

Una perspectiva clásica de la función de onda coulombiana del continuo

I. SAMENGO, R.G. PREGLIASCO*, J. FIOL, R.O. BARRACHINA.

CENTRO ATÓMICO BARILOCHE E INSTITUTO BALSEIRO
(8400) BARILOCHE - ARGENTINA
e-mail: willy@cab.cnea.edu.ar

Resumen

En este trabajo desarrollamos un método para calcular una densidad de partículas clásica, análoga a la densidad de probabilidad cuántica, para el problema de dispersión por un potencial central arbitrario.

Utilizando este método hemos encontrado expresiones analíticas sencillas para las densidades espaciales clásicas en el problema de la dispersión de Rutherford que permiten interpretar las estructuras de la función de onda coulombiana del continuo. Además hemos logrado separar las distribuciones clásicas en una componente entrante y otra saliente *en todo punto del espacio* y no sólo en su comportamiento asintótico, obteniendo una transformación entre las densidades para los casos atractivo y repulsivo.

Abstract

In this work we develop a method to calculate the classical density of particles scattered by a central force. Using this technique we find an analytical expression for the classical density in the scattering from a Coulomb potential. We compare it with the quantum-mechanical result. We conclude that both distributions have the same global behavior. We show that, not only in the asymptotic region but in every point of the space, the classical distributions can be separated in incoming and outgoing components. Furthermore, the densities for the attractive and repulsive case can be mapped into each other. These results lead to an interpretation of the different features of the quantum-mechanical densities in terms of classical concepts.

Introducción

El estado cuántico de una partícula sin spin está descrito completamente por su función de onda. En particular los estados estacionarios de dispersión, a pesar de no constituir estados propios, contienen toda la información disponible sobre el proceso de colisión y por lo tanto es imprescindible una completa comprensión de éstos para una buena descripción del fenómeno físico.

Desde el trabajo pionero de Ford y Wheeler¹ los modelos clásicos y semiclásicos han demostrado ser una herramienta importante en la descripción e interpretación de los procesos de colisión.

En la emisión electrónica de autoionización por colisiones ión-átomo^{2,3} se ha podido interpretar clásicamente al pico que se observa en la dirección hacia adelante como debido a un efecto gloria^{4,5}. Además, la sección eficaz presenta una estructura de interferencia que está relacionada con el concepto semiclásico de dispersión cercana y lejana⁶ (nearside and farside scattering).

El objetivo de este trabajo es dar una interpretación de la forma de la función de onda coulombiana del continuo. Desarrollamos, en primer lugar, un método analítico para el cálculo de una densidad clásica -completamente análoga a la densidad de probabilidad cuántica- para el problema general de dispersión por un potencial central arbitrario. Aplicando esta poderosa

* Autor a quien debe dirigirse la correspondencia.

herramienta al caso particular de dispersión de Rutherford hemos encontrado expresiones analíticas sencillas para las densidades clásicas que permiten interpretar las estructuras observadas en el cálculo cuántico a partir de la geometría de las trayectorias.

2. Densidad Clásica

Como nos interesa describir una situación clásica análoga a la de los estados estacionarios del continuo cuánticos, consideramos un flujo infinito y uniforme j de partículas no interactuantes de masa m e impulso k sujetas a un potencial central $V(r)$. Vamos a buscar una expresión para la densidad de partículas en todo punto del espacio $n(r)$ observando la evolución de un grupo de partículas a lo largo de la colisión.

Como se muestra en la figura 1, para $t \rightarrow -\infty$ el número de partículas δN que atraviesan un elemento de área $\delta A(-\infty) = \rho \delta \rho \delta \phi$ en un intervalo de tiempo δt es $\delta N = \delta A(-\infty) \cdot j \delta t$. El volumen que ocupan está dado por

$$\delta V(-\infty) = \delta A(-\infty) \cdot k \delta t / m,$$

de donde resulta que la densidad en el infinito es

$$n_\infty = \frac{\delta N}{\delta V(-\infty)} = \frac{j m}{k}. \quad (1)$$

El volumen ocupado por este grupo de partículas se distorsiona a lo largo de la colisión. Para un tiempo t cualquiera, $\delta V(t) = \delta A(t) \cdot \rho \delta t / m$ con

$$\delta A(t) = (\mathbf{r} \cdot \hat{\rho} \delta \phi) \times \left(\left| \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \rho} \right) \right| \delta \rho \right), \quad (2)$$

donde $\hat{\rho}$ es un versor en el plano de la trayectoria normal a la dirección de incidencia.

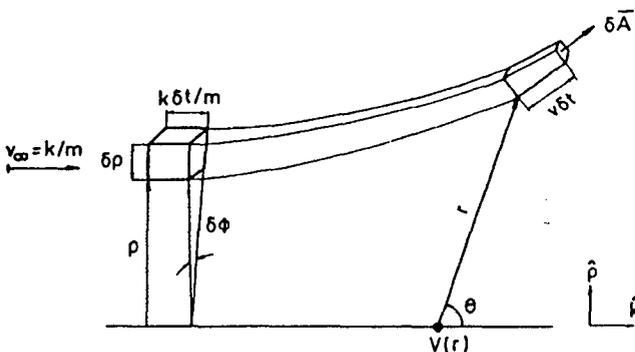


Figura 1: Distorsión del volumen de control ocupado por un número fijo de partículas.

De esta manera, la densidad de partículas resulta

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\partial N}{\partial V}(t) = \frac{j}{p/m} \frac{\rho}{\mathbf{r} \cdot \hat{\rho}} \left| \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \rho} \right) \times \hat{\mathbf{p}} \right|^{-1}. \quad (3)$$

Como estamos ante un flujo estacionario, nos interesa eliminar de estas expresiones toda dependencia explícita del tiempo. En el plano de la colisión, a cada parámetro de impacto ρ le corresponde una única trayectoria, podemos entonces describir la evolución en el tiempo de cada partícula por medio de una función $\mathbf{r}(\rho, t)$. En coordenadas polares $\mathbf{r} = (r, \theta)$ esta condición define una transformación entre los parámetros de la órbita dependiente del tiempo (ρ, t) y las coordenadas espaciales de las trayectorias (r, θ) . Con un poco de álgebra de derivadas parciales, teniendo en cuenta que $p/m = (\partial r / \partial t)_\rho$ y haciendo uso de la conservación del impulso angular $(\rho p_\infty = m r^2 (\partial \theta / \partial \rho)_\rho)$ resulta

$$n(\mathbf{r}) = \frac{n_\infty}{\text{sen } \theta} \left| \left(\frac{\partial \rho}{\partial r} \right)_\theta \right|. \quad (4)$$

Hasta el momento hemos supuesto que existe sólo una trayectoria que pasa por cada punto del espacio. En general, será necesario sumar todas las trayectorias que pasan por determinada posición \mathbf{r} .

$$n(\mathbf{r}) = \frac{n_\infty}{\text{sen } \theta} \sum_\rho \left| \left(\frac{\partial \rho}{\partial r} \right)_\theta \right|. \quad (5)$$

En esta expresión se ha eliminado toda dependencia temporal, lo que indica que la distribución espacial de partículas es una función de la geometría de las trayectorias. Esto es una consecuencia de la condición estacionaria del problema.

Existen dos casos en los que la densidad clásica diverge:

- $\text{sen}(\theta) = 0$.

Esto ocurrirá sobre el eje de incidencia. Por analogía con el fenómeno óptico vamos a llamarlo *cáustica de gloria*. El origen físico de esta divergencia es que al ser éste un eje de simetría, aquellas partículas inicialmente distribuidas en el anillo $2\pi\rho d\rho$ se concentran en un punto cuando cruzan el eje (ver la figura 2a).

$$\bullet (\partial r / \partial \rho)_0 = 0.$$

Esta condición define los valores extremos de la ecuación de la trayectoria $r=r(\rho, \theta)$ para θ fijo. En otras palabras en estos puntos existe una acumulación de las trayectorias. En este sentido esta divergencia puede denominarse *cáustica de arco iris* (figura 2b).

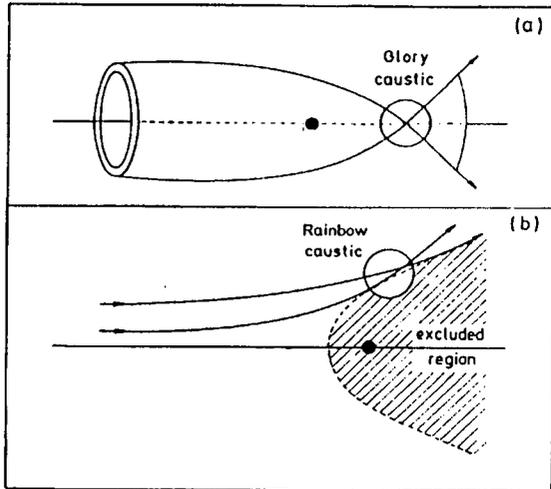


Figura 2: Trayectorias que dan lugar a (a) efecto gloria para potencial atractivo y (b) efecto arco iris (potencial repulsivo).

La sección eficaz $\sigma(\theta)$ se define como el número de partículas que salen de la colisión por unidad de tiempo y ángulo sólido en una determinada dirección cuando el flujo incidente es igual a uno. Podemos calcularla entonces a partir de la densidad normalizada ($n(-\infty)=1$) como

$$\sigma(\theta) = \lim_{r \rightarrow +\infty} r^2 n_-(r). \quad (6)$$

donde $n_-(r)$ es la contribución a la densidad de aquellas trayectorias que pasan por el punto r al alejarse del centro de fuerzas. Además, la contribución a la densidad n_+ de las partículas que se acercan al centro de fuerzas tiende, asintóticamente, al flujo incidente (igual a 1). Reemplazando con la expresión (5) en (6) podemos escribir

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{r^2}{\sin\theta} \sum_{\rho} \left| \frac{\partial \theta}{\partial r} \right| \left| \frac{\partial \rho}{\partial \theta} \right|_r \\ &= \frac{1}{\sin\theta} \sum_{\rho} \rho \left| \frac{\partial \rho}{\partial \theta} \right|_{r \rightarrow +\infty}. \end{aligned} \quad (7)$$

Esta es la conocida expresión para la sección eficaz clásica. Vemos cómo la densidad de partículas en una región alejada del centro de fuerzas contiene la información completa de la sección eficaz.

3. El problema de Rutherford

Con las herramientas de la sección anterior, vamos a calcular la densidad espacial para el potencial coulombiano $V(r)=Z/r$. La ecuación de la trayectoria tiene la forma

$$\frac{\rho}{r} = -\frac{b}{\rho} \frac{1 + \cos\theta}{2} + \sin\theta, \quad (8)$$

donde definimos la longitud característica⁷

$$b = \frac{Z}{k^2 / 2m}. \quad (9)$$

En el caso de que el potencial sea repulsivo ($Z>0$) el haz de partículas no cubre todos los puntos del espacio. La ecuación de la cáustica de arco iris $(\partial r / \partial \rho)_0 = 0$ tiene por solución aquellos puntos que satisfacen la condición

$$\frac{r}{b} \frac{1 - \cos\theta}{2} = 1. \quad (10)$$

Esta ecuación define un paraboloides que es la frontera de la región de sombra del problema de dispersión de Rutherford.

La ecuación de la trayectoria puede invertirse para obtener el parámetro de impacto que corresponde a las trayectorias que pasan por un determinado punto del espacio (r, θ)

$$\rho_{\pm} = \frac{r \sin\theta}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{2b}{r} \frac{1}{1 - \cos\theta}} \right). \quad (11)$$

Esto indica que existen dos trayectorias que pasan por cada punto del espacio (ver figura 3)

Una de las soluciones (+) corresponde a la trayectoria que pasa por el punto a la entrada de la colisión y la otra (-) a la salida de la misma. Si el potencial es atractivo ($Z>0$) a la entrada y a la salida significa antes y después de cruzar la línea $\theta=0$, donde se encuentra la cáustica de gloria. Por otra parte, si el potencial es repulsivo ($Z<0$) la división se produce antes y después de alcanzar la cáustica de arco iris. Esta doble solución para el parámetro de impacto que

corresponde a un dado punto r nos permite definir dos densidades n_+ y n_- (ver ec. 5) que

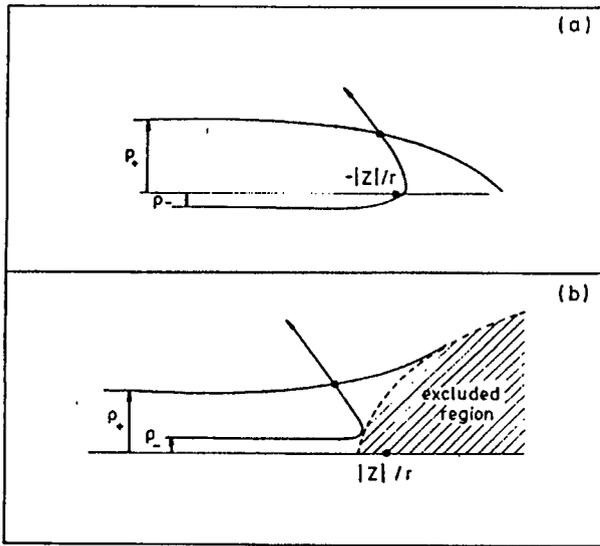


Figura 3: Dos trayectorias que pasan por el mismo punto (a) para el caso atractivo y (b) repulsivo.

llamaremos densidad entrante y saliente respectivamente. La densidad total es la suma de ambas. Nótese que la separación de la densidad total en estas componentes *en todo punto del espacio*, es la única separación natural que puede definirse a partir de las trayectorias, y es una consecuencia de la bivaluación de $\rho(\theta, r)$.

Calculamos entonces la densidad y obtenemos

$$n(\xi) = n_+(\xi) + n_-(\xi), \quad (12)$$

con

$$n_{\pm}(\xi) = \frac{1}{4} \frac{(1 \pm \sqrt{1 - \frac{1}{\xi}})^2}{\sqrt{1 - \frac{1}{\xi}}}. \quad (14)$$

La dependencia en la posición se produce a través de la variable reducida ξ (ver figura 4)

$$\xi = \frac{r}{b} \frac{1 - \cos\theta}{2} = \frac{1}{2kb} (kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (13)$$

Sumando ambas contribuciones resulta

$$n(\xi) = \frac{1 - \frac{1}{2\xi}}{\sqrt{1 - \frac{1}{\xi}}}. \quad (15)$$

Las distribuciones de entrada, de salida y total se muestran en la figura 5.

Para un potencial repulsivo tendremos $\xi \geq 0$. En este caso las densidades están sólo definidas para $\xi > 1$. El límite $\xi = 1$ describe la cáustica de arco iris lo que explica la divergencia. El intervalo $0 < \xi < 1$ es la región de sombra.

Por el contrario, para un potencial atractivo resulta $\xi \leq 0$. En este caso no existen restricciones para los valores de ξ (no hay una región prohibida) y la divergencia en $\xi = 0$ corresponde a la cáustica de gloria.

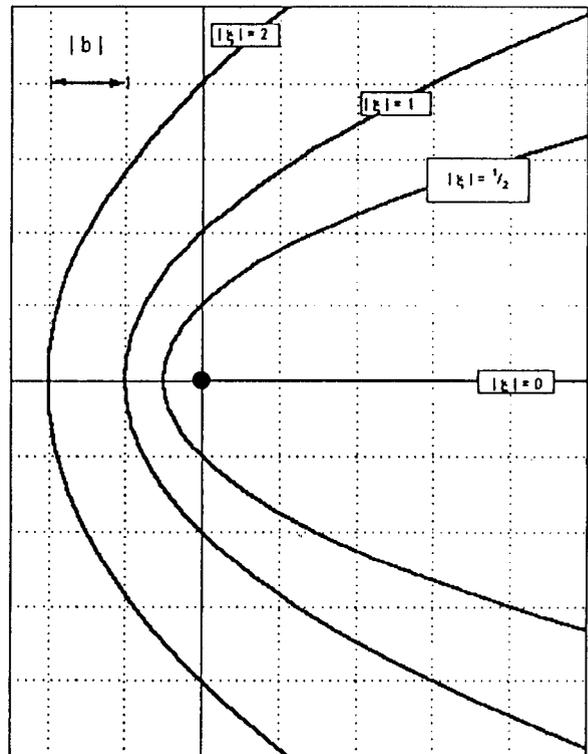


Figure 4: Valores de la variable reducida en el espacio

Puede verse fácilmente que las densidades de entrada y de salida (y entonces también la densidad total) satisfacen la siguiente propiedad de simetría

$$n_{\pm}(\xi) = n_{\pm}(1 - \xi). \quad (16)$$

Esta simple relación muestra que existe una transformación entre las densidades correspondientes a los casos atractivo y repulsivo. Se sabe que en el potencial coulombiano, la distribución asintótica (caracterizada por la sección eficaz) no depende

del signo del potencial. Cuando nos acercamos al centro de fuerzas, las distribuciones son muy diferentes y sin embargo acabamos de mostrar la estrecha relación que existe entre el caso atractivo y el repulsivo. En particular, esta relación transforma la divergencia de la cáustica de gloria en la de la cáustica de arco iris, las cuales aparentan tener orígenes físicos muy diferentes.

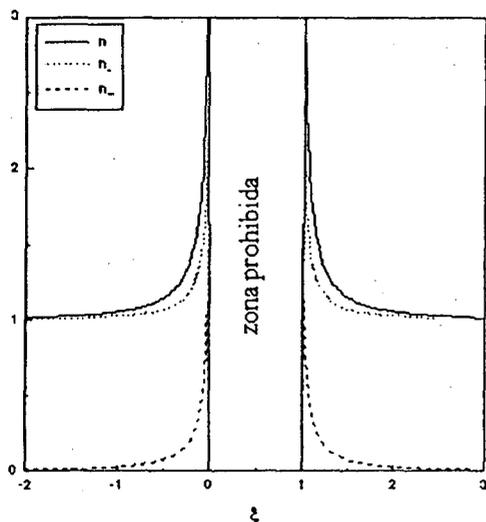


Figura 5: Densidades clásicas entrante, saliente y total como función de la variable reducida.

Podemos obtener la sección eficaz a partir del límite asintótico de la densidad saliente, como $n_+ \rightarrow 1/(4\xi)^2 + O(\xi^{-3})$ cuando $(|\xi| \rightarrow \infty)$ obtenemos:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \lim_{r \rightarrow +\infty} r^2 n_-(\xi) = \frac{(b/4)^2}{\text{sen}^4(\theta/2)}. \quad (17)$$

que es el conocido resultado de la sección eficaz de Rutherford⁸

4. Comparación con Resultados Cuánticos

La densidad de probabilidad cuántica puede calcularse simplemente a partir del cuadrado del módulo de la función de onda coulombiana del continuo. Normalizada a flujo incidente unidad resulta⁹

$$n(v, \xi) = n(v, 0) |F_1(1 + iv; 1; -4iv\xi)|^2, \quad (18)$$

donde el factor

$$n(v, 0) = |e^{-\pi v/2} \Gamma(1 + iv)|^2 = \frac{2\pi v}{e^{2\pi v} - 1},$$

es el llamado *factor de Coulomb* y es el valor de la densidad a lo largo de la dirección $\theta = 0$. Vemos que la densidad depende de la posición sólo a través de la variable reducida ξ definida anteriormente (ec. 13), igual que en caso clásico; pero aquí aparece un nuevo parámetro v

$$v = \frac{mZ}{\hbar k}, \quad (19)$$

que contiene toda la dependencia con \hbar y da cuenta de la naturaleza cuántica de la descripción.

En la figura 6 mostramos la densidad cuántica en función de ξ para $|v|=3$. Como elemento de comparación mostramos también la densidad clásica. Vemos que la densidad cuántica presenta oscilaciones alrededor del valor clásico. La naturaleza y la frecuencia espacial de dichas oscilaciones depende del valor de $|v|$ y tienen un origen esencialmente cuántico. Teniendo en cuenta la bivaluación de las trayectorias en cada punto del espacio, las oscilaciones pueden interpretarse semiclásicamente como interferencias entre ambos caminos, antes y después de alcanzar la cáustica.

Analizamos finalmente el comportamiento de estas densidades en la posición de las cáusticas.

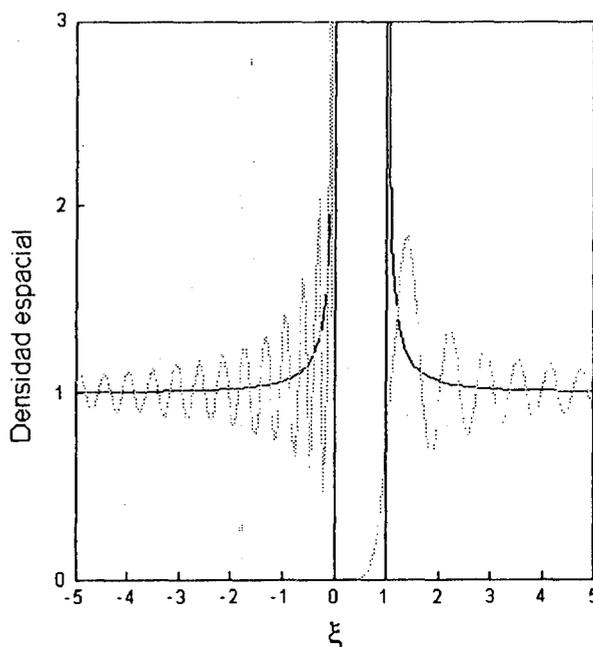


Figura 6: Comparación entre densidades clásicas y densidades de probabilidad cuánticas para potenciales atractivo y repulsivo. Los valores de las densidades cuánticas oscilan alrededor de los clásicos.

En el caso atractivo, vemos que en la cáustica de gloria, ($\xi \rightarrow 0^-$) la densidad cuántica no diverge pero tiene un máximo que alcanza el valor

$$n(v, 0^-) = \frac{2\pi|v|}{1 - e^{-2\pi|v|}}, \quad (20)$$

que para $\hbar \rightarrow 0$ ($v \rightarrow \infty$) diverge recuperándose así el resultado clásico. De la misma manera en la cáustica de arco iris tenemos nuevamente un máximo sólo que se encuentra ligeramente desplazado hacia la zona clásicamente accesible. En particular, sobre el eje $\xi \rightarrow 0^+$ la densidad toma el valor

$$n(v, 0^+) = \frac{2\pi|v|}{e^{2\pi|v|} - 1}, \quad (21)$$

que para $v \rightarrow \infty$ decae rápidamente a cero como es de esperar en la densidad clásica dentro de una región prohibida.

5. Conclusiones

Hemos encontrado expresiones analíticas sencillas para las densidades espaciales clásicas en el problema estacionario de dispersión elástica de proyectiles por un potencial central arbitrario. Utilizando estas densidades clásicas pueden comprenderse las principales características de la función de onda del continuo. Este conocimiento es de gran utilidad en la resolución de problemas de colisión multicanal -donde no se conoce la solución exacta- pues proporciona un criterio de aproximación para las funciones de onda que, en definitiva, es la información más importante para calcular la sección eficaz correctamente.

Utilizando esta técnica para el caso particular de la dispersión de Rutherford obtuvimos una separación para la densidad clásica en contribuciones entrante y saliente en todo punto del espacio y no sólo en el límite asintótico. Este resultado nos permite interpretar las oscilaciones que aparecen en el tratamiento cuántico como debidas a interferencias entre las dos trayectorias que pasan por cada punto. En el límite clásico ($\hbar \rightarrow 0, v \rightarrow \infty$) las oscilaciones no disminuyen sino que aumenta su frecuencia promediando a los valores de densidad clásica.

Las densidades cuánticas, a diferencia de las clásicas, no divergen sino que presentan

máximos muy pronunciados detrás del centro de potencial ($\xi = 0$) en el caso atractivo y ligeramente desplazado de la cáustica en el caso repulsivo. A partir de las densidades clásicas podemos comprender estos máximos como efectos de gloria y arco iris que pueden interpretarse fácilmente en función de la geometría de las trayectorias

Finalmente hemos señalado una transformación entre las densidades para los casos de potencial atractivo y repulsivo. En particular en el límite asintótico esta relación expresa el conocido hecho de la independencia de la sección eficaz respecto del signo del potencial.

6. Referencias

- 1- K. W. Ford, J. A. Wheeler, *Ann. of Phys.* **7**, 259 (1959).
- 2- J. K. Swenson, C. C. Havener, N. Stolterfoht, K. Simmer, F. W. Meyer, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 35 (1989).
- 3- R. O. Barrachina, J. H. Macek, *J. Phys. B* **22**, 2151 (1989)
- 4- I. Samengo, R. O. Barrachina, *Eur. J. Phys.* **15**, 300 (1994)
- 5- I. Samengo, R. O. Barrachina, enviado para su publicación (1995).
- 6- I. Samengo, R. O. Barrachina, enviado para su publicación (1996).
- 7- H. Goldstein, "Classical Mechanics", Addison-Wesley, London (1959).
- 8- E. Rutherford, *Phil. Mag.* **21**, 669 (1911).
- 9- A. Messiah, "Mecánica cuántica", tomo I, Ed. Tecnos, Madrid (1973).