicos y moleculares que requieren un análisis teórico. Para algunos sistemas es posible realizar ese análisis a partir de cálculos *ab initio*. Sin embargo, en la mayoría de los casos es necesario acudir a métodos de aproximación, por ejemplo: aproximación de Born (AB) [1], onda distorsionada (DW) [2], teoría de Landau-Zener-Stückelberg (LZS) [3], [4], [5], (ver también [6] y referencias allí citadas).

La teoría de LZS es uno de los modelos más sencillos y se usa con frecuencia para tratar problemas de dispersión inelástica que involucran el cruce de curvas de potencial [6]. La aproximación de Born, por su parte, da buenos resultados cuando el acoplamiento entre canales es débil y las energías de colisión son moderadamente altas. El método de onda distorsionada toma en cuenta que los potenciales distorsionan los estados iniciales y finales, dando así lugar a una teoría más general que la de Born.

El presente trabajo se basa en un método desarrollado por uno de nosotros [8] con el propósito de tratar problemas de dispersión descritos por un sistema de ecuaciones radiales acopladas. En el método se obtiene una ecuación integral exacta para la matriz de dispersión  $S$ , a partir de la cual es posible obtener como casos particulares las aproximaciones arriba citadas.

Uno de los propósitos del presente artículo consiste en aplicar esa ecuación integral a un problema de dispersión inelástica, en una aproximación de dos estados, e incorporar en la teoría una simplificación adicional que facilita la aplicación del método. Como objeto específico elegimos el estudio de procesos inelásticos en el sistema  $\text{He}^+ + \text{Ne}$ , el cual se puede describir de manera adecuada por una aproximación de 2 canales. Este sistema ha sido objeto de amplio estudio [7], de tal manera que es posible evaluar la calidad de los resultados que se obtengan con la aplicación del método descrito en el presente artículo. Por otro lado, con el fin de mostrar la confiabilidad del procedimiento, se comparará también la sección eficaz diferencial teórica con resultados experimentales y con otros métodos teóricos.

## 2. Teoría

Los procesos de colisiones inelásticas entre partículas atómicas (electrones, átomos y moléculas) se estudian

con frecuencia mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales, radiales, acopladas, de segundo orden, asociadas con el movimiento relativo de las partículas que colisionan [6], [1], [9]:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k_\beta^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U_{\beta\beta}(r) \right] \Psi_{\beta\alpha}(\ell, r) = H_{\beta\alpha}(\ell, r), \quad (1)$$

donde  $\alpha, \beta, \gamma (= 1, 2, \dots, N)$  rotulan los canales. Los términos

$$H_{\beta\alpha}(\ell, r) = \sum_{\gamma=1}^N (1 - \delta_{\beta\gamma}) U_{\beta\gamma}(r) \Psi_{\gamma\alpha}(\ell, r) \quad (2)$$

representan el acoplamiento entre los  $N$  canales involucrados en el problema, donde  $\alpha$  es el canal inicial. El parámetro  $\ell = 0, 1, 2, \dots, \infty$  designa el momentum angular orbital,  $k_\beta$  es el número de onda correspondiente al canal  $\beta$  cuando la energía total del sistema es  $E$ ; esto es,  $k_\beta^2 = (2\mu/\hbar^2)(E - \epsilon_\beta)$ , donde  $\epsilon_\beta$  es el umbral del canal  $\beta$  y  $\mu$  es la masa reducida del sistema de dos partículas que chocan.

Las ecuaciones (1) se deben solucionar con condiciones de frontera apropiadas para describir el proceso de colisión del sistema bajo estudio. La solución permite determinar los elementos de la matriz de dispersión  $S(\ell)$ , los cuales son las cantidades de interés físico, ya que están relacionados de manera directa con las secciones eficaces (diferencial y total).

## 3. Fundamento del método

El problema físico queda especificado de manera completa al imponer las siguientes condiciones de frontera:

$$\Psi_{\beta\alpha}(\ell, r) \Big|_{r \rightarrow 0} = 0, \quad (3)$$

$$\Psi_{\beta\alpha}(\ell, r) \Big|_{r \rightarrow \infty} =$$

$$\frac{i}{2} \left[ \epsilon_\alpha^-(\ell, r) \delta_{\beta\alpha} - \left( \frac{k_\alpha}{k_\beta} \right)^{1/2} S_{\beta\alpha}(\ell) \epsilon_\alpha^+(\ell, r) \right] \quad (4)$$

donde

$$\epsilon_\alpha^\pm(\ell, r) := \exp[\pm i(k_\beta r - \ell\pi/2)] \quad (5)$$

El fundamento del método [8] consiste en descomponer la solución del sistema de ecuaciones (1) en una parte incidente y en una onda dispersada:

$$\Psi_{\beta\alpha}(\ell, r) = \frac{1}{F_\beta(\ell)} \Phi_\beta^\times(\ell, r) \delta_{\beta\alpha} + \bar{\Psi}_{\beta\alpha}(\ell, r). \quad (6)$$

El primer término del lado derecho es la razón entre la solución regular de la ecuación diferencial homogénea correspondiente al sistema (1) y la función de Jost. El segundo término representa la función de onda dispersada siempre y cuando cumpla el comportamiento asintótico exigido en el origen y en (4). Para que esto sea así se requiere que la función  $\bar{\Psi}_{\beta\alpha}(\ell, r)$  tenga las siguientes propiedades:

$$\bar{\Psi}_{\beta\alpha}(\ell, r) \underset{r \rightarrow 0}{=} 0, \quad (7)$$

y

$$\bar{\Psi}_{\beta\alpha}(\ell, r) \underset{r \rightarrow \infty}{=} -\frac{i}{2} \left( \frac{k_\alpha}{k_\beta} \right)^{1/2} [S_{\beta\alpha}(\ell) - s_\beta(\ell) \delta_{\beta\alpha}] \varepsilon_\beta^+(\ell, r). \quad (8)$$

La cantidad  $s_\beta(\ell)$  designa la matriz  $s$  para el canal  $\beta$  en ausencia completa de acoplamiento con otros canales.

La ecuación (8) sugiere expresar la onda dispersada en la forma

$$\bar{\Psi}_{\beta\alpha}(\ell, r) = G_{\beta\alpha}(\ell, r) \varepsilon_\beta^+(\ell, r), \quad (9)$$

donde  $G_{\beta\alpha}(\ell, r)$ ,  $\beta = 1, 2, \dots, N$ , designa un conjunto de funciones auxiliares que se introducen por conveniencia. Estas funciones se anulan en el origen y se comportan a grandes  $r$  como constantes ligadas con los elementos de la matriz de dispersión  $S$ ; esto es:

$$G_{\beta\alpha}(\ell, r) \underset{r \rightarrow \infty}{=} -\frac{i}{2} \left( \frac{k_\alpha}{k_\beta} \right)^{1/2} [S_{\beta\alpha}(\ell) - s_\beta(\ell) \delta_{\beta\alpha}]. \quad (10)$$

Esta relación indica que al encontrar  $G_{\beta\alpha}(\ell, \infty)$  por un método apropiado, entonces el elemento correspondiente de la matriz  $S(\ell)$  es dado por

$$S_{\beta\alpha}(\ell) = \left( \frac{k_\beta}{k_\alpha} \right)^{1/2} [s_\beta(\ell) \delta_{\beta\alpha} + 2i G_{\beta\alpha}(\ell, \infty)]. \quad (11)$$

#### 4. Ecuación integral para la matriz $S$

Considerar la ecuación de Schrödinger asociada con el canal  $\beta$ , en ausencia de acoplamiento con cualquier otro canal:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k_\beta^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U_{\beta\beta}(r) \right] \Phi_\beta(\ell, r) = 0. \quad (12)$$

Además de la solución regular  $\Phi_\beta^+(\ell, r)$  que describe el proceso de dispersión elástico, la ecuación (12) tiene otras dos soluciones linealmente independientes, conocidas como soluciones de Jost (emergente e incidente),

las cuales notaremos por  $\Phi_\beta^+(\ell, r)$  y  $\Phi_\beta^-(\ell, r)$  respectivamente. Al usar una técnica análoga a la descrita en [9] y [10], se concluye que la matriz  $G(\ell, r)$  se puede escribir como la suma de dos contribuciones asociadas con las soluciones regular y de Jost emergente:

$$G(\ell, r) = \phi^\times(\ell, r) \int_r^\infty dR I^\infty(\ell, R) + \phi^+(\ell, r) \int_0^r dR I^0(\ell, R), \quad (13)$$

donde

$$I^\infty(\ell, R) := \Phi^+(\ell, R) U(R) [\varepsilon^+(\ell, R) G(\ell, R) + \varphi^\times(\ell, R)], \quad (14)$$

$$I^0(\ell, R) := \Phi^\times(\ell, R) U(R) [\varepsilon^+(\ell, R) G(\ell, R) + \varphi^\times(\ell, R)]. \quad (15)$$

Nótese que el supraíndice  $\infty$  y  $0$  es sólo una ayuda nemotécnica para recordar el rango de integración. En lo anterior hemos usado matrices diagonales  $\Phi^\sigma(\ell, r)$ ,  $\phi^\sigma(\ell, r)$  y  $\varphi^\sigma(\ell, r)$  (donde  $\sigma := \times, +, -$ ) que se construyen con las funciones de onda asociadas con la dispersión puramente elástica, en ausencia de acoplamiento entre canales:

$$\begin{aligned} \phi^\sigma(\ell, r) &:= -\mathbf{K}^{-1} \varepsilon^-(\ell, r) \varphi^\sigma(\ell, r), \\ \varphi^\sigma(\ell, r) &:= \mathbf{F}^{-1}(\ell) \Phi^\sigma(\ell, r). \end{aligned} \quad (16)$$

Las matrices diagonales  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{F}(\ell)$  están formadas por los números de onda y por las funciones de Jost. En este punto conviene observar que, en el límite  $r \rightarrow \infty$ ,  $\phi^+(\ell, \infty)$  se convierte en una matriz diagonal constante (independiente de  $r$ ).

Se observa que el conjunto de ecuaciones (13), (14) y (15), conforman una *ecuación integral* para la matriz  $G(\ell, r)$ . La solución de esa ecuación permite determinar la matriz de dispersión  $S(\ell)$  en virtud de las relaciones (11) que ligan  $G(\ell, \infty)$  con  $S(\ell)$ .

#### 5. Solución aproximada para $G(\ell, r)$

Es difícil solucionar la ecuación integral que determinan las ecuaciones (13), (14) y (15), en especial debido a que ella equivale a un sistema de ecuaciones diferenciales con condiciones de frontera tanto en el origen ( $r \rightarrow 0$ ) como en el infinito ( $r \rightarrow \infty$ ). Sin embargo, de acuerdo con (13) y (15), la matriz  $G(\ell, r)$  evaluada en el infinito ( $r \rightarrow \infty$ )

es dada por

$$G(\ell, \infty) = -(\mathbf{K}(\ell)\mathbf{F}(\ell))^{-1} \int_0^{\infty} dR \mathbf{I}^0(\ell, R). \quad (17)$$

Esta expresión es exacta y como tal conlleva a una matriz  $\mathbf{S}(\ell)$  que es unitaria y simétrica, e incluye como casos particulares las aproximaciones citadas en la introducción (ver apéndice).

Lo anterior sugiere definir una nueva función  $\mathcal{G}(\ell, r)$ ,

$$\mathcal{G}(\ell, r) = -(\mathbf{K}\mathbf{F}(\ell))^{-1} \int_0^r dR \Phi^\times(\ell, R) \mathbf{U}(R) \times [\epsilon^+(\ell, R) \mathcal{G}(\ell, R) + \varphi^\times(\ell, R)], \quad (18)$$

e introducir la siguiente *aproximación*: Bajo condiciones razonables esperamos que las funciones  $G(\ell, r)$  y  $\mathcal{G}(\ell, r)$  tengan a grandes distancias  $r$  un comportamiento cuantitativo y cualitativo similar. Veremos que para potenciales de acople  $\mathbf{U}(R)$  no muy intensos esta aproximación da excelentes resultados en el cálculo de la matriz de dispersión  $\mathbf{S}(\ell)$ .

El valor práctico de (18) está en el hecho de que es una ecuación matricial e integral de Volterra, la cual se puede solucionar transformándola en un problema de valores iniciales para un sistema de ecuaciones diferenciales. En particular, dentro de la aproximación de dos estados en que estamos interesados, la ecuación (18) equivale a dos sistemas independientes de ecuaciones diferenciales acopladas, cada uno de ellos con dos ecuaciones.

*Sistema 1:*

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \mathcal{G}_{11}(\ell, r) &= -\frac{1}{k_1} \varphi_1^\times(\ell, r) U_{12}(r) \epsilon_2^+(\ell, r) \mathcal{G}_{21}(\ell, r) \\ \frac{d}{dr} \mathcal{G}_{21}(\ell, r) &= -\frac{1}{k_2} \varphi_2^\times(\ell, r) U_{12}(r) \epsilon_1^+(\ell, r) \mathcal{G}_{11}(\ell, r) \\ &\quad - \frac{1}{k_2} \varphi_1^\times(r) U_{12}(\ell, r) \varphi_2^\times(\ell, r). \end{aligned}$$

*Sistema 2:*

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \mathcal{G}_{12}(\ell, r) &= -\frac{1}{k_1} \varphi_1^\times(\ell, r) U_{12}(r) \epsilon_2^+(\ell, r) \mathcal{G}_{22}(\ell, r) \\ &\quad - \frac{1}{k_1} \varphi_1^\times(\ell, r) U_{12}(r) \varphi_2^\times(\ell, r) \\ \frac{d}{dr} \mathcal{G}_{22}(\ell, r) &= -\frac{1}{k_2} \varphi_2^\times(\ell, r) U_{12}(r) \epsilon_1^+(\ell, r) \mathcal{G}_{12}(\ell, r). \end{aligned}$$

Como consecuencia de la definición (18) la condición inicial para estos sistemas de ecuaciones es la siguiente:

$$\mathcal{G}_{11}(\ell, 0) = \mathcal{G}_{21}(\ell, 0) = \mathcal{G}_{12}(\ell, 0) = \mathcal{G}_{22}(\ell, 0) = 0.$$

La integración de los sistemas de ecuaciones anteriores no representa mayor dificultad numérica y, en la práctica, sólo se requiere resolver uno de los dos. Sin embargo la ventaja de la aproximación propuesta depende de la posibilidad de obtener soluciones regulares  $\varphi_n^\times(\ell, r)$ ,  $n = 1, 2$ , que sean adecuadas para el sistema bajo estudio. Esta situación favorable se presenta cuando se estudian colisiones atómicas entre partículas masivas a energías de colisión no muy bajas, ya que bajo esas circunstancias se pueden usar métodos semiclásicos para construir las funciones de onda. Varios autores han realizado deducciones o compilaciones de estos métodos [11], [2]. Para los cálculos numéricos del presente trabajo usamos el resumen incorporado en [10].

La aproximación semiclásica uniforme UWKB [12] permite obtener una expresión analítica para los corrimientos de fase y expresar la solución regular  $\Phi_\beta^\times(\ell, r)$  en términos de la función de Airy  $Ai(-z)$ :

$$\eta_\beta(\ell) = \lim_{r \rightarrow \infty} \int_{r_0}^r [K_\beta(k_\beta, \ell; r') - k_b] dr' - k_\beta r_0 + \frac{1}{2} \left( \ell + \frac{1}{2} \right) \pi,$$

$$\Phi_\beta^\times(\ell, r) = \sqrt{\pi K_\beta} |F_\beta(\ell)| H_\beta(\ell, r) Ai(-Z_\beta(\ell, r)),$$

donde  $r_0$  es un punto de retorno clásico, definido por

$$K_\beta^2(\ell; r_0) = k_\beta^2 - U_{\beta\beta}(r_0) - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{r_0^2} = 0.$$

$$Z_\beta(\ell, r) = \pm \left| \frac{3}{2} \int_{r_0}^r K_{ef}(\beta, \ell, r') dr' \right|^{2/3}, \quad (19)$$

es el argumento de la función de Airy. En esta expresión, el signo + se usa para la región clásicamente permitida ( $r > r_0$ ) y el signo menos (-) para la región clásicamente prohibida ( $r < r_0$ ).

## 6. Colisión inelástica $\text{He}^+ + \text{Ne}$

La dispersión elástica e inelástica de este sistema fue investigada experimentalmente por Coffey, Lorents, y Smith [13] para la energía centro de masa de  $E = 70.9$  eV. En esta colisión, entre iones de helio  $\text{H}^+$  y átomos de Ne en el estado base, éste último es excitado al estado  $\text{Ne}^*(2p^5 3s)$ .

Olson y Smith [14] estudiaron inicialmente este sistema usando las teorías de LZS y DW. Posteriormente

Eu y Tsien [15] hicieron uso de la teoría semiclásica uniforme WKB. Desde entonces numerosos trabajos se han desarrollado en los cuales este sistema es objeto de interés, entre otros [7], [10], [14], [15], [16], [17].

En el presente estudio se utilizan las formas funcionales propuestas por Olson y Smith [14] para los potenciales que describen el estado base [ $\text{He}^+-\text{Ne}(2p^6)$ ] y el estado excitado [ $\text{He}^+-\text{Ne}(2p^53s)$ ] del sistema bajo estudio. Estos potenciales en unidades atómicas son:

$$V_{11}(r) = \frac{21.1}{r} \exp\left(-\frac{r}{0.678}\right),$$

$$V_{22} = \left(\frac{21.1}{r} - 12.1\right) \exp\left(-\frac{r}{0.678}\right) + 0.6174,$$

$$V_{12}(r) = 0.18 \exp\left(-\frac{r}{0.667}\right).$$

El sistema 2 de ecuaciones arriba citado adopta en este ejemplo la siguiente forma explícita:

$$\frac{d}{dr} \mathcal{G}_{12}(\ell, r) = -\sqrt{\frac{\pi}{k_1}} \frac{\text{Ai}(-Z_1(\ell, r))}{\sqrt{Z_1'(\ell, r)}} U_{12}(r) \times$$

$$\exp\left[i\left(k_2 r + \eta_1(\ell) - \frac{\ell\pi}{2}\right)\right] \mathcal{G}_{22}(\ell, r)$$

$$- \pi \sqrt{\frac{k_2}{k_1}} \frac{\text{Ai}(-Z_1(r))}{\sqrt{Z_1'(\ell, r)}} \frac{\text{Ai}(-Z_2(\ell, r))}{\sqrt{Z_2'(\ell, r)}} \times$$

$$U_{12}(r) \exp[i(\eta_1(\ell) + \eta_2(\ell))],$$

$$\frac{d}{dr} \mathcal{G}_{22}(\ell, r) = -\sqrt{\frac{\pi}{k_2}} \frac{\text{Ai}(-Z_2(\ell, r))}{\sqrt{Z_2'(\ell, r)}} U_{12}(r) \times$$

$$\exp\left[i\left(k_1 r + \eta_2(\ell) - \frac{\ell\pi}{2}\right)\right] \mathcal{G}_{12}(\ell, r).$$

donde  $\eta_k(\ell)$ ,  $k = 1, 2$ , designa los corrimientos de fase de los canales 1 y 2, en ausencia de acoplamiento con otros canales,  $U_{12}(r) := 2\mu V_{21}(r)/\hbar^2$  y  $\mu$  es la masa reducida del sistema. Como se mencionó antes, sólo es necesario resolver uno de los dos sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas. Sin embargo, si se quiere probar la simetría de la matriz  $S(\ell)$ , es necesario resolver ambos sistemas.

La probabilidad de transición inelástica como función de  $\ell$  se muestra en la figura 1. Nótese que para  $\ell > 350$  estas probabilidades tienden rápidamente a cero, comportamiento que justifica que los cálculos sólo se hagan hasta un cierto valor máximo de  $\ell$ , por ejemplo  $\ell_{\max} = 320$ .

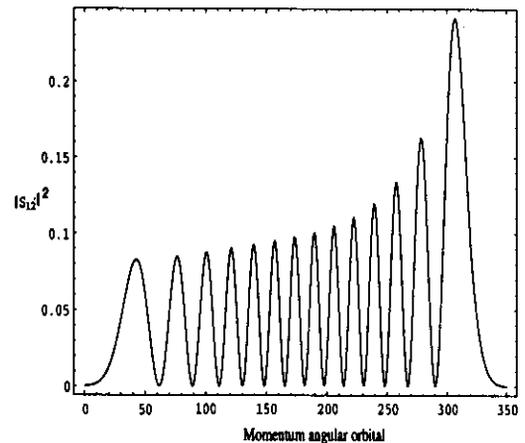


Figura 1. Probabilidad de transición como función del momento angular orbital  $\ell$ .

En la figura 2 se compara la sección eficaz diferencial inelástica experimental con los datos teóricos que se han obtenido por aplicación de la aproximación descrita en el presente trabajo. Como se observa la concordancia con los resultados experimentales es bastante buena.

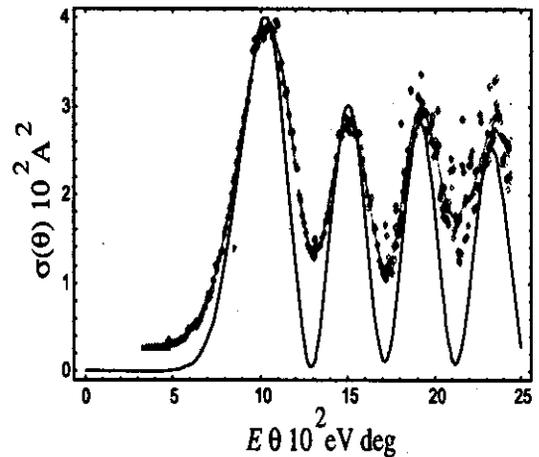


Figura 2. Comparación entre la sección eficaz diferencial calculada en el presente trabajo y datos experimentales [13].

La sección eficaz total inelástica se determinó por aplicación de la expresión

$$\sigma_{12} = \frac{\pi}{k_1^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) |S_{12}|^2$$

y los resultados se muestran en la tabla 1, en conjunto con los que generan las aproximaciones UWKB, DW y LZS para la energía de  $E = 70.9\text{eV}$ .

Aproximación	LZS <sup>a</sup>	DW <sup>b</sup>	UWKB <sup>a</sup>	Presente
$\sigma_{21} (ua^2)$	0.892	0.729	0.719	0.781

Tabla 1. Sección eficaz total inelástica.

Referencias: <sup>a</sup>[15], <sup>b</sup>[14].

Por último, obtuvimos la densidad de probabilidad para un estado de momentum angular  $\ell$  a partir de (9) y por extensión de la aproximación propuesta en el presente trabajo para todo el rango de valores de  $r$ , esto es,

$$\bar{\Psi}_{\beta\alpha}(\ell, r) := \varepsilon_{\beta}^{+}(r) G_{\beta\alpha}(\ell, r) \approx \varepsilon_{\beta}^{+}(\ell, r) G(\ell, r).$$

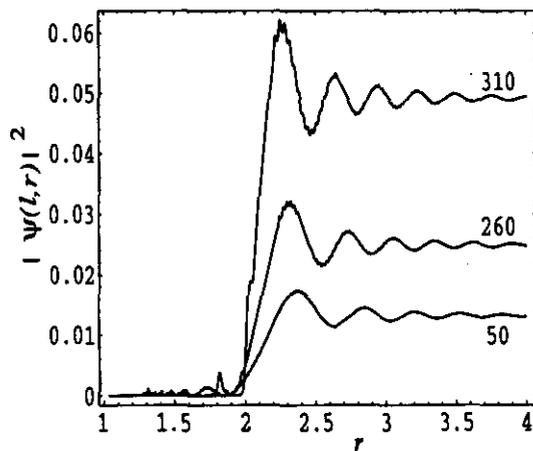


Figura 3. Densidad de probabilidad como función de  $r$  para varios valores del momentum angular  $\ell$ .

La figura 3 muestra el comportamiento de la densidad de probabilidad inelástica para  $\ell = 50, 260$  y  $310$ . Nótese que la máxima amplitud de probabilidad se alcanza siempre en la región de cruce de los potenciales elásticos ( $2 < r < 2.5$ ) y que el estado de momentum angular (onda parcial)  $\ell = 310$  es el de mayor amplitud en dicha región. Este hecho está en perfecta concordancia con lo que muestra la figura 1. Para grandes valores de  $r$  la probabilidad de transición alcanza valores constantes, como lo exige la teoría.

## 7. Conclusión

En este artículo se ha propuesto un método de aproximación para el estudio de procesos inelásticos y para el cálculo de la matriz  $S(\ell)$ , y se ha aplicado al análisis del sistema  $\text{He}^+ + \text{Ne}$ . La estructura sencilla del sistema de ecuaciones diferenciales que se debe resolver, así como los buenos resultados obtenidos en su aplicación, indican que el método es de utilidad y competitivo con relación

a otras aproximaciones. El método carece además de una serie de limitaciones que son características de otras aproximaciones. Por ejemplo, la teoría se puede aplicar a un problema multicanal y no requiere la exigencia de que los potenciales diagonales se crucen.

Desde el punto de vista numérico el método tiene grandes ventajas ya que la ecuación integral que determina la matriz  $S(\ell)$  se puede transformar en un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, para el cual existen excelentes métodos de solución numérica. El presente tratamiento de procesos inelásticos hace uso óptimo de las propiedades físicas que posee el sistema, es especial si es posible emplear métodos semiclásicos para tratar el problema no acoplado.

Es de anotar que el método se ha probado con éxito para acoplamiento débil entre los diferentes canales. Sin embargo, en el caso de acoplos intensos se ha observado que la unitariedad de la matriz  $S(\ell)$  se afecta de manera importante, generando que se sobreestime la sección eficaz diferencial inelástica. Afortunadamente en las colisiones atómicas de interés actual, los potenciales de acoplamiento no son muy intensos y la aproximación se puede usar con éxito.

## 8. Apéndice

En este apéndice se discute brevemente la generalidad de la expresión (13). En analogía con lo que se hace en la aproximación DW, suponemos que la solución elástica (regular) del canal de entrada domina el comportamiento del sistema en los otros canales. Entonces, en promedio  $|\Psi_{\alpha\alpha}(\ell, r)| = |\varphi_{\alpha}^{\times}(\ell, r)| \gg |\Psi_{\beta\alpha}(\ell, r)|$  y, de la ecuación (6), se concluye que  $\bar{\Psi}_{\alpha\alpha}(\ell, r) = 0$ . Por lo tanto de (11), (17), (9) y (16) tenemos para  $\alpha \neq \beta$

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha}(\ell) &= -2i(k_{\alpha} k_{\beta})^{-1/2} \times \\ &\int_0^{\infty} dR \varphi_{\beta}^{\times}(\ell, R) U_{\beta\alpha}(\ell, R) \varphi_{\alpha}^{\times}(\ell, R) \\ &= -2i(k_{\alpha} k_{\beta})^{-1/2} \exp[i(\eta_{\alpha}(\ell) + \eta_{\beta}(\ell))] \\ &\int_0^{\infty} \psi_{\beta}(\ell, r) U_{12}(r) \psi_{\alpha}(\ell, r) dr, \end{aligned}$$

donde  $\psi_{\beta}(\ell, r)$  es la solución regular del sistema, normalizada en la forma

$$\psi_{\beta}(\ell, r) \underset{r \rightarrow \infty}{=} \sin\left(k_{\beta}r - \frac{\ell\pi}{2} + \eta_{\beta}(\ell)\right).$$

Nótese que esta solución está relacionada con la solución regular  $\varphi_{\beta}^{\times}(\ell, r)$  por

$$\varphi_{\beta}^{\times}(\ell, r) = \exp(i\eta_{\beta}(\ell))\psi_{\beta}(\ell, r).$$

Si se tiene en cuenta que

$$S_{\beta\alpha}(\ell) = \delta_{\beta\alpha} - iT_{\beta\alpha}(\ell),$$

entonces, en el caso que estamos considerando  $\alpha \neq \beta$ , se recupera el elemento de la matriz de transición DW,

$$T_{\beta\alpha}(\ell) = 2(k_{\beta}k_{\alpha})^{-1/2} \exp[i(\eta_{\alpha}(\ell) + \eta_{\beta}(\ell))] \int_0^{\infty} \psi_{\beta}(\ell, r) U_{12}(r) \psi_{\alpha}(\ell, r) dr.$$

En lo referente a la aproximación de Born ésta es un caso particular de la DW. Además de suponer que el comportamiento del sistema es dominado por la solución regular del canal incidente, se considera que la función de onda incidente no se deforma de manera apreciable y que se comporta como una onda plana. Esto significa que en promedio

$$|\Psi_{\alpha\alpha}(\ell, r)| = |\varphi_{\alpha}^{\times}(\ell, r)| = k_{\alpha}r |J_{\ell}(k_{\alpha}r)| \gg |\Psi_{\beta\alpha}(\ell, r)|,$$

donde  $\ell$  es el momentum angular y  $J_{\ell}(k_{\beta}r)$  es la función esférica de Bessel de orden  $\ell$ . En estas circunstancias el elemento  $S_{\beta\alpha}(\ell)$  está dado por

$$S_{\beta\alpha}(\ell) = -2i(k_{\alpha}k_{\beta})^{-1/2} \times \int_0^r J_1(k_{\beta}R) U_{\beta\alpha}(R) J_1(k_{\alpha}R) R^2 dR.$$

Esta expresión conduce a su vez a la amplitud de transición que se obtiene mediante la aproximación de Born.

## Agradecimientos

Los autores agradecen al Doctor José Fernando Isaza y a la Fundación Mazda para el Arte y la Ciencia el otorgamiento de una beca para la realización de los estudios de Maestría en Física (HRM).

## REFERENCIAS

- [1] N. F. Mott y H. S. W. Massey, The Theory of Atomic Collision, 3rd ed., Oxford University Press, London (1965)
- [2] M. S. Child, Molecular Collision Theory, Academic Press, London (1974)
- [3] L. Landau, Physik. Z. Sowjetunion. 2, 46-51 (1932)
- [4] C. Zener, Proc. R. Soc. London Ser. A 137, 696-702 (1932)
- [5] E. C. G. Stückelberg, Helv. Phys. Acta 5, 369-422 (1932)
- [6] M. S. Child, Electronic Excitation: Nonadiabatic Transitions, 427-465, en Atom-Molecule Collision Theory. A Guide for Experimentalist, R. B. Bernstein (Ed.), Plenum Press, New York (1979)
- [7] B. C. Eu, Semiclassical Theories of Molecular Scattering, Springer-Verlag, New York (1984)
- [8] D. Campos, Documento interno: Ecuación integral para la Matriz S, Dpto de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá (1997)
- [9] D. Campos, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 14, 2585-2597 (1981)
- [10] D. Campos, J. M. Tejeiro y F. Cristancho Z. Naturforsch. 41 a, 704-714 (1986)
- [11] M. V. Berry y K. E. Mount, Rep. Prog. Phys. 35, 315 (1972)
- [12] S. C. Miller y R. H. Good, Phys. Rev. 91, 174 (1953)
- [13] D. Coffey Jr., D. C. Lorents y F. T. Smith, Phys. Rev. 87, 201 (1969)
- [14] R. E. Olson y F. T. Smith, Phys. Rev. A3, 1607 (1971)
- [15] B. C. Eu y T. P. Tsien, Phys. Rev. A7, 648 (1973)
- [16] J. M. Tejeiro, Tesis de Magister en Física, Dpto. de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá (1984)
- [17] F. Cristancho, Tesis de Magister en Física. Dpto. de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá (1985)