

# Regularización del problema de dispersión en presencia de potenciales de largo alcance

JUAN FIOL\* Y R. O. BARRACHINA

INSTITUTO BALSEIRO (UNC) Y CENTRO ATOMICO BARILOCHE (CNEA)  
AVDA. BUSTILLO 9500 - (8400) BARILOCHE - RIO NEGRO - ARGENTINA  
e-mail: fiol@cab.cnea.edu.ar

## Resumen

El estudio de cualquier proceso de colisiones atómicas involucra la presencia de interacciones coulombianas, ya sea en la evolución asintótica del sistema o a través de estados intermedios en colisiones de reordenación. A pesar de ello, la teoría usual de colisiones no puede aplicarse a este tipo de interacciones de largo alcance, ya que uno de sus postulados requiere que asintóticamente, los fragmentos intervinientes evolucionen libremente unos de otros. Uno de los métodos propuestos para construir una teoría de colisiones que incluya al potencial coulombiano consiste en mantener un apartamiento  $\delta E$  en la conservación de la energía y tomar  $\delta E \rightarrow 0$  después de regularizar la matriz de transición de interés. Utilizando una descripción clásica del problema de dispersión coulombiana mostramos la estrecha relación entre este método de regularización y otro propuesto por Dettmann en 1971 basado en postergar el límite de tiempo infinito y así evitar las dificultades que presenta este potencial en el límite asintótico.

## Abstract

Almost every process in atomic collisions involves coulomb interactions either in the asymptotic evolution of the system or in intermediate states in charge exchange processes. However, this type of long range interactions does not fit into the usual formal scattering theory, which requires a free asymptotic evolution of the colliding fragments. Many different methods have been proposed in order to circumvent these difficulties and include long range interactions. One of them consists in evaluating the on-energy-shell limit in a regularized version of the off-energy-shell transition matrix. Using a classical description, we show the close relation between this method and another one suggested by Dettmann in 1971 which consists in postponing the infinite time limit in a time-dependent wave-packet formalism.

## Introducción

La teoría usual de colisiones no puede aplicarse al problema de la dispersión de partículas cargadas debido a que el potencial coulombiano decrece muy lentamente con la distancia como para que se cumpla la condición asintótica, que es uno de los postulados básicos de dicha teoría<sup>1</sup>. Esto plantea una grave dificultad, ya que esta interacción de largo alcance se presenta en la gran mayoría de los procesos de colisiones

atómicas. Para la colisión elástica de dos partículas cargadas (colisión de Rutherford) esta dificultad es fácil de resolver, ya que en dicho caso la ecuación de Schrödinger estacionaria para los estados del continuo puede resolverse analíticamente<sup>2</sup>, y a partir de su límite asintótico obtenerse la correspondiente amplitud de dispersión. Sin embargo, esta representa una situación excepcional que no puede extenderse a otros problemas de colisión en presencia de potenciales de largo alcance. Por ello resulta

\* Autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

imprescindible construir una teoría formal de colisiones que, al incorporar una condición asintótica más débil, permita incluir este tipo de interacciones. En el caso de las colisiones multicanales, podemos distinguir dos líneas de desarrollo para la resolución de este problema. En una de ellas<sup>3</sup> se plantea la necesidad de mantener las correctas condiciones de contorno, a través de una fase logarítmica que distorsiona los estados estacionarios de dispersión en representación de coordenadas. Este método, que generaliza una propuesta realizada por Mulherin y Zinnes<sup>4</sup> para la colisión de Rutherford, ha sido aplicado con éxito a distintos problemas de excitación, captura<sup>5</sup> e ionización<sup>6</sup>. Otra propuesta<sup>7</sup> consiste en realizar un apartamiento en la conservación de la energía, incorporando factores de distorsión que tengan en cuenta las conocidas dificultades de la matriz de transición sobre la capa de energía<sup>8</sup>. Este método, sin embargo, presenta algunas dificultades conceptuales que han sembrado dudas sobre su validez<sup>5</sup>. Esto se debe a que, en principio, no pasa de ser una generalización no fundamentada de una técnica propuesta por Roberts para el caso particular de la colisión de Rutherford<sup>9</sup>. Este último método está relacionado a su vez con una formulación desarrollada por van Haeringen<sup>10</sup> en 1976 que permite generalizar en forma rigurosa la teoría monocanal de colisiones para incluir potenciales de largo alcance. En los últimos años se han generado muy fuertes disputas sobre las ventajas y desventajas de ambas formulaciones<sup>11-14</sup>. Sin embargo, puesto que el método de Mulherin y Zinnes puede deducirse rigurosamente a partir de la teoría de van Haeringen como una formulación de onda distorsionada<sup>15</sup>, es razonable suponer que sus respectivas generalizaciones al caso multicanal, lejos de excluirse mutuamente, sean complementarias y permitan estudiar un mismo problema de colisión desde distintos puntos de vista. Sin embargo, mientras que la motivación del método de onda distorsionada del continuo es clara, la técnica de regularización a través de un apartamiento  $\delta E$  de la capa de energía involucra una gran dificultad conceptual. En el presente trabajo proponemos una interpretación clásica de este último método. Para ello estudiamos el límite

$\delta E \rightarrow 0$  en la función de onda coulombiana del continuo fuera de la capa de energía (off-energy-shell), en base a una descripción clásica del scattering de Rutherford. Este estudio lo realizamos en representación de impulso, donde esta función de onda tiene una forma más simple y está directamente relacionada con la matriz de transición. Adicionalmente, este estudio es importante puesto que dicha función de onda aparece también como estado intermedio en diversos problemas de colisión multicanal, particularmente en procesos de intercambio de carga<sup>16</sup>.

### Colisiones monocanales en presencia de potenciales de largo alcance

En la base de la teoría usual de colisiones está la suposición de que mucho antes o después de la colisión los fragmentos intervinientes evolucionan libremente unos de otros. Matemáticamente esta condición asintótica se traduce en la existencia de los operadores de Moller<sup>1</sup>

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH_{\pm}t/\hbar},$$

donde  $H$  es el hamiltoniano total y  $H_{\pm}$  es el hamiltoniano de canal de entrada (+) o salida (-). La validez de esta condición asintótica depende de la naturaleza de las interacciones involucradas. En particular, puede demostrarse<sup>17,18</sup> que este límite fuerte no existe en presencia de interacciones coulombianas.

En 1964, Dollard dio un primer paso hacia la solución de este problema al extender rigurosamente la teoría de colisiones dependientes del tiempo en presencia de potenciales de largo alcance. Por ejemplo, en el caso más simple de la colisión elástica de dos partículas, demostró que los operadores de Moller deben redefinirse de la siguiente manera

$$\Omega_{\pm}^{\zeta} \Psi(\vec{r}) = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar} e^{iHt/\hbar} e^{-i(p^2/2m)t/\hbar} \times D_{\pm}^{-1}(p^2/2m, t) \tilde{\Psi}(\vec{p}) d\vec{p}$$

donde  $m$  es la masa reducida del sistema y se supone que la interacción presenta un

comportamiento asintóticamente coulombiano  $V(r) \rightarrow Z/r$ . Hemos definido el factor de anomalía

$$D_{\pm}(E_p, t) = \left( \frac{4E_p |t|}{\hbar} \right)^{\mp iv_p}, \quad (1)$$

donde  $v_p = mZ/\hbar p$  es el parámetro de Sommerfeld y  $E_p = p^2/2m$ .

A partir de este resultado, van Haeringen extiende rigurosamente la teoría de dispersión independiente del tiempo reconstruyendo para los estados estacionarios de dispersión  $|\bar{p}\pm\rangle = \Omega_{\pm}^c |\bar{p}\rangle$  una ecuación de Lippmann-Schwinger

$$|\bar{p}\pm\rangle = |\bar{p}\pm\varepsilon\rangle + G_0(E_p \pm i\varepsilon) V_{\varepsilon} |\bar{p}\pm\rangle,$$

con  $G_0(z) = (z - H_0)^{-1}$  el operador de Green libre. En esta expresión deben utilizarse, en lugar de los estados de partícula libre  $|\bar{p}\rangle$  usuales en la teoría de corto alcance, estados asintóticos coulombianos  $|\bar{p}\pm\varepsilon\rangle$  cuya forma en representación de impulso está dada por

$$\langle \bar{k} | \bar{p}\pm\varepsilon \rangle = g_{\pm}^{-1}(E_p, \mp i\varepsilon) \langle \bar{k} | \bar{p} \rangle,$$

donde hemos definido los factores de distorsión

$$g_{\pm}(E_p, \delta E) = \Gamma(1 \mp iv_p) e^{-\pi v_p/2} \left( \frac{4E_p}{\delta E} \right)^{\mp iv_p}. \quad (2)$$

Siguiendo este razonamiento, es posible construir un formalismo independiente del tiempo que permite absorber la teoría usual e incorporar potenciales de largo alcance. En este formalismo, el elemento de matriz  $t_{\bar{k},\bar{k}}(E_p)$  cuyo módulo cuadrado se relaciona con la sección eficaz de colisión está dado explícitamente por el límite

$$t_{\bar{k},\bar{k}}(E_p) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} g_{+}^{-1}(E_p, -i\varepsilon) \langle \bar{k}' | T(E_p + i\varepsilon) | \bar{k} \rangle g_{+}^{-1}(E_p, -i\varepsilon) \quad (3)$$

donde  $k^2/2m = k'^2/2m = E_p$ . En esta expresión la regularización de la matriz de transición  $\langle \bar{k}' | T(E_p + i\varepsilon) | \bar{k} \rangle$  de la teoría usual se logra a través de un apartamiento complejo  $i\varepsilon$  respecto de la capa de energía.

### Método de regularización de Roberts

Se puede demostrar que, para el potencial coulombiano puro, es posible obtener la expresión correcta para  $t_{\bar{k},\bar{k}}(E_p)$  utilizando apartamientos "reales" respecto de la capa de energía<sup>9</sup>.

$$t_{\bar{k},\bar{k}}(E_p) = \lim_{E_k, E_k \rightarrow E_p} g_{+}^{-1}(E_p, E_k - E_p) \times \langle \bar{k}' | T(E_p) | \bar{k} \rangle g_{+}^{-1}(E_p, E_k - E_p). \quad (4)$$

Los factores  $g_{+}^{-1}(E_p, \delta E)$  corrigen las anomalías que se producen en el elemento de matriz  $\langle \bar{k}' | T(E_p) | \bar{k} \rangle$  de la teoría usual al acercarse a la capa de energía<sup>8</sup> y presentan el mismo tipo de corte ramal que los factores de distorsión utilizados por Dollard (ecuación (1)) en un formalismo dependiente del tiempo. De hecho, se verifica la siguiente igualdad entre ambos factores

$$g_{\pm}(E_p, \delta E) = \Gamma(1 \mp iv_p) e^{-\pi v_p/2} D_{\pm}(E_p, \hbar / \delta E).$$

Este resultado nos permite interpretar que el apartamiento  $\delta E$  respecto de la capa de energía en la ecuación (4) es equivalente a postergar el límite de tiempo infinito en el formalismo de Dollard.

Esta analogía se ve reforzada por un trabajo de Dettmann<sup>19</sup> donde, al estudiar la dispersión coulombiana de un paquete de ondas en un intervalo de tiempo finito, encuentra que la matriz de transición está afectada por similares factores de distorsión.

En el formalismo de Roberts, y como consecuencia del comportamiento asintótico del potencial, estos factores de distorsión aparecen al calcular el estado off-shell del continuo

$|\Psi_{\vec{k}, \delta E}^{(+)}\rangle$  en representación de impulso. La representación de coordenadas de este estado fue estudiada en detalle por Macek y Alston en el contexto de las colisiones de intercambio de carga<sup>20</sup>. Su transformada de Fourier puede calcularse en forma analítica<sup>9</sup>

$$\langle \vec{k}', \Psi_{\vec{k}, \delta E}^{(+)} \rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k}') + \frac{Z}{2\pi^2 \hbar} \frac{\Gamma(1 + i\nu_k)}{\Gamma(1 - i\nu_k)} \times \left( \frac{4k^2}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} \right)^{i\nu_k} \frac{1}{((E_k - E_{k'}) + \delta E + i\epsilon)} \times \frac{S(E_k, E_{k'}, \delta E)}{|\vec{k} - \vec{k}'| (1 + \delta E / E_k) |\vec{k} - \vec{k}'|} \quad (5)$$

donde la función  $S(E_k, E_{k'}, \delta E)$  presenta una estructura complicada<sup>9</sup> que da lugar a cortes ramales sobre las capas de energía  $\delta E \rightarrow 0$  y  $E_{k'} \rightarrow E_k + \delta E$ . Estos cortes están caracterizados por el factor de distorsión definido en la ecuación (2).

Para entender la naturaleza de estos resultados e interpretar las similitudes entre mantenerse fuera de la capa de energía y postergar el límite de tiempo infinito, planteamos un problema clásico equivalente.

### Problema clásico equivalente

En la representación de coordenadas del estado del continuo off-shell  $\langle r | \Psi_{\vec{k}, \delta E}^{(+)} \rangle$ , la energía cinética asociada al impulso  $\vec{k}$  -definido por su comportamiento asintótico- mantiene un apartamiento  $\delta E$  respecto de su energía total. Clásicamente, podemos imaginar una situación análoga si la partícula, en lugar de incidir desde el infinito, lo hace desde una distancia  $R$  respecto del centro de fuerzas coulombiano. De esta manera, se mantiene una diferencia  $\delta E = Z/R$  entre la energía cinética inicial  $E_k = k^2 / 2m$  y la energía total.

Con esta condición inicial, las trayectorias pueden calcularse en forma analítica obteniendo en representación de coordenadas

$$\frac{\rho}{r} = -\frac{\delta E / E_k}{\rho / R} \left( 1 + \sqrt{1 - (\rho / R)^2} \cos \theta \right) + \left( 1 + \frac{\delta E}{2E_k} \right) \text{sen} \theta,$$

donde  $\rho$  es el parámetro de impacto y el ángulo  $\theta$  se mide en sentido antihorario a partir de la dirección definida por el impulso inicial  $\vec{k}$ . En representación de impulsos las trayectorias son secciones de circunferencia de radio

$$\left| \frac{\delta E / 2E_k}{\rho / R} \right| k,$$

centradas en el punto

$$\frac{\delta E / 2E_k}{\rho / R} \sqrt{1 - (\rho / R)^2} k \hat{k}_\perp + \left( 1 + \frac{\delta E}{2E_k} \right) k \hat{k}_\parallel,$$

donde  $\hat{k}_\perp$  y  $\hat{k}_\parallel$  son versores de dirección normal y paralela al impulso incidente, respectivamente.

Dependiendo de que el potencial sea atractivo ( $Z < 0$ ) ó repulsivo ( $Z > 0$ ) las trayectorias se encontrarán, por conservación de la energía, fuera o dentro de una esfera centrada en el origen y de radio  $\sqrt{1 + \delta E / E_k} k$ .

En condiciones de flujo estacionario el impulso de los proyectiles depende sólo de la posición y entonces es posible calcular la densidad en el espacio de impulsos<sup>21</sup> obteniendo

$$N_{cl}(\vec{k}') = \frac{16m|Z|^3/k}{(E_k - E_{k'} + \delta E)^2} \cos \chi \times \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2 |\vec{k}(1 + \delta E / E_k) - \vec{k}'|^2} \Theta(Z(E_k - E_{k'} + \delta E)), \quad (6)$$

donde

$$\cos \chi = \frac{(\vec{k} - \vec{k}') \cdot (\vec{k} - \vec{k}' + (\delta E / E_k) \vec{k})}{|\vec{k} - \vec{k}'| |\vec{k} - \vec{k}' + (\delta E / E_k) \vec{k}|}.$$

Esta densidad de partículas representa el análogo clásico de la densidad de probabilidad cuántica en representación de impulso:

$$N_{QM}(\vec{k}') = (2\pi \hbar)^3 |\langle \vec{k}' | \Psi_{\vec{k}, \delta E}^{(+)} \rangle|^2,$$

Al comparar ambas expresiones observamos que, fuera del punto  $\vec{k}' = \vec{k}$ , ambas densidades

presentan la misma estructura. Advertimos, por ejemplo, la presencia de una contribución proporcional a  $|E_{k'} - (E_k + \delta E)|^{-2}$  representativa del operador de Green libre en la formulación cuántica. Clásicamente este término puede interpretarse como una consecuencia de que el proyectil converge asintóticamente a una trayectoria rectilínea de energía cinética  $E_{k'} = E_k + \delta E$ . Observamos además un pico de la forma  $|\vec{k} - \vec{k}'|^{-2}$  cuyo origen se encuentra en la condición inicial del proceso de colisión y una contribución adicional proporcional a  $|\vec{k}' - (1 + \delta E/E_k)\vec{k}|^{-2}$ . Para  $\delta E$  pequeño, el punto  $\vec{k}' = (1 + \delta E/E_k)\vec{k}$  se encuentra en una zona del espacio de impulso prohibida por conservación de la energía. Por lo tanto, esta contribución sólo puede diverger en el límite  $R \rightarrow \infty$  donde existen trayectorias con parámetro de impacto arbitrariamente grande cuyos impulsos permanecen en todo momento cercanos al valor inicial  $\vec{k}$ . En nuestro caso esta situación no ocurre ya que el parámetro de impacto está acotado por la condición  $\rho \leq R$ .

Finalmente observamos que la aparición de la función escalón se debe a que, por conservación de la energía, las partículas están restringidas a moverse fuera o dentro de la esfera  $k' = \sqrt{1 + \delta E/E_k} k$  dependiendo de que el potencial sea atractivo o repulsivo, respectivamente. Este resultado nos provee una interpretación del término  $S(E_k, E_{k'}, \delta E)$ . Al acercarse a la capa de energía  $E_{k'} = E_k + \delta E$  este término presenta un corte ramal caracterizado por el factor de anomalía  $g_+(E_k, E_{k'} - (E_k + \delta E))$  que en el límite clásico converge a la función escalón encontrada en la ecuación (6)

$$\frac{|g(E_k, E_{k'} - E_k - \delta E)|^2}{2\pi v_k} \xrightarrow{v_k \rightarrow \infty} \Theta(Z(E_k - E_{k'} + \delta E)).$$

De esta manera completamos la interpretación del estado off-shell del continuo en representación de impulso demostrando la relación que existe entre el método de regularización basado en mantener un corrimiento en el cálculo de la matriz de

transición y postergar el límite de tiempo infinito en la condición inicial.

## Referencias

- 1- J. R. Taylor, "Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions", Wiley, New York (1972).
- 2- Albert Messiah, "Mecánica Cuántica", tomo I, Ed. Tecnos, Madrid (1973).
- 3- Dz. Belyic, R. Gayet, A. Salin, Phys Rep. **56**, 279 (1979)
- 4- D. Mulherin, I. I. Zines, J. Math. Phys. **11**, 1402, (1970)
- 5- D. S. F. Crothers y L. J. Dubé, "Advances in atomic, molecular and optical physics", vol. 30, Academic Press, 287 (1993)
- 6- P. D. Fainstein, V. H. Ponce, R. D. Rivarola, J. Phys. B **24**, 3091 (1991)
- 7- J. H. Macek, Phys. Rev. A **37**, 2365. (1988)
- 8- J. Schwinger, J. Math. Phys. **5**, 1606. (1964)
- 9- M. J. Roberts, J. Phys. B **18**, L707, (1985)
- 10- H. van Haeringen, J. Math. Phys. **17**, 995 (1976)
- 11- K. Taulbjerg, Physica Scripta **42**, 205 (1990)
- 12- A. Salin, Comment At. Mol. Phys. **26**, 1 (1991)
- 13- J. H. Macek, Comment At. Mol. Phys. **27**, 177 (1992)
- 14- D. P. Dewangan, J. Eichler, Comment At. Mol. Phys. **27**, 317 (1992)
- 15- R. O. Barrachina y J. H. Macek, J. Math. Phys. **30**, 2581, (1989)
- 16- K. Taulbjerg, R. O. Barrachina, J. R. Macek, Phys. Rev. A **41**, 207 (1990)
- 17- M. N. Haack, Nuovo Cimento **9**, 731 (1958)
- 18- J. D. Dollard, J. Math. Phys. **5**, 729 (1964)
- 19- K. Dettmann, Z. Phys. **244**, 86 (1971)
- 20- J. H. Macek, S. Alston, Phys. Rev. A **26**, 250 (1982)
- 21- I. Samengo, R. G. Pregliasco, J. Fiol y R. O. Barrachina, comunicación presentada en esta conferencia.