

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ANALISIS DE DISTRIBUCIONES ANGULARES

A BAJA ENERGIA.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F I S I C O

PRESENTA: LUCIA L. MONROY BENITEZ



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE.

INTRODUCCION.

1

CAPITULO 1. Tratamiento Clásico de las Colisiones.

1.1 Generalidades. Descripción de un experimento con haces moleculares. Concepto de Secciones Total y Diferencial de dispersión en términos de parámetros medibles en el Laboratorio. 4

1.2 Teoría de Dispersión Clásica. 8

A) Dispersión Clásica. Expresión para el Parámetro de Impacto. Concepto de Sección Diferencial en términos de b y θ .

B) Relación entre los sistemas de Laboratorio y Centro de Masa, caso inelástico.

1.3 Función de Deflexión Clásica. 17

A) Significado y Descripción Cualitativa. Relación con el Potencial Intermolecular y con la Sección Diferencial de Dispersión.

B) Expresión Analítica de θ . Caso elástico e inelástico.

1.4 Potencial Intermolecular. 23

A) Descripción General.

B) Modelos. Potencial de Rittner. Potencial de Morse. Potenciales Ab Initio.

CAPITULO 2. Modelo de Gillen y Hickman.

2.1 Descripción del Modelo. Sistemas estudiados. 31

2.2 Aplicación.	34
A) Cálculos. Obtención de la expresión para las ramas Covalente y Iónica de χ . Expresión Analítica para la Sección Diferencial de Dispersión. Determinación de puntos críticos.	
B) Programas.	
2.3 Resultados. Sistema Na + I. Sistema H(ls) + Cs. Sistema H+ + Mg.	45
2.4 Conclusiones.	50
TABLA I.	52
TABLA II.	53
APENDICE I. Analogía entre el efecto de Arco Iris óptico y el observado en experimentos de Dispersión de partículas atómicas.	54
APENDICE II. Programas.	58
Programa 1.	
Programa 2.	
APENDICE III. Gráficas.	63
Gráficas para el sistema Na + I.	
Gráficas para el sistema H(ls) + Cs.	
Gráficas para el sistema H+ + Mg.	
BIBLIOGRAFIA.	85

INTRODUCCION [1],[11],[14],[16] y [18].

Dentro del vasto campo de la Física, uno de los procesos que ha tenido mayor trascendencia ha sido el de colisión. No sólo es importante en las mecánicas clásica y estadística, -donde ayuda a establecer diversos conceptos fundamentales como el de masa, fuerza, temperatura, presión, etc. - sino también en las ramas de acústica, óptica, física atómico-molecular, física nuclear y física de altas energías, donde constituye la base de variados modelos que explican tanto fenómenos a nivel macroscópico como microscópico. En estas tres últimas ramas la importancia de las colisiones resalta aún más, ya que estas no se limitan a intervenir únicamente en la teoría, sino que además lo hacen en el aspecto experimental, en la forma de herramienta fundamental para el sondeo fino de los potenciales con que interactúan los distintos sistemas de partículas, lo cual, constituye un paso intermedio para alcanzar uno de los objetivos centrales en esta parte de la ciencia: la determinación de la naturaleza de las interacciones entre partículas.

Para apreciar en toda la extensión el valor que tienen las colisiones como herramienta experimental, conviene hacer un breve bosquejo evolutivo tanto de las bases teóricas desarrolladas, -que en conjunto forman la teoría de dispersión- como de las técnicas experimentales empleadas en la investigación de las interacciones y estructura de las partículas.

Esencialmente se distinguen tres etapas: la primera comprende desde finales del siglo XIX hasta comienzos de la década de los treinta y en ella se establecen los resultados que conforman la teoría de dispersión clásica. En el terreno experimental, se utilizan técnicas de exploración basadas en la teoría cinética de los gases, tales como el análisis de las variaciones con la temperatura de la ecuación del gas ideal y de los coeficientes de transporte, además de que se introducen exitosamente las primeras técnicas colisionales con haces moleculares (molecular beam techniques) [1].

Durante este período, se ve nacer a la mecánica ondulatoria (1926) y junto con ella, una serie de resultados que más tarde (1933) dan origen a los primeros cálculos cuánticos de la teoría de dispersión.

Desafortunadamente en 1933 finaliza abruptamente esta prolifera etapa, pues, -por razones políticas- se suspenden los trabajos con haces moleculares en Alemania, hasta entonces centro de la investigación en partículas atómicas y elementales, causando con esto un estancamiento experimental en todo el ámbito del que no hubo recuperación total sino hasta varios años después de terminada la Segunda Guerra Mundial.

No obstante, en estos veinte años de "intermedio", la investigación en física atómica y molecular, esencialmente teórica, continúa su desarrollo apoyándose principalmente en los datos proporcionados por los experimentos de resonancia y por las técnicas cinéticas ya antes mencionadas. Sin embargo el proceso se lleva a cabo con lentitud, debido a que la información provista por dichos métodos (potencial atractivo y repulsivo a grandes y pequeñas, distancias, respectivamente) es más cualitativa que cuantitativa, lo cual no permite una determinación del potencial de manera única y por lo tanto impide una verificación detallada de los nuevos resultados teóricos, sin la cual, no es posible definir claramente la trayectoria de investigación a seguir. Este hecho fue el que creó la necesidad de cambiar esas técnicas macroscópicas, por experimentos que incursionaran más directamente en la naturaleza microscópica de los potenciales. No fue sino hasta 1955 -después de varias revisiones a los métodos disponibles- que se llegó a la conclusión de que las técnicas colisionales eran las más sensibles y por lo tanto las más apropiadas para este tipo de sondeos.

Con todos los nuevos avances técnicos desarrollados durante y posteriormente a la guerra, además del advenimiento de las computadoras, el éxito de estas técnicas no se hizo esperar. No sólo se acabó con el estancamiento experimental en que se encontraban las físicas atómico-molecular y de altas energías, sino que además se abrió una tercera etapa en la que, hasta la fecha, se ha dado gran impulso a la teoría de dispersión y al empleo de las colisiones como una herramienta fundamental para el análisis tanto de la estructura de las partículas como de sus interacciones.

En este trabajo emplearemos a las colisiones en el estudio de procesos de quemí-ionización, conocidos más comúnmente como procesos de formación de pares iónicos o de intercambio de carga, y en procesos de captura doble. De todos éstos nos interesan en especial aquellos casos en los que la sección diferencial presenta distintos máximos, asociados al hecho de que este tipo de sistemas evoluciona siguiendo curvas de potencial covalente o iónico. Nosotros analizaremos en particular los máximos covalente y secundario utilizando el modelo presentado por Gillen y Hickman [23], en el cual se propone un potencial coulombiano atractivo para la interacción iónica ($A^+ + B^-$) y un potencial constante para la interacción covalente o neutra ($A + B$). En el caso de la captura doble, esto es posible por el hecho de que -en los sistemas tratados- los potenciales covalentes son muy planos en la región de nuestro interés.

Debido a la sencillez del modelo, no es posible predecir la estructura de arco-iris que se observa en algunos de los sistemas analizados, tema que discutiremos en el capítulo correspondiente; sin embargo, tanto la aparición como aproximadamente la localización de los máximos de interés es

reproducida por este modelo, que por este hecho nos permite explicar -hasta cierto punto- el origen de esos rasgos tan peculiares de la sección diferencial.

CAPITULO 1

TRATAMIENTO CLASICO DE LAS COLISIONES.

1.1 GENERALIDADES [1],[2],[4],[14] y [15].

Hasta el momento sólo hemos mencionado la importancia del uso de las colisiones y su aplicación en nuestro trabajo. Es conveniente dar ahora una descripción general de los rasgos más comunes y fundamentales de las técnicas colisionales que se emplearon para la obtención de los datos experimentales, así como de los parámetros susceptibles de medición involucrados en ellas. Básicamente la técnica consiste de tres partes:

- 1) Formación de los haces proyectil y blanco.
- 2) Interacción entre estos dos haces.
- 3) Detección de los productos de dicha interacción.

Para la formación del haz de proyectiles es necesario, primero, producirlo mediante una fuente (por ejemplo, un Colutrón); segundo, colimarlo ya sea por medio de rendijas o de una lente de Einzel; tercero, acelerarlo a la energía deseada por medio de una diferencia de potencial y por último, depurarlo por medio de un campo eléctrico transversal, ya que usualmente la fuente emite varios tipos de productos. Es muy importante que la densidad de este haz sea baja, ya que de este modo podremos considerar a los proyectiles independientes entre sí, suposición que será fundamental en el momento en que deduzcamos la expresión para la sección de dispersión.

Afortunadamente en los tres sistemas estudiados (Na^+I , $\text{H}(\text{ls})+\text{Cs}$ y $\text{H}^+ + \text{Mg}$) el blanco se encuentra en reposo con respecto al laboratorio, lo cual facilita tanto la descripción teórica, -cosa que veremos un poco más adelante- como su implementación, ya que en lugar de hacer algo semejante al haz de proyectiles, simplemente se emplea una celda (la celda de dispersión) llena con el gas cuyos átomos servirán de blanco.

La segunda parte de esta "técnica común", se lleva a cabo cuando se hace incidir el haz de proyectiles en el gas "blanco". Debido a las colisiones que se producen entre los átomos de éste y las partículas de bombardeo, estas últimas son dispersadas en diferentes direcciones que dependen tanto de la energía y parámetro de impacto de los proyectiles, como de las fuerzas entre éstos y el blanco.

Aquí pueden presentarse varios tipos de situaciones: que las colisiones sean elásticas ($A + B \rightarrow A + B$), en cuyo caso no cambian ni el estado interno de energía ni la composición

de las partículas participantes, -es decir, el proyectil sólo se deflecta- ; que sean inelásticas ($A + B \rightarrow A' + B'$), o sea, que cambie el estado interno de energía, -en nuestro caso, que aparte de ser deflectadas intercambien carga- y por último, que sean reactivas ($A + B \rightarrow C + D$), en cuyo caso las partículas cambian su composición.

Para cada dirección los productos de estos tres tipos de procesos salen "mezclados". Como generalmente lo que se desea obtener es la distribución angular de alguno de estos productos (a veces de todos), es necesario entonces, antes de realizar la detección, hacer una separación entre ellos, por ejemplo, por medio de campos eléctricos transversales ([2] y [4]).

El registro de estas partículas dispersadas, que es la última etapa de la técnica, se lleva a cabo por medio de detectores adecuados colocados en una zona -que recibe el nombre de región asintótica- bastante alejada del lugar donde se llevan a cabo las interacciones. Con frecuencia, a partir de las propiedades del registro se pueden inferir algunas de las características de las partículas detectadas, tales como masa, carga, impulso, energía, etc.; pero el dato más fértil con que nos provee la detección, es dicha distribución angular de las partículas dispersadas, que permite calcular la sección diferencial de dispersión ($d\sigma/d\omega$), muy importante en el momento de comparar los resultados experimentales con los obtenidos por medio de cálculos teóricos.

El concepto de sección diferencial de dispersión surge a partir del de sección total de dispersión (collision cross section, total scattering cross section), que no es otra cosa más que una medida del "tamaño" relativo de las partículas interactuantes, en otras palabras, es una medida de qué tan "grande" ve el proyectil al blanco o viceversa. La expresión analítica para ella se obtiene a partir del hecho de que la probabilidad que tiene un proyectil de sufrir una colisión en el intervalo $[x, x+\Delta x]$ (o sea, $\Delta x/\lambda$; estamos suponiendo que el haz se mueve en la dirección x), debe ser proporcional al número de partículas que hay en el blanco, es decir:

$$\Delta x / \lambda \propto n_b \Delta V = n_b \Delta x$$

donde:

λ = camino libre medio del proyectil

n_b = densidad de partículas en el blanco.

= número de blancos por unidad de volumen.

$\Delta V = \Delta x \cdot 1 \cdot 1$ (suponemos que el haz atraviesa superficies unitarias perpendiculares a su movimiento a lo largo del gas blanco).

La sección total se define entonces como la constante de proporcionalidad en esta relación, con lo que se obtiene:

$$\Delta x / \lambda = \sigma n_b \Delta x \quad ==> \quad \sigma = (\lambda n_b)^{-1} \quad \dots (I)$$

Para obtener la sección diferencial ($d\sigma / d\omega$), -que se define como el producto de σ por la distribución angular (normalizada) de las partículas dispersadas $P(\theta, \phi)$ - es necesario obtener primero, la expresión para el número de partículas dispersadas en una dirección determinada (θ, ϕ) , por unidad de tiempo a través de un elemento de ángulo sólido $d\omega$, ($d\dot{N}(\theta, \phi) / d\omega$), ya que como puede observarse del siguiente esquema:

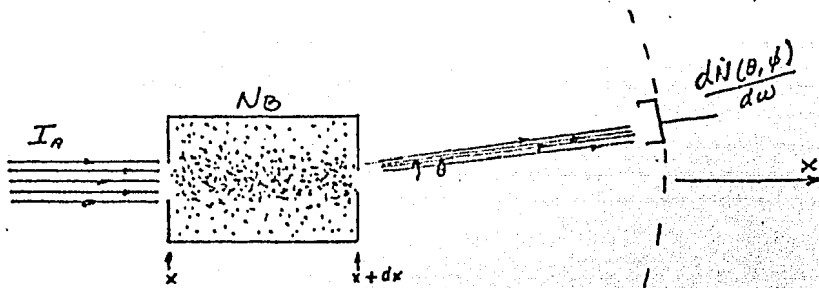


fig.1

Esquema de un experimento de dispersión con haces moleculares.

$d\dot{N}(\theta, \phi) / d\omega$ dependerá fuertemente del flujo de proyectiles (I_a), del número total de átomos blanco (N_b) y del "área" que presentan los proyectiles -en la dirección θ - al colisionar con el blanco, la cual es precisamente la tan buscada sección diferencial.

Primeramente: $d\dot{N}(\theta, \phi) / d\omega = \dot{N} P(\theta, \phi)$ donde:

\dot{N} = número total de proyectiles dispersados en todas las direcciones por unidad de tiempo = número total de colisiones en todas las direcciones por unidad de tiempo.

Nota. Estamos suponiendo que cada proyectil sólo colisiona una vez.

$$\text{Por otro lado: } \dot{N} = \{ [I_a'(x) - I_a(x + \Delta x)] / \Delta x \} \Delta V = n_a \omega \Delta V = \Delta V n_a \frac{n_b}{n_b} \frac{v}{\lambda} = n_a n_b \sigma v \Delta V = I_a N_b \sigma$$

con:

- n_a = # de proyectiles por unidad de volumen.
- ω = frecuencia de col. = # de colisiones que sufre una partícula por unidad de tiempo.
- $I_a = n_a v$
- $N_b = n_b \Delta V$
- v = velocidad de los proyectiles.

$$\text{Por lo tanto: } dN(\theta, \phi) / d\omega = I_a N_b \sigma P(\theta, \phi) \quad ==>$$

$$I(\theta) = d\sigma / d\omega = dN(\theta, \phi) / d\omega I_a N_b \quad \dots \text{ (II)}$$

donde:

$$I(\theta) = \sigma P(\theta, \phi)$$

Hemos obtenido entonces una expresión que relaciona a la sección diferencial con parámetros directamente medibles en el laboratorio. Pero concretamente: ¿para qué nos sirve esta expresión en nuestro sondeo del potencial?

Como habíamos mencionado en un párrafo anterior, por medio de ella nos es posible comparar los datos experimentales con los datos provenientes de modelos teóricos. Generalmente estos modelos comienzan presuponiendo una forma determinada para el potencial de interacción y a través de ella calculan la función de deflexión, -ésto lo veremos dos secciones más adelante- que a su vez permite calcular la sección diferencial, correspondiente a dicho potencial. En la mayoría de los casos, una vez que se han establecido las diferencias y similitudes de ésta con la experimental, se procede a modificar convenientemente al potencial y la secuencia que hemos descrito se vuelve iterativa. De este modo se va encontrando una expresión analítica para el potencial que describe cada vez mejor los resultados experimentales.

El caso de nuestro trabajo es un poco distinto. Aquí no hay modificación ni secuencia iterativa, simplemente nos concretamos a analizar cuáles de las características de $I(\theta)$ observadas experimentalmente se pueden reproducir con el potencial propuesto; es decir, nos limitamos a tratar de encontrar la parte del potencial que es la causante de los procesos que dan lugar a dichas estructuras.

1.2 TEORIA DE DISPERSION CLASICA.

A) DISPERSION CLASICA [9],[14] y [16].

Aunque el tratamiento exacto de las colisiones atómicas debe hacerse a través de métodos cuánticos, la mecánica clásica ofrece por lo general una buena aproximación a éste, especialmente a la hora de estimar el comportamiento general de la sección de dispersión. Como precisamente éste es nuestro caso, vamos a desarrollar en esta sección las herramientas clásicas que nos servirán en la aplicación del modelo coulombiano (Gillen).

En primer lugar, vamos a deducir otra expresión para $I(\theta)$ que nos "conectará" con la función de deflexión $\chi(b)$. Para esto analizaremos con cierto detalle lo que sucede en el momento de la colisión.

Primeramente tenemos que aclarar que lo que ocurre entre los proyectiles del haz incidente y los átomos del blanco no son colisiones en el sentido estricto de la palabra. Esto se debe a que las partículas no tienen una "estructura rígida" como la tienen, por ejemplo, las bolas de billar, -a las cuales corresponde una fuerza de interacción infinita y repulsiva- sino que interaccionan a través de fuerzas más complicadas que combinan efectos de atracción y repulsión de diferentes intensidades, que dan como resultado trayectorias hiperbólicas como las que se muestran en la figura 2.

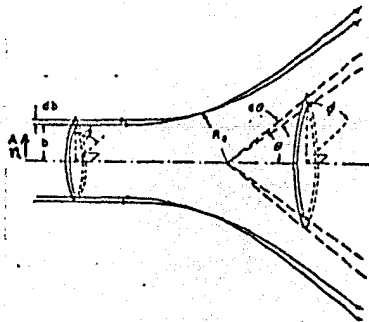


fig.2

Representación esquemática de las trayectorias de las partículas con parámetros de impacto entre b y $b+db$.

La forma de estas hiperbólicas depende fuertemente de la energía inicial de los proyectiles (E), de su momento angular (L) y de μ que es la masa reducida del sistema proyectil-blanco. Una forma de condensar todas estas dependencias en una sola, se obtiene utilizando el parámetro de impacto (b), que se define como la distancia perpendicular entre el centro dispersor (en un párrafo

posterior vamos a explicar el porqué de este centro y de la μ) y la trayectoria rectilínea inicial del proyectil, o lo que es lo mismo, entre dicho centro y la dirección de la velocidad inicial. Ya que:

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{p} = \vec{R} \times \mu \vec{v}$$

donde:

\vec{v} = vel. inicial de los proyectiles.

eso implica que: $\vec{L} = \mu \vec{v} \times \vec{b}$, con $\vec{b} = b\hat{n}$, y por lo tanto:

$$b = L/\mu v, \quad \text{y como:} \quad E = \frac{1}{2}\mu v^2 \implies b = L/\sqrt{2\mu E}.$$

Para un valor dado de E y de b, la trayectoria hiperbólica queda completamente determinada. Como nuestro objetivo es encontrar una expresión para $I(\theta)$ explícitamente en términos de θ , vamos a considerar un conjunto de proyectiles, todos con energía inicial fija (E), con parámetros de impacto que fluctúen dentro del intervalo $[b, b+db]$ y cuyas deflexiones se encuentren en el intervalo $[\theta, \theta+d\theta]$ (ver fig.2).

Ya habíamos visto en la sección anterior que el número de partículas deflectadas en una dirección determinada (θ, ϕ) por unidad de tiempo, a través del ángulo sólido $d\omega$ es proporcional a $I(\theta)$ (ver ec.II), por lo que:

$$dN(\theta, \phi) \propto I(\theta) d\omega I_a$$

lo cual representa el número de partículas dispersadas en la dirección θ por unidad de tiempo (vamos a suponer que el potencial que causa las deflexiones tiene simetría esférica, es decir, tenemos la misma situación en cualquier dirección ϕ y por lo tanto ϕ adquiere todos los valores entre 0 y 2π).

Por otra parte, σ es el cociente del número de partículas dispersadas en todas las direcciones por unidad de tiempo entre la densidad del flujo incidente; entonces la contribución $d\sigma$ que hacen las partículas con parámetros entre b y $b+db$ a la sección total (que se interpreta como el área efectiva del haz perpendicular a su movimiento) es igual al área del anillo de radio b y ancho db ($2\pi b db$), ya que el producto de la densidad del flujo incidente (I_a) por el área de ese anillo, nos da el número de partículas por unidad de tiempo con esos parámetros, que son precisamente las partículas que van a salir deflectadas entre las direcciones θ y $\theta+d\theta$ y a esa cantidad sólo hace falta dividirla entre I_a para que nos de $d\sigma$, entonces:

$$d\sigma = I_a 2\pi b db / I_a = 2\pi b db,$$

Por lo tanto:

$$d\sigma = 2\pi b db = I(\theta) d\omega = I(\theta) 2\pi \sin\theta d\theta,$$

ya que de la fig. 2 puede verse también que:

$$dA = R^2 d\omega$$

$$d\omega = \text{área del anillo por donde salen deflectadas las partículas} / R^2$$

$$= 2\pi R \Lambda / R^2 = 2\pi R \sin\theta R d\theta / R^2 = 2\pi \sin\theta d\theta$$

con : R = radio del anillo, Λ = ancho del anillo

De donde:

$$I(\theta) = b db / \sin\theta d\theta = b / \sin\theta (d\theta/db) \quad \dots(\text{III})$$

Sin embargo, hay veces en que el potencial es tal, que para valores distintos del parámetro de impacto, las partículas salen deflectadas en la misma dirección. Ya que cada una de estas partículas está contribuyendo a la "intensidad de dispersión en la dirección θ ", $I(\theta)$, debemos incluirlas en su expresión. Como esta "intensidad" obedece la superposición, tenemos entonces que:

$$I(\theta) = \sum_{i=1}^n b_i / \sin\theta (d\theta/db_i)$$

B) RELACION ENTRE LOS SISTEMAS DE LABORATORIO Y CENTRO DE MASA [2], [8], [9], [10], [11], [12], [13] y [14].

Es conveniente aclarar en este momento que todos estos cálculos están referidos a un sistema muy especial -el del centro de masa- y que por eso hacemos mención de una masa reducida y de un centro dispersor.

El objeto de utilizar dicho sistema es simplemente hacer la descripción del proceso más sencilla, por un lado porque esta descripción queda en términos de la distancia relativa entre las partículas participantes -de la cual depende el potencial de interacción-, por otra parte, porque dentro de esta descripción el centro de masa se encuentra en reposo, lo que implica que su movimiento nos es irrelevante, y por último porque el problema en términos de dos partículas se reduce al de una sola partícula (de masa μ) sujeta a la influencia de un centro dispersor.

Sin embargo, como hemos estado mencionando, la comparación entre las secciones teóricas (referidas al CM) y

experimentales (referidas al LAB) es un punto crucial para la determinación del tipo de interacción entre las partículas analizadas y para ello necesitamos que ambas secciones estén referidas al mismo sistema. Lo que haremos a continuación, es deducir expresiones que nos relacionen a algunos parámetros en el sistema del centro de masa con sus correspondientes en el sistema de laboratorio; de este modo, estaremos en posibilidad de cambiar a $I(\theta)$ de un sistema a otro con mayor facilidad.

Como la sección diferencial es una función que depende fuertemente del parámetro θ , es de sospecharse que a través de éste encontremos nuestra solución.

Antes que nada, debemos recordar que en este trabajo vamos a tratar con colisiones inelásticas y por lo tanto haremos las deducciones mencionadas para este caso, que se traduce simplemente -en el lenguaje de las energías- como las colisiones donde hay transformación de una cierta cantidad de energía cinética (ΔE) a energía interna de alguna o ambas partículas interactuantes, es decir:

$$E_{\tau}^{\dagger} = E_{\tau} - \Delta E \quad \text{donde: } E_{\tau}^{\dagger} = \text{energía total del sistema después de la colisión.}$$

$$E_{\tau} = \text{energía total del sistema antes de la colisión.}$$

$$\Delta E = \text{energía perdida durante la colisión.}$$

Para hacer nuestro tratamiento más sencillo, vamos a suponer que sólo tenemos dos partículas con masas M_1 y M_2 y velocidades iniciales \vec{u}_1 y \vec{u}_2 (resp. al LAB), interactuando por medio de una fuerza $F(\vec{r})$. Sus ecuaciones de movimiento están dadas entonces por:

$$M_1 \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = F(\vec{r})$$

$$M_2 \frac{d^2 \vec{r}_2}{dt^2} = -F(\vec{r})$$

Combinando adecuadamente estas dos ecuaciones, obtenemos que:

$$\frac{d^2}{dt^2} \{ M_1 \vec{r}_1 + M_2 \vec{r}_2 \} = 0$$

$$\frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = F(\vec{r})$$

$$\frac{1}{2} M_1 \left(\frac{d\vec{r}_1}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} M_2 \left(\frac{d\vec{r}_2}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} (M_1 + M_2) \left(\frac{d\vec{R}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 \quad , \quad y$$

Si observamos con cuidado estas tres expresiones, podremos darnos cuenta de que ellas dependen de dos parámetros muy peculiares: uno de ellos, $\vec{R} = \{ M_1 \vec{r}_1 + M_2 \vec{r}_2 \} / M_1 + M_2$ representa la coordenada r del centro de masa de este sistema de partículas, el otro $\vec{r} = (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$, representa la coordenada r de su posición relativa. La primera de las ecuaciones nos dice que el movimiento del centro de masa permanece inalterado durante la interacción de las partículas; la segunda, nos dice que el movimiento de la posición relativa se comporta de manera análoga al de una partícula de masa $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ sujeta a una fuerza $F(\vec{r})$ y la tercera, -que no es otra cosa más que la energía total del sistema- nos expresa la independencia que hay entre los movimientos del centro de masa y de la posición relativa.

Debido a la "separación" entre esos dos movimientos y al hecho de que la velocidad del centro de masa permanece inalterada durante toda la colisión, cualquier cambio que surja en la energía cinética total del sistema se deberá a un cambio en la energía asociada a las coordenadas relativas, es decir, a un cambio en la magnitud de la velocidad relativa:

$$\underbrace{\frac{1}{2} (M_1 + M_2) \left(\frac{d\vec{R}_{\text{center}}}{dt} \right)^2}_{\text{Energía antes de la colisión}} + \underbrace{\frac{1}{2} \mu \left(\frac{d\vec{r}_{\text{relati}}}{dt} \right)^2}_{\text{Energía después de la colisión}} - \Delta E = \frac{1}{2} (M_1 + M_2) \left(\frac{d\vec{R}_{\text{center}}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{d\vec{r}_{\text{relati}}}{dt} \right)^2 \dots (V)$$

Energía antes de
la colisión

Energía después de
la colisión

donde:

$$\frac{d\vec{r}_{\text{relati}}}{dt} = \vec{u} = \text{vel. relativa antes de la colisión.}$$

$$\frac{d\vec{r}_{\text{relati}}}{dt} = \vec{v} = \text{vel. relativa después de la colisión.}$$

Si ahora llamamos \vec{v}_1 y \vec{v}_2 a las velocidades de nuestras partículas después de la colisión y si además suponemos que una de ellas (digamos la primera) está en reposo respecto al laboratorio (a la que ya hemos mencionado anteriormente como el blanco), tendremos que el ángulo (θ) con que se deflektan los proyectiles en el sistema del laboratorio estará dado por:

$$\tan \theta_L = v_{1y} / v_{1x}$$

ya que por definición, θ es el ángulo comprendido entre la dirección de la velocidad final del proyectil y la dirección de su velocidad inicial (ver fig. 3).

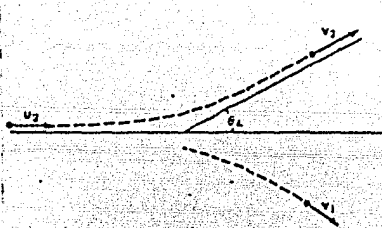


fig.3

Representación de la dispersión en el sistema de Laboratorio.

Nuestro objetivo ahora, es tratar de relacionar a v_{1y} y a v_{1x} con sus correspondientes en el sistema CM.

Como puede observarse de la figura 4:

$$\vec{r}'_1 = \vec{r}_1 - \vec{R} = -\frac{M_2}{M_1+M_2} \vec{r} \quad \text{y}$$

$$\vec{r}'_2 = \vec{r}_2 - \vec{R} = \frac{M_1}{M_1+M_2} \vec{r}$$

lo cual implica que:

$$\left. \begin{aligned} \vec{v}'_1 &= \vec{v}_1 - \vec{V} = \vec{v}_1 - \vec{V} \\ \vec{u}'_1 &= \vec{u}_1 - \vec{V} \end{aligned} \right\} \dots (a)$$

para $i = 1, 2$.

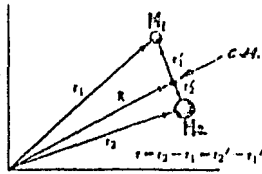


fig.4

Representación gráfica de la relación entre los vectores de posición respecto al CM (primados) y los referidos al sistema de Laboratorio.

Como: $\vec{R} = M_1 \vec{r}_1 + M_2 \vec{r}_2 / M_1 + M_2 \Rightarrow \vec{V} = M_1 \vec{u}_1 + M_2 \vec{u}_2 / M_1 + M_2$

pero como $\vec{u}_1 = 0$ y además vamos a suponer que $\vec{u}_2 = u_2 \hat{i}$, entonces:

$\vec{V} = M_2 \vec{u}_2 / M_1 + M_2$, lo que implica:

$$V_x = M_2 u_2 / (M_1 + M_2) \quad \text{y} \quad V_y = 0 \quad \dots (b)$$

De las ecuaciones (a), obtenemos que:

$$\vec{u}_2' = \vec{u}_2 - \vec{V} = M_1 \vec{u}_2 / (M_1 + M_2) \Rightarrow \vec{u}_2 = (M_1 + M_2) \vec{u}_2' / M_1$$

con lo que: $V_x = M_2 u_2' / M_1 \quad \dots (c)$

De (a) y (b) resulta que:

$$\tan \theta_L = \frac{v_{2y}}{v_{2x}} = \frac{v_{2y}' + V_y}{v_{2x}' + V_x} = \frac{v_{2y}'}{v_{2x}' + V_x}$$

Observando ahora la figura 5, encontramos que:

$$\sin \theta' = v_{1y}' / v_1'$$

$$\cos \theta' = v_{1x}' / v_1'$$

de lo cual, junto con (c) obtenemos:

$$\tan \theta_L = \frac{v_2' \sin \theta'}{v_2' \cos \theta' + M_2 u_2' / M_1}$$

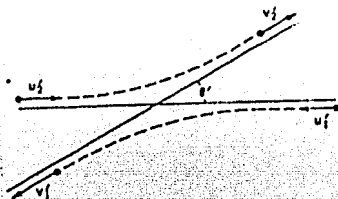


fig.5
Representación de la dispersión en el sistema de Centro de Masa.

Aplicando el hecho de que la colisión es inelástica, es decir, la ecuación (V), tenemos:

$$\frac{1}{2} \mu \left(\frac{d\vec{r}_{\text{centro}}}{dt} \right)^2 - \Delta E = \frac{1}{2} \mu \left(\frac{d\vec{r}_{\text{dispersi}}}{dt} \right)^2$$

Como: $\vec{r} = (M_1 + M_2) \vec{r}' / M_1$, tenemos entonces que:

$$\frac{1}{2} \mu \left(\frac{M_1 M_2}{M_1} \right)^2 \left(\frac{d\vec{r}'_{\text{centro}}}{dt} \right)^2 - \Delta E = \frac{1}{2} \mu \left(\frac{M_1 + M_2}{M_1} \right)^2 \left(\frac{d\vec{r}'_{\text{dispersi}}}{dt} \right)^2 \implies$$

$$\frac{1}{2} \frac{M_2}{M_1} (M_1 + M_2) (u_2')^2 - \Delta E = \frac{1}{2} \frac{M_2}{M_1} (M_1 + M_2) (v_2')^2$$

Nota. Los primados son parámetros referidos al CM.

Despejando de aquí a v_2' en términos de u_2' :

$$\left(\frac{v_2'}{u_2'} \right)^2 = \frac{\frac{1}{2} \frac{M_2}{M_1} \mu (v_2')^2}{\frac{1}{2} \frac{M_2}{M_1} \mu (u_2')^2} = \frac{\frac{1}{2} \frac{M_2}{M_1} \mu (u_2')^2 - \Delta E}{\frac{1}{2} \frac{M_2}{M_1} \mu (u_2')^2} = \frac{E_{i,CM} - \Delta E}{E_{i,CM}}$$

$$\implies v_2' = u_2' \left(\frac{E_{i,CM} - \Delta E}{E_{i,CM}} \right)^{1/2} = u_2' \left(1 - \frac{\Delta E}{E_{i,CM}} \right)^{1/2}$$

donde:

$E_{i,CM}$ = Energía cinética inicial resp. al CM.
 $= E_{LAB} (M_1 / M_1 + M_2)$
 $= \frac{1}{2} M_2 u_1^2 (M_1 / M_1 + M_2)$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} \tan \theta_L &= \frac{u_1' \left(1 - \frac{\Delta E}{E_{i,cm}}\right)^{1/2} \sin \theta'}{u_2' \left(1 - \frac{\Delta E}{E_{i,cm}}\right)^{1/2} \cos \theta' + \frac{M_2}{M_1} u_2'} \\ &= \frac{\sin \theta'}{\cos \theta' + \frac{M_2}{M_1} \left(\frac{E_{i,cm}}{E_{i,cm} - \Delta E}\right)^{1/2}} \\ &= \frac{\sin \theta_{cm}}{\cos \theta_{cm} + \gamma'} \quad \dots (VI) \end{aligned}$$

De esta última expresión es fácil ver que $\gamma' = (M_2/M_1) (1 - \Delta E/E_{i,cm})^{-1/2}$ se aproxima a cero cuando la masa del proyectil (M_2) es mucho menor que la del blanco, lo que nos lleva a la conclusión de que, para este caso:

$$\tan \theta_{LAB} \sim \tan \theta_{cm} \Rightarrow \theta_{LAB} \sim \theta_{cm}$$

Este es un resultado muy atractivo, puesto que resulta innecesario realizar la transformación de un sistema a otro; sobre todo para nosotros, ya que las masas de nuestros tres sistemas - Na + I, H(1s) + Cs y H+ + Hg - se encuentran en proporciones aproximadas (M_2/M_1) de: 23/127, 1/133 y 1/24 respectivamente. Intuitivamente, el resultado era de esperarse, ya que con un blanco tan masivo, la posición del centro de masa del sistema se encuentra más cercana a éste, prácticamente confundándose con él.

Para concluir con esta sección, vamos a emplear la ecuación (VI) y el hecho de que -por conservación de masa- la "intensidad" de dispersión debe ser la misma en ambos sistemas, es decir:

$$I(\theta)_{LAB} d\omega_{LAB} = I(\theta)_{cm} d\omega_{cm}$$

lo cual implica:

$$I(\theta)_{LAB} = I(\theta)_{cm} d\omega_{cm}/d\omega_{LAB} = I(\theta)_{cm} \sin \theta_{cm} d\theta_{cm} / \sin \theta_{LAB} d\theta_{LAB} \dots (VII),$$

nuevamente facilitando en nuestro caso los cálculos, ya que:

$$I(\theta)_{LAB} \sim I(\theta)_{cm}$$

1.3 FUNCION DE DEFLEXION CLASICA.

A) SIGNIFICADO Y DESCRIPCION CUALITATIVA [12],[14] y [16].

La función de deflexión $\chi = \chi(b)$ no sólo es importante porque establece un puente entre la sección diferencial y el potencial dispersor que la causa, sino también, porque refleja muchos de los rasgos de ese potencial.

Su significado es muy simple: se reduce a decirnos que la desviación que sufre una partícula en su trayectoria, depende de su energía, momento angular, masa y desde luego, del tipo de interacción a que ésta es sometida.

En general, para un potencial intermolecular típico como el que se muestra en la figura 6a, la función de deflexión adquiere la forma presentada en la figura 6b.

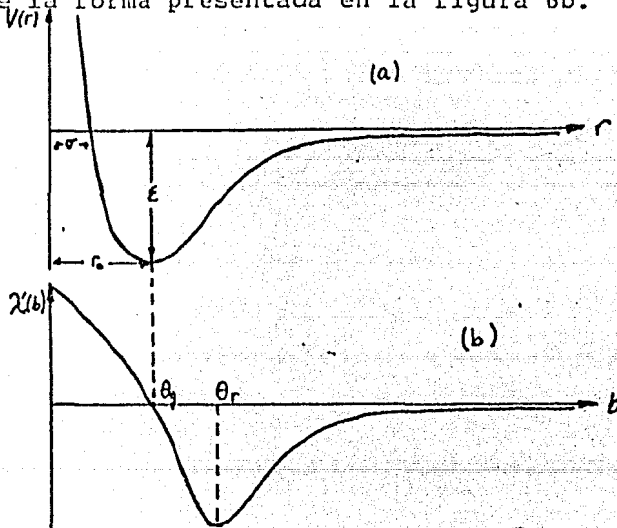


fig.6

Representación gráfica de un potencial intermolecular típico (a) y de la función de deflexión $\chi(b)$ correspondiente (b). θ_g y θ_r representan, respectivamente, los ángulos de "gloria" y de "arco iris".

Claramente podemos distinguir en ella varios detalles de importancia: una rama, positiva y otra negativa correspondientes a la acción de una repulsión y de una atracción netas, respectivamente; un mínimo (θ_r) llamado ángulo de "arco iris", que corresponde a la máxima deflexión negativa y que es resultado del comienzo de la acción de la repulsión, y un cero (θ_g) llamado ángulo de "gloria", cuyo origen se debe al equilibrio de las fuerzas de atracción y repulsión.

Para hacer todo ésto un poco más intuitivo, vamos a pensar en términos del parámetro de impacto y de su relación con la energía inicial de las partículas. Recordemos que : $b = L/\sqrt{2\mu E}$, lo que nos dice entonces que (manteniendo L y μ fijas) partículas con b 's pequeñas son altamente energéticas y por lo tanto, se "internan" más profundamente en el potencial de interacción, ignorando su parte atractiva e interactuando exclusivamente con la repulsiva, lo que da como resultado que las partículas sean deflectadas "hacia atrás" (backward scattering), es decir, con ángulos positivos (ver fig. 7).

En el caso de b 's grandes, la energía es baja y las partículas no pueden "pasar más allá" de la parte atractiva del potencial, deflectándose "hacia adelante" (forward scattering), con ángulos negativos (ver fig. 7).

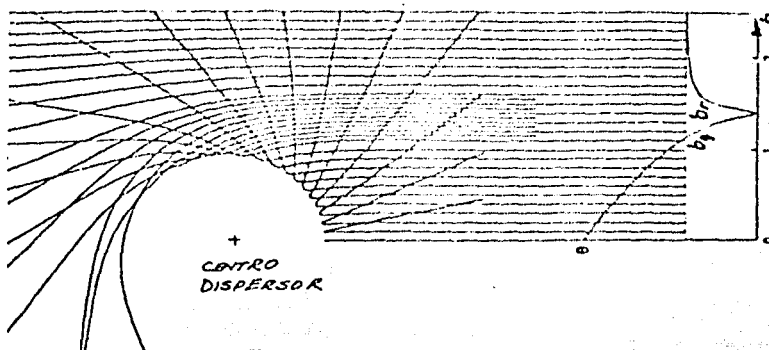


fig.7

Gráfica de las trayectorias clásicas que produce un centro dispersor para distintos valores del parámetro de impacto. A la derecha se muestra la gráfica de la función de deflexión correspondiente.

Obviamente se obtiene cierta información sobre el pozo de potencial -existencia, ancho y profundidad- a partir de los ángulos de arco iris y de gloria, ya que, para esta última, la fuerza de interacción es nula y como a su vez, $F(\vec{r}) = -\nabla V(\vec{r})$, eso implica que tendremos el valor de r donde la derivada del potencial es nula, es decir, donde el potencial es un mínimo.

Con objeto de explicar la relación cualitativa entre la función de deflexión y la sección diferencial (o mejor dicho, entre el ángulo de deflexión observable y la sección diferencial medible), es necesario comparar las siguientes gráficas:

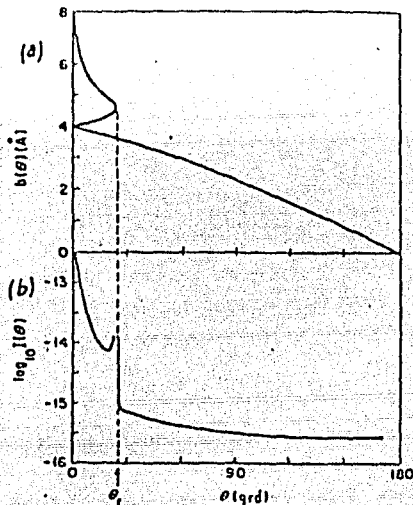


fig.8

Relación gráfica entre la función de deflexión (a) y la sección diferencial (b). Nótese el efecto de arco iris en $\theta = \theta_r$.

De ellas podemos ver fácilmente que la contribución a la dispersión es mayor cerca de $\theta = 0$. Principalmente ésto es una consecuencia de la parte atractiva del potencial, ya que ésta produce una deflexión a ángulos pequeños de muchas más partículas que la parte repulsiva, porque éstas, -al tener parámetros de impacto mayores- forman superficies anulares más grandes, a través de las cuales pasa mayor cantidad de flujo. Para ángulos grandes, es obvio que la contribución proviene exclusivamente de b's pequeñas y por lo tanto, de la parte repulsiva del potencial.

Hasta aquí sólo hemos esbozado cualitativamente la función de deflexión. Para completar una buena descripción de ella, es necesario encontrar una expresión analítica que condense todas las características mencionadas. Este, es el objetivo de la siguiente sección.

B). EXPRESION ANALITICA DE Θ [8],[9],[11],[14] y [16].

Como nuestras partículas están sujetas a la acción de una fuerza que sólo depende de su distancia de separación ($F = F(\vec{r})$), es decir, una fuerza central, el movimiento de ellas se encuentra constreñido a un plano. Esto nos facilita el tratamiento, ya que sólo tendremos que usar dos coordenadas, que, por la geometría del problema, resultan ser las coordenadas polares r y ϕ .

En éstas, el Lagrangiano y la energía total del sistema (referidos al CM) se escriben como:

$$\mathcal{L} = T - V = \left[\mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) / 2 \right] - V(r)$$

$$E = T + V = \left[\mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) / 2 \right] + V(r)$$

donde:

T = En. Cinética
del sistema.

V = En. Potencial
del sistema.

Debido al hecho de que ϕ no aparece explícitamente en el Lagrangiano, ϕ es una coordenada cíclica y por lo tanto, su momento generalizado correspondiente (P_ϕ) se conserva:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \right) = 0 \implies L_z = P_\phi = \mu r^2 \dot{\phi} = \text{cte.} \dots (d)$$

con: $L_z =$ comp. z del
momento angular

Incorporando L_z a la energía, tenemos:

$$E = \left\{ \mu \dot{r}^2 + \frac{L_z^2}{\mu r^2} \right\} / 2 + V(r)$$

De donde:

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{2}{\mu} [E - V(r)] - \frac{L_z^2}{\mu^2 r^2}} \dots (e)$$

De la expresión (d), tenemos que:

$$d\phi = L_z dt / \mu r^2$$

Sustituyendo de aquí dt en la ecuación (c) e integrando, obtenemos :

$$\phi - \phi_0 = \int_{r_0}^R \frac{L_z dr}{r^2 (2\mu [E - V(r)] - L_z^2/r^2)^{1/2}} \quad \dots (f)$$

que en términos del parámetro de impacto nos queda como:

$$\phi - \phi_0 = \int_{r_0}^R \frac{b dr}{r^2 \left(1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E} \right)^{1/2}}$$

Ya habíamos mencionado antes que las trayectorias de nuestras partículas son abiertas. Esto implica que sólo tienen un punto de retorno, cuyo valor queda determinado por la ecuación: $E = V_{\text{ef}}(\vec{r})$, o lo que es lo mismo:

$$V(\vec{r}) + (L_z^2 / 2\mu r^2) = E$$

donde $V_{\text{ef}}(\vec{r})$ es precisamente el potencial efectivo o "neto" al que se encuentra sujeta nuestra partícula de masa μ y que no representa otra cosa más que una competencia entre la energía centrífuga de la partícula y el potencial del centro dispersor. Pues bien, para el valor de r asociado al punto de retorno (que de ahora en adelante, llamaremos $R_{\text{mín}}$ o distancia de máximo acercamiento al centro dispersor), el valor del radicando en (f) -y por lo tanto de la integral- cambian de signo. Eso implica que si medimos a ϕ a partir de la dirección de $R_{\text{mín}}$, tendremos que la trayectoria es simétrica respecto a esa dirección. Entonces, como puede verse de la figura 9, el ángulo entre la dirección $\phi = 0$ y cualesquiera de las dos asíntotas de la trayectoria es el mismo, lo cual implica que:

$$\chi = \pi - 2\phi_0$$

donde, de (f):

$$\phi_0 = \int_{\phi=0}^{\phi_0} d\phi = \int_{r=R_{\text{mín}}}^{r=\infty} \frac{b dr}{r^2 \left(1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E} \right)^{1/2}}$$

y por lo tanto:

$$\chi = \pi - 2b \int_{r=R_{\text{mín}}}^{r=\infty} \frac{dr}{r^2 \left(1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E} \right)^{1/2}} \quad \dots (VIII)$$

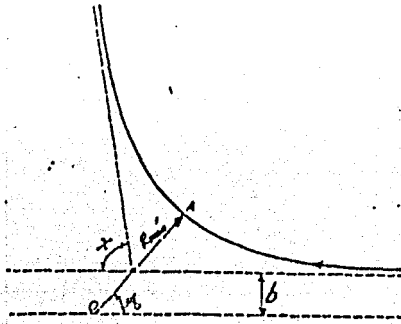


fig.9

Simetría de la trayectoria respecto a la dirección de R_{min} . Claramente el valor del ángulo entre esta dirección y cada una de las asíntotas, es el mismo.

La relación (VIII) es la expresión que tanto buscábamos para la función de deflexión. Está más claro ahora, porque dijimos que \mathcal{Z} establece un puente entre $V(r)$ y la sección diferencial. Sólo hace falta encontrar la relación entre θ -el ángulo de deflexión observable- y \mathcal{Z} .

Como nos podemos dar cuenta, \mathcal{Z} es una cantidad que se calcula teóricamente. Sus valores pueden ser positivos o negativos. Sin embargo, en el momento en que nos enfrentamos al experimento, el hecho de tener ángulos positivos o negativos pierde su significado, ya que -si observamos la fig.2- tenemos simetría cilíndrica alrededor del eje $b = 0$. Entonces se hace necesario introducir una nueva cantidad, $\theta = |\mathcal{Z}|$, que nos permitirá cerrar completamente el ciclo $V(\vec{r})$, $\mathcal{Z}(b)$ e $I(\theta)$ y poder así dar alguna interpretación a los resultados experimentales.

De esta manera, dada una forma analítica específica para el potencial $V(\vec{r})$, podremos calcular su correspondiente función de deflexión por medio de la ecuación (VIII), y a la vez, la sección diferencial asociada a ésta, a través de la expresión (III).

Sin embargo, no debemos olvidar que en los sistemas con que nosotros trabajamos, las colisiones son inelásticas y por ese simple hecho, el valor de los ángulos entre cada una de las asíntotas y la dirección $\phi = 0$, ya no es el mismo. Es más, ya no tenemos una sola curva de potencial, sino que ahora nuestra partícula (μ) puede "saltar" de una curva $V_I(\vec{r})$ a una $V_f(\vec{r})$, cuyas formas dependen del tipo de proceso que se lleva a cabo entre los proyectiles y el blanco, y cuya

diferencia de valores asintóticos es precisamente la pérdida de energía ΔE que hemos mencionado antes. Ahora los ángulos ϕ_0 y ϕ_0' con que se deflectará la partícula, dependerán de la distancia donde ésta de el "salto", es decir, de la distancia donde los dos potenciales se "cruzan", - a la que llamaremos R_c - ya que ella determina el intervalo de acción de uno y otro potencial. Considerando todo ésto, tenemos que:

$$\begin{aligned} \chi &= \pi - (\phi_0 + \phi_0') \\ &= \pi - \left[\int_{R_{\min}}^{\infty} \frac{b dr}{r^2 \left(1 - \frac{V_{\text{entrada}}(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right)^{1/2}} + \int_{R_{\min}}^{\infty} \frac{b dr}{r^2 \left(1 - \frac{V_{\text{salida}}(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right)^{1/2}} \right] \\ &= \pi - \left[\int_{R_{\min}}^{R_c} \frac{b dr}{r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right)^{1/2}} + \int_{R_c}^{\infty} \frac{b dr}{r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right)^{1/2}} \right. \\ &\quad \left. + \int_{R_{\min}}^{R_c} \frac{b dr}{r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right)^{1/2}} + \int_{R_c}^{\infty} \frac{b dr}{r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}\right)^{1/2}} \right] \quad \text{(IX)} \end{aligned}$$

Donde $V(r)$ puede tener el valor de $V_l(r)$ o de $V_f(r)$, según el sistema que esté interaccionando. A esta especificación del tipo de potencial que actúa en cada uno de los segmentos de la trayectoria, se le denomina comúnmente en la literatura "canal" [15].

1.4 POTENCIAL INTERMOLECULAR.

A) DESCRIPCION GENERAL [1],[14],[16] y [17].

En la sección anterior mostramos la gráfica de un potencial intermolecular típico (fig. 6a). Esencialmente éste consta de una parte repulsiva ($r < \sigma$) y una atractiva ($r > \sigma$). Pero, ¿cómo es que aseguramos que ésta es la forma del potencial?

Si adoptamos un punto de vista empírico, el hecho de que

los gases se condensan, sugiere que las fuerzas entre las moléculas deben ser atractivas a grandes distancias de separación. Por otra parte, el que los líquidos sean tan poco compresibles, indica que, a pequeñas distancias de separación, las fuerzas entre las moléculas deben ser repulsivas.

Sin embargo, ésto sólo nos da una idea cualitativa sobre el potencial y lo que nosotros necesitamos es una teoría que genere su forma y explique el origen de su comportamiento, ya que por el camino experimental, tampoco podemos medirlo directamente.

Desafortunadamente aún no se ha desarrollado una teoría que sea completamente satisfactoria, y las que se tienen, explican por separado el origen de la atracción y la repulsión.

Para esta última, el caso es aún más grave, pues aunque tiene mejores fundamentos físicos, los cálculos involucrados en ella son bastante más complicados. A continuación vamos a describir cada una de estas teorías.

La repulsión se atribuye al traslape de las nubes electrónicas de los átomos o moléculas interactuantes. El que sea más intensa que la atracción, es simplemente un reflejo del hecho de que la energía aumenta considerablemente si "juntamos" dentro de un volumen pequeño a muchos electrones.

Esta fuerza de repulsión tiene dos contribuciones: una proveniente de la repulsión electrostática de los núcleos -cuyos efectos son secundarios- y la proveniente de las distorsiones producidas en las nubes electrónicas por la aplicación del principio de exclusión de Pauli. La última se presenta cuando los átomos poseen inicialmente capas electrónicas cerradas (completas), ya que en este caso, los electrones tienden a repelerse, provocándose una disminución en la densidad de carga de la región de traslape. Eso tiene como consecuencia que la carga nuclear se reduzca debido al efecto de "apantallamiento", dando como resultado neto, la repulsión de los dos átomos.

Como ya habíamos dicho, los cálculos de esta parte del potencial son muy complicados y no los vamos a incluir en este trabajo. Simplemente diremos que se obtienen con el método de soluciones aproximadas a la ecuación de Schrödinger, llamado método variacional (aplicado a distintas funciones de onda iniciales) y que en la mayoría de los casos, los resultados numéricos se ajustan bastante bien a una curva de la forma:

$$V_r(r) = A \exp(-ar)$$

o con mayor precisión:

$$V_f(\mathbf{r}) = A \exp(-ar + br^2)$$

Las fuerzas atractivas aparecen a distancias mayores y su origen es puramente electromagnético. A diferencia de las repulsivas, estas fuerzas son de tres tipos: electrostáticas, inductivas y dispersivas.

Las primeras surgen cuando la distribución de carga de las moléculas en cuestión no es simétrica. Debido a esto, esa distribución -y por lo tanto la energía asociada a ella, que es la que nos interesa- se pueden expresar en términos de un desarrollo multipolar (en realidad, estos momentos son una medida de la deformidad de la distribución), que no es otra cosa más que la suma de una serie de potencias inversas de la distancia de separación entre los centros de las dos distribuciones de carga.

Las inductivas surgen cuando interaccionan una molécula neutra con una molécula polar (es decir, una molécula cargada o que tiene un dipolo permanente μ). Aquí son importantes los conceptos de polarización (α) y multipolos inducidos.

El primero es simplemente el desplazamiento relativo que sufren las cargas de una molécula neutra cuando ésta se "sumerge" en un campo eléctrico, y los segundos surgen a consecuencia de esta nueva deformación de la distribución de carga (hablando estrictamente: momentos de la distribución distorsionada - momentos de la distribución original = momentos inducidos).

Pues bien, el campo del dipolo permanente (\vec{E}) hace que la molécula neutra se polarice, induciendo en ella multipolos, que a su vez interaccionan con este dipolo. Como el campo producido por el dipolo está dado por:

$$E = \mu / R^3$$

y como la energía asociada a esta interacción está dada por:

$$V(R) = - \alpha E^2 / 2$$

entonces:

$$V(R) = - \alpha \mu^2 / 2R^6 = - C_{ind} / R^6$$

Las fuerzas dispersivas son las principales causantes del potencial atractivo. Su origen se debe a efectos cuánticos. Para obtenerlas analíticamente es necesario hacer uso del método de perturbaciones, pero en este trabajo vamos a dar una explicación y una deducción semiclásicas de ellas.

Toda molécula o átomo, tiene asociado consigo un momento

dipolar instantáneo sin importar si ésta es neutra o si su distribución de carga es esféricamente simétrica. Esto es consecuencia de que -en algún momento- todos los electrones de la molécula se acumulan en una región determinada, causando con esto una deformación instantánea de la nube y por lo tanto dando lugar a un dipolo instantáneo.

Si en ese momento se acerca e interactúa con otra molécula, por lo que explicamos en párrafos anteriores, se induce un dipolo en esta última y el efecto de la interacción, es la atracción de las dos. De manera similar, hay un instante en el que la segunda molécula adquiere un momento dipolar e induce otro en la primera molécula, dando como resultado una energía total de interacción:

$$\begin{aligned} V(R) &= - (\alpha_2 E_1^2 + \alpha_1 E_2^2) / 2 = \\ &= - (\alpha_2 \mu_1^2 + \alpha_1 \mu_2^2) / 2R^6 = \\ &= - C_{disp} / R^6 \end{aligned}$$

Es conveniente aclarar ahora que las expresiones para las fuerzas inductivas y dispersivas no sólo contienen el término R^{-6} , sino también potencias como R^{-8} , R^{-10} , R^{-12} , etcétera, que resultan de considerar interacciones con momentos multipolares de orden mayor.

De todos estos resultados, se deduce que las fuerzas atractivas se pueden expresar generalmente como una serie de potencias inversas de R . De especial importancia es el término $1/R^6$, ya que él define en especial, la contribución de la fuerza dispersiva.

Ya obtuvimos -aunque de manera muy simplificada- las expresiones analíticas generales para el potencial atractivo y repulsivo. Necesitamos ahora encontrar una expresión que a la vez que describa tanto el efecto atractivo como repulsivo del potencial, explique algunas de las características de los resultados experimentales. Se nos ocurre entonces proponer nuevas expresiones para el potencial, que se construirán a partir de distintas combinaciones de estos potenciales generales, pero que ahora incluirán ciertos parámetros que serán los encargados de describir a diferentes sistemas de partículas, y que podremos ajustarlos hasta que queden, en lo posible, a las observaciones experimentales.

B) MODELOS [1], [16] y [17].

Es de esperarse -por la manera de construir los modelos- que exista un gran número de éstos en la literatura. A

continuación vamos a describir sólo tres de ellos que fueron los que se utilizaron en las referencias [2], [3] y [4]. Con éstos se calcularon las correspondientes funciones de deflexión que sirvieron de comparación a las obtenidas en este trabajo con el modelo de potencial coulombiano.

Debemos tener bien presente, que para que un modelo sea satisfactorio, debe tratar de incorporar en sí, la máxima información teórica posible sobre el potencial; además, no debe ser demasiado complicado, para que de ese modo sea -si no fácilmente- por lo menos integrable, y por último, debe predecir el mayor número posible de propiedades macroscópicas. En pocas palabras, un modelo debe ser el resultado de una mezcla adecuada de sentido común, conocimiento y experiencia que se refleje como una expresión analítica con un mínimo de parámetros ajustables, que ni hagan la situación más complicada, pero que tampoco la hagan escueta.

Potencial de Rittner ([2],[4]" y [6]).

Este modelo fue calculado explícitamente para moléculas constituidas por un álcali y un halógeno, bajo la suposición de que los dos están en la molécula como iones. Debido a esto, cada uno de ellos se polariza con el campo eléctrico del otro. Entonces su energía potencial proviene casi exclusivamente de las interacciones electrostáticas carga-carga, carga-dipolo, dipolo-dipolo y de energía cuasi-elástica almacenada en los dipolos inducidos. Si llamamos ϕ a esta energía tenemos que:

$$\begin{aligned} \phi &= -\frac{e^2}{R} - \frac{\mu_1 e}{R^2} - \frac{\mu_2 e}{R^2} - \frac{2\mu_1\mu_2}{R^3} + \frac{\mu_1^2}{2a_1} + \frac{\mu_2^2}{2a_2} \\ &= -\frac{e^2}{R} - \frac{e^2(a_1+a_2)}{2R^4} - \frac{2e^2d_1d_2}{R^7} \end{aligned}$$

donde la última expresión se obtiene sustituyendo los valores de μ_1 y μ_2 :

$$\mu_1 = \frac{ea_1}{R^2} + \frac{2ea_1a_2}{R^5} + \dots$$

$$\mu_2 = \frac{ea_2}{R^2} + \frac{2ea_1a_2}{R^5} + \dots$$

R = distancia internuclear

La parte de la energía potencial que falta, se obtiene a partir de la teoría de Born y Mayer y consiste en un término repulsivo, uno atractivo y varios términos cinéticos que

representan la diferencia en energía traslacional, rotacional y vibracional entre la molécula y los iones libres. Por lo tanto:

$$V(R) = \phi + A e^{-R/\rho} - \frac{C}{R^6} + \frac{h\nu_0}{2} + \frac{h\nu_0}{e^{h\nu_0/kT} - 1} - \frac{kT}{2}$$

$$= -\frac{e^2}{R} - \frac{e^2(d_1+d_2)}{2R^4} - \frac{2e^2d_1d_2}{R^7} + A e^{-R/\rho} - \frac{C}{R^6} + \Delta E \quad \dots (g)$$

Claramente este $V(R)$ describe mejor la parte atractiva, ya que considera cuatro potencias de R , mientras que la parte repulsiva es sólo descrita por un término exponencial.

Como dijimos al principio, este potencial se calculó para la interacción entre un ión alcalino y uno halógeno. Es por eso que en [2] y en [4]" se utiliza para representar al potencial iónico asociado a los procesos $\text{Na} + \text{I} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{I}^-$ y $\text{H}(\text{ls}) + \text{Cs} \rightarrow \text{H}^- + \text{Cs}^+$. En la ecuación (g) llamamos deliberadamente ΔE a los términos cindticos, ya que coinciden con esa cantidad.

Potencial de Morse ([4],[4]" y [5]).

La forma funcional de este modelo surge cuando queremos resolver la ecuación de onda para el movimiento nuclear de una molécula diatómica. Como la energía potencial de los núcleos es una función complicada de R y de los números cuánticos, y como además no se conoce con precisión para ninguna molécula, entonces se procede a sustituirla por alguna función analítica que se asemeje cualitativamente a ella, para de ese modo, poder resolver de manera más simple la ecuación.

Dicha función debe cumplir además con las siguientes condiciones:

- a) debe tender a un valor finito cuando $R \rightarrow \infty$,
- b) debe tener un único punto mínimo y debe estar localizado en $R = R_0$,
- c) debe tender a ∞ ó al menos crecer mucho cuando $R \rightarrow 0$

Una de las expresiones que cumple con ellas y que es de las más usadas para ésto, es precisamente el potencial de Morse.

Su expresión consta de dos términos exponenciales:

$$V(R) = D \exp\{-2a(R - R_0)\} - 2D \exp\{-a(R - R_0)\}$$

donde $-D$ es el valor del mínimo del potencial y R_0 define la posición de éste.

Como puede verse, en esta expresión se eliminan completamente las potencias de R , por lo que no se reproduce de manera realista, la parte atractiva del potencial. Para R 's muy cercanas a cero, el comportamiento tampoco es muy satisfactorio, ya que da valores finitos para $V(R)$.

En realidad la expresión usada en [4] y [4]" fue:

$$V(R) = D \{1 - \exp[-2\beta(R - R_0)/R_0]\}$$

que constituye simplemente una traslación de la anterior, pero que parece adaptarse mejor a los resultados experimentales obtenidos para el potencial del sistema $H(ls) + Cs$.

Potenciales Ab Initio ([3], [17] y [19]).

Estos también surgen cuando queremos resolver la ecuación de Schrödinger, pero a diferencia del de Morse, aquí todos los parámetros e integrales que surgen en su cálculo, se obtienen analíticamente. La única aproximación que se hace es la de Born-Oppenheimer, es decir, aquella en que separamos el movimiento nuclear del movimiento electrónico y en la que por lo tanto, suponemos que la función de onda completa es un producto de la función de onda solución del problema electrónico (con los núcleos en posiciones fijas) y la función de onda que corresponde al movimiento de los núcleos sometidos a un potencial que incluye sus interacciones mutuas y el efecto medio de la nube electrónica.

En la referencia [3], que es de donde tomamos los potenciales para el sistema $H^+ + Mg$, se ignora además la interacción spin-órbita y se construyen funciones de onda aproximadas por medio del método de superposición de configuraciones (configuration-interaction method; CI). En éste caso, el conjunto de funciones empleadas en la construcción de cada configuración es del tipo del de las funciones de Slater. Esencialmente el método consiste en formar distintas combinaciones lineales con estas configuraciones, pero desde luego, tomando en cuenta lo que por intuición física se espera. Con las funciones así construidas, se procede a encontrar los eigenvalores de la ecuación de onda para el movimiento electrónico, que en conjunto constituyen, ni más ni menos, el potencial intermolecular que tanto buscamos. En términos de ecuaciones:

$$\hat{H} \psi(r, R) = E \psi(r, R)$$

Ec. de onda del sistema completo.

donde: $\psi(r, R) = \psi_r(r) \phi(R)$

de la separación Born-Oppenheimer

$$(\hat{h} + V) \psi_r(r) = E(R) \psi_r(r)$$

ec. de onda del mov. electrónico

donde: $\hat{h} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{k=1}^S \frac{z_k}{r_{ik}} \right)$ y V es el operador de energía potencial para las repulsiones nucleares y electrónicas.

$$[T_R + E(R)] \phi(R) = \epsilon \phi(R)$$

ec. de onda del mov. nuclear; donde E(R) es el potencial intermolecular.

Con esta breve descripción de los potenciales empleados, finalizamos este capítulo. Ahora, con todas las herramientas clásicas desarrolladas, estamos en posición de analizar el modelo de Gillen y Hickman y sobre todo, de aplicarlo a nuestros sistemas.

CAPITULO 2

MODELO DE GILLEN Y HICKMAN.

2.1 DESCRIPCION DEL MODELO.

El propósito fundamental de este modelo, es explicar la aparición de un máximo secundario en la sección diferencial de ciertos sistemas que sufren un proceso de quemi-ionización.

Básicamente el proceso de formación de pares iónicos consiste en la colisión inelástica de dos partículas neutras, (puede haber otras combinaciones posibles de reactantes, pero a nosotros nos interesan éstas) la cual tiene como resultado que una de ellas "atrapa" un electrón de la otra.

Lo que se propone en el modelo, es que el movimiento de nuestro sistema antes de la colisión, sea el de unas partículas a través de un potencial constante ($V_0(R) = \text{cte.}$) -lo que significa que la fuerza será nula entre las partículas neutras- y después de ella, sea el de unas partículas a través de un potencial puramente coulombiano atractivo ($V_i(R) = -1/R$), como si los iones fueran nada más dos simples cargas opuestas unitarias. Sin embargo, la situación no es tan sencilla -sobre todo en lo que respecta a ese "antes" y "después" de la colisión- y para aclararla, analizaremos la figura 10.

Como puede observarse, si el parámetro de impacto del proyectil es menor que R_c , esta partícula cruza dos veces la superficie definida por $R = R_c$. Durante cada uno de estos cruces es posible que haya una transferencia del electrón de una partícula a otra, por lo cual se tienen cuatro posibles trayectorias: dos que dan lugar a dispersión elástica y dos que dan origen a pares iónicos. Si la transferencia del electrón se lleva a cabo en el primer cruce y el sistema permanece ionizado en el segundo, tendremos lo que se llama dispersión iónica. En general, este proceso produce dispersión a ángulos grandes, debido a que la fuerza Coulombiana actúa durante la mayor parte de la colisión. Si el sistema permanece neutro después del primer cruce, pero hay una transferencia de electrón en el segundo, tendremos el caso de una dispersión covalente, la cual, en general, da origen a deflexiones a ángulos pequeños, debido al hecho de que el campo Coulombiano sólo actúa después de este segundo cruce. De todo esto podemos inferir que los dos máximos principales que aparecen en las secciones diferenciales experimentales, se deben a estos dos tipos de procesos [21].

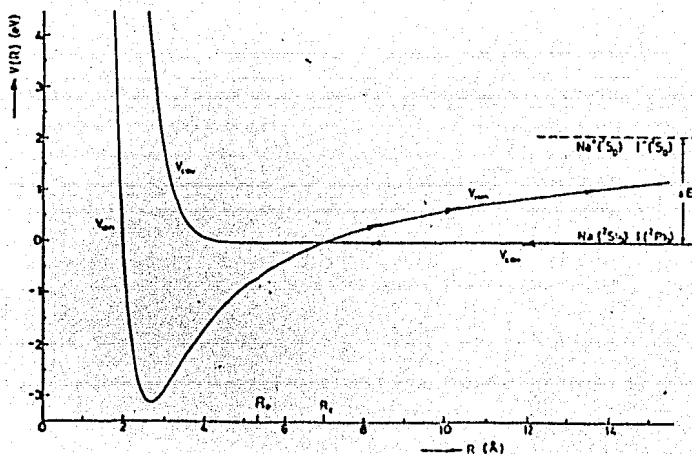
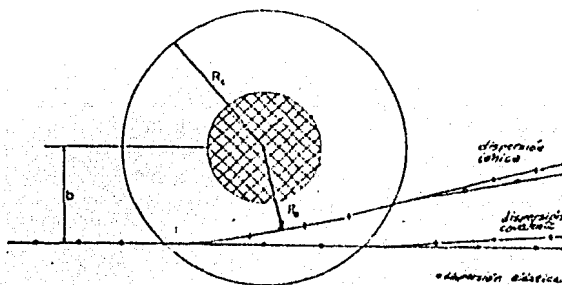


fig.10

(a) Imagen simplificada de la colisión entre partículas. (b) Curvas de energía potencial correspondientes a este proceso.

Si analizamos ahora a la figura 10b en términos de la figura 10a, veremos que nuestras partículas se van acercando a través de un potencial covalente constante, llegan a R_c y en este punto pueden seguir por el potencial iónico (dispersión iónica), o pueden continuar por el potencial covalente (dispersión covalente), hasta alcanzar -en cualquiera de los casos- el punto de retorno R_0 . A continuación las partículas vuelven a separarse, hasta volver a alcanzar el punto R_c (el segundo cruce), donde ahora las partículas seguirán a través

del potencial coulombiano, es decir, donde se separarán pero ya como iones.

De todo ésto podemos inferir que el "antes" y el "después" al que nos referimos inicialmente, quedan definidos por el primer y segundo cruce, y que ahora la colisión no es instantánea, -como en el caso de partículas puntuales- sino que se presenta como una interacción (covalente o iónica) dentro de la superficie de radio R_c .

Como puede verse, el modelo es extremadamente simple y por lo mismo, requerirá un mayor cuidado a la hora de su aplicación, ya que no será válido para cualquier tipo de sistema.

En primer lugar, como se ignora por completo la parte repulsiva de los potenciales covalente y iónico, los sistemas que escojamos deberán moverse a través de ellos pero en una región que esté alejada de esa parte repulsiva, para que de ese modo, el efecto en su movimiento sea verdaderamente despreciable y entonces tenga sentido comparar los resultados experimentales, con los del modelo.

En segundo lugar, como en el modelo nunca se toma en cuenta que hay una probabilidad (p) para que el sistema sufra una transición del estado covalente al iónico o viceversa, esto se traduce a que los candidatos por estudiar con ésto, deban tener un valor para p aproximadamente constante.

Las reacciones que se estudiarán entonces en este trabajo:

- a) $\text{Na} + \text{I} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{I}^-$, a 13.1 y 38.7 eV;
- b) $\text{Cs} + \text{H} \rightarrow \text{Cs}^+ + \text{H}^-$, a 50.8, 70.2 y 80.4 eV y
- c) $\text{Mg} + \text{H} \rightarrow \text{Mg}^{++} + \text{H}^-$, a 500, 600 y 700 eV .

se escogieron tratando de seguir estos dos criterios.

La última reacción constituye un proceso de captura doble. Sin embargo vamos a incluirlo en nuestro estudio, porque para R 's grandes, su potencial covalente es muy plano y su potencial iónico muy semejante al Coulombiano, es decir, el sistema se comporta a estas distancias como partículas neutras a la entrada, y como una carga positiva (+1) y otra negativa (-2) a la salida.

2.2 APLICACION.

A) CALCULOS.

Primeramente vamos a definir a ΔE como la diferencia de energías que hay entre las asíntotas de los potenciales covalente y iónico (ver fig. 12). Con ésto el potencial covalente adquiere la forma:

$$V_0(R) = -\Delta E = -1/R_c$$

($-2/R_c$ para el caso del sistema $H^+ + Hg$)

Con los potenciales propuestos, ($V_0(R) = -\Delta E$ y $V_i(R) = -1/R$ en los casos a) y b) y $V_0(R) = -\Delta E$ y $V_i(R) = -2/R$ para c)) se procedió a calcular la función de deflexión para cada uno de estos sistemas. Como hay dos procesos distintos (dispersión covalente y iónica) y por lo tanto dos trayectorias distintas a través de los potenciales (a las que se llaman canales) que conducen a la formación de pares iónicos, tendremos entonces dos ramas para la función $\chi(b)$: la covalente y la iónica.

Haciendo uso de la ecuación (IX), vamos a calcular primero la rama iónica. De la figura 12 podemos ver que:

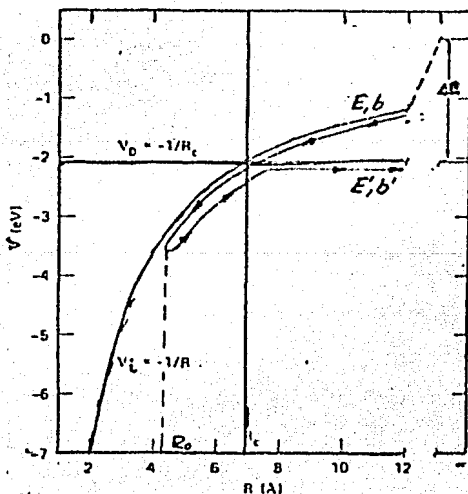


fig.12

Gráfica del canal iónico. Nótese que el potencial -y por lo tanto la energía de colisión (E) y el parámetro de impacto (b) - están referidos a la asíntota de la curva Coulombiana. Esto se hace con el objeto de simplificar los cálculos. Los primados correspondientes significan lo mismo, pero están referidos a la asíntota covalente.

$V(R) = V_f(R) = -1/R$ y $V_i(R) = -\Delta E = -1/R_c$, de donde:

$$\chi_{ion} = \pi - b \left[\int_{R_0}^{\infty} \frac{dR}{R^2 \left(1 + \frac{1}{RE} - \frac{b^2}{R^2}\right)^{1/2}} + \int_{R_0}^{R_c} \frac{dR}{R^2 \left(1 + \frac{1}{RE} - \frac{b^2}{R^2}\right)^{1/2}} + \int_{R_c}^{\infty} \frac{dR}{R^2 \left(1 + \frac{1}{R_c E} - \frac{b^2}{R^2}\right)^{1/2}} \right] \dots (X)$$

De manera análoga obtenemos de la figura 13:

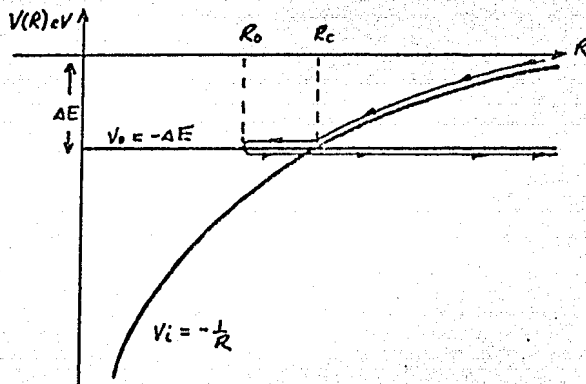


fig.13
Gráfica del canal covalente.

$V(R) = V_i(R) = -\Delta E = -1/R_c$ y $V_f(R) = -1/R$, de donde:

$$\chi_{cov} = \pi - b \left[\int_{R_0}^{\infty} \frac{dR}{R^2 \left(1 + \frac{1}{R_c E} - \frac{b^2}{R^2}\right)^{1/2}} + \int_{R_0}^{R_c} \frac{dR}{R^2 \left(1 + \frac{1}{R_c E} - \frac{b^2}{R^2}\right)^{1/2}} + \int_{R_c}^{\infty} \frac{dR}{R^2 \left(1 + \frac{1}{RE} - \frac{b^2}{R^2}\right)^{1/2}} \right] \dots (XI)$$

Para calcular más fácilmente estas dos funciones, vamos a definir a dos integrales:

$$I(R_a, R_b) \equiv \int_{R_a}^{R_b} \frac{dR}{R^2} (1 + 1/RE - b^2/R^2)^{-1/2}$$

$$C(R_a, R_b) \equiv \int_{R_a}^{R_b} \frac{dR}{R^2} (1 + 1/R_c E - b^2/R^2)^{-1/2}$$

Para encontrar el valor de la primera, vamos a hacer el cambio de variable $u = 1/R$:

$$I(R_a, R_b) \equiv \int_{1/R_b}^{1/R_a} du (1 + u/E - b^2 u^2)^{-1/2}$$

Como:

$$1 + u/E - b^2 u^2 = 1 + \frac{1}{4b^2 E^2} - \left(bu - \frac{1}{2bE} \right)^2 =$$

y si ahora introducimos la variable $Y = (1 + 4b^2 E^2)^{1/2}$, tenemos entonces que:

$$= \frac{1}{4b^2 E^2 Y^2} \left[1 - (2b^2 E Y u - Y)^2 \right]$$

de donde:

$$I(R_a, R_b) = 2bEY \int_{1/R_b}^{1/R_a} du (1 - (2b^2 E Y u - Y)^2)^{-1/2}$$

Si hacemos el cambio de variable: $x = 2b^2 E Y u - Y$, $dx = 2b^2 E Y du$, la $I(R_a, R_b)$ nos queda de una forma ya conocida y fácilmente integrable:

$$I(R_a, R_b) = \frac{1}{b} \int_{z_b}^{z_a} dz (1 - z^2)^{-1/2} = \frac{1}{b} \operatorname{arc} \operatorname{sen}(z) \Big|_{z_b}^{z_a}$$

donde: $z_i = 2b^2 EY / R_i - Y$

Algo similar se hace para encontrar el valor de la segunda integral:

$$C(R_a, R_b) = \int_{1/R_b}^{1/R_a} du (1 + 1/R_c E - b^2 u^2)^{-1/2}$$

de donde:

$$1 + \frac{1}{R_c E} - b^2 u^2 = \frac{1 + R_c E}{R_c E} - b^2 u^2$$

que se convierte en:

$$= \frac{1}{UR_c^2} [1 - UR_c^2 b^2 u^2]$$

cuando introducimos la variable $U = (R_c^2 + R_c/E)^{-1}$.

Entonces la integral nos queda como:

$$C(R_a, R_b) = \int_{1/R_b}^{1/R_a} (UR_c^2)^{1/2} (1 - UR_c^2 b^2 u^2)^{-1/2} du$$

que con el cambio $v = U^{1/2} R_c b u$, $dv = U^{1/2} R_c b du$, se transforma en:

$$C(R_a, R_b) = \int_{v_b}^{v_a} (1 - v^2)^{-1/2} dv = \frac{1}{b} \operatorname{arc} \operatorname{sen}(v) \Big|_{v_b}^{v_a}$$

donde: $v_i = U^{1/2} R_c b / R_i$

Con las integrales I y C definidas y calculadas de esta forma, vamos a reescribir las expresiones para las ramas iónica y covalente de la función de deflexión:

$$\chi_{ion} = \pi - b [I(R_0, \infty) + I(R_0, R_c) + C(R_c, \infty)]$$

$$\chi_{cov} = \pi - b [C(R_0, \infty) + C(R_0, R_c) + I(R_c, \infty)].$$

Evaluando a la primera de ellas, tenemos:

$$\chi_{ion} = \pi - 2 \arcsen(2b^2 EY/R_0 - Y) + \arcsen(-Y) + \\ + \arcsen(2b^2 EY/R_c - Y) - \arcsen(U^{1/2} b)$$

Esta expresión se puede reducir empleando la ecuación que define al punto de retorno R_0 , ya que, si la resolvemos para b/R_0 , tenemos:

$$1 - \frac{b^2}{R_0^2} + \frac{1}{R_0 E} = 0 \quad \implies \quad \frac{b}{R_0} = \frac{1}{2bE} + \sqrt{\left(\frac{1}{2bE}\right)^2 + 1} = \frac{1}{2bE} \left(1 + \frac{1}{Y}\right)$$

La solución con signo negativo se deshecha, ya que conduce al resultado:

$$4b^2 E^2 < 0$$

Si utilizamos de [20] que :

$$\arcsen(z_1) - \arcsen(z_2) = \arcsen[z_1(1-z_2^2)^{1/2} - z_2(1-z_1^2)^{1/2}]$$

entonces:

$$\arcsen(2b^2 EY/R_c - Y) - \arcsen(U^{1/2} b) = -\arcsen(Y(1-b^2 U)^{1/2})$$

y la expresión para χ_{ion} nos queda:

$$\chi_{ion} = \pi - 2 \arcsen(1) - \arcsen(Y) - \arcsen(Y(1-b^2 U)^{1/2}) \\ = -\arcsen(Y) - \arcsen(Y(1-b^2 U)^{1/2}) \quad \dots \text{(XII)}$$

Para ahorrarnos cálculos en la evaluación de χ_{cov} , vamos a hacer uso de la suma de esta última expresión con χ_{cov} :

$$\chi_{cov} + \chi_{ion} = 2\pi + b [-2C(R_0) - 2I(R_0) + 2C(\infty) + 2I(\infty)] \\ = 2 \{ \pi + [-\arcsen(U^{1/2} R_c b / R_0) \\ - \arcsen(2b^2 EY/R_0 - Y) + \arcsen(0) + \\ - \arcsen(Y) = -2 \arcsen(Y) \}$$

lo cual implica que:

$$\chi_{cov} = -\arcsen(Y) + \arcsen[Y(1-b^2 U)^{1/2}] \quad \dots \text{(XIII)}$$

Sin embargo, las dos primeras integrales en la expresión para ambas χ 's, tienen como límite de integración inferior a R_0 , que como puede verse, constituye un punto singular de los integrandos de ambas. Esto nos causa problemas, ya que ni debemos evaluar la integral ahí, ni podemos quitar simplemente el punto, puesto que su contribución a la integral puede ser bastante grande. Lo que hacemos entonces, es dividir la integral en dos partes [7]: una que va de R_0 a $R_0 + \Delta$ y otra que va de $R_0 + \Delta$ a R' . Como el valor de la integral correspondiente al primer intervalo (ϕ_1), no se puede obtener analíticamente, se procede a acotarlo entre los valores U_a y L_a , los cuales dependen fuertemente de la Δ escogida, de E , de b y del potencial de interacción en cuestión. Tenemos entonces que:

$$I(R_0, R') = I(R_0, R_0 + \Delta) + I(R_0 + \Delta, R')$$

$$\phi = \phi_1 + \phi_2$$

análogamente para $C(R_0, R')$.

Como los valores de U_a y L_a están dados por:

$$U_a = \arcsen \left(\frac{z(R_0 + \Delta)(R_u - R_0)}{2R_u R_0 - R_0^2 - (R_0 + \Delta)^2} \right)$$

$$L_a = \arcsen \left[\left(\frac{\Delta^2}{R_0^2} + \frac{2\Delta}{R_0} \right)^{1/2} \right]$$

donde: $R_u = 2E/V'_{max} = 2E/\infty = 0$, ya que $V'_{max} = \frac{d}{dR} \left(\frac{1}{R} \right) = 1/R^2 \Big|_0 = \infty$ y como:

$$0 \leq \Delta \leq (R_u b^2 / 4R_0^2) \left[1 - \frac{4R_0^2}{b^2} + \left(\frac{\beta R_0^2}{b^2} + 1 \right)^{1/2} \right]$$

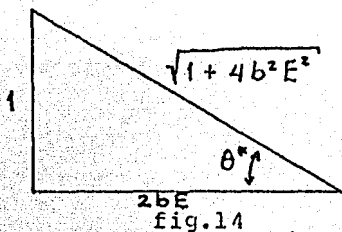
entonces $\Delta = 0$ y por lo tanto, $U_a = L_a = 0$, lo que implica que $\phi_1 = 0$ y que no es necesario aislar al punto R_0 , o lo que es lo mismo, los cálculos de χ_{ion} y χ_{cov} están correctos.

Una vez que hemos verificado las expresiones para ambas ramas de la función de deflexión, procederemos a encontrar la sección diferencial correspondiente. Como para esto necesitamos invertir a las χ 's -es decir, queremos $b(\chi)$ y no

$\chi(b)$ - tendremos que recurrir a la aproximación de ángulos pequeños $\tan \theta \sim \theta$. Esta última implica que:

$$\theta \sim \arctan(\theta) \text{ y que } \theta \sim \arcsen(\theta)$$

Por otro lado, como puede verse de la fig. 14:



Relación entre diversos parámetros del modelo.

$\text{ang sen}(Y) = \text{ang tan}(1/2bE)$ y por lo tanto:

$$Y \sim \text{ang sen}(Y) = \text{ang tan}(1/2bE) \sim 1/2bE$$

Aplicando la aproximación a la expresión para χ_{ion} tenemos:

$$\begin{aligned} \chi_{ion} &\sim -Y - Y(1-b^2 U)^{1/2} = -Y(1 + (1-b^2 U)^{1/2}) - \\ &\sim -(1/2bE)(1 + (1-b^2 U)^{1/2}) \end{aligned}$$

De donde, despejando a b tenemos:

$$b = -4E\theta / (4E^2\theta^2 + U)$$

Análogamente para la rama covalente, en la cual obtenemos:

$$\chi_{cov} = -(1/2bE)(1 - (1-b^2 U)^{1/2})$$

y por lo tanto, para $b(\chi)$:

$$b = -4E\theta / (4E^2\theta^2 + U)$$

En ambas ramas, la expresión para $b(\chi)$ es la misma y por lo tanto la expresión para la sección diferencial -ecuación (III)- será igual en los dos casos:

$$\begin{aligned} I(\theta) \text{ sen}\theta = b \left| db/d\theta \right| &= \left| \frac{-4E\theta(16E^3\theta^2 - 4EU)}{(4E^2\theta^2 + U)^3} \right| \\ &= \left| \frac{16E^3\theta(U - 4E^2\theta^2)}{(4E^2\theta^2 + U)^3} \right| \end{aligned}$$

Sin embargo, ésta no es la expresión para la sección diferencial que estamos buscando, ya que si analizamos con cuidado las integrales para la función de deflexión, podremos ver que las trayectorias utilizadas son las inversas de las que conducen a la quemi-ionización. Por lo tanto, para poder obtener la expresión correcta, vamos a tener que introducir al parámetro de impacto referido a la asíntota covalente (b'), cuya expresión sale de combinar la definición $\Delta E = E' - E$ (ver sección 2.2 A) y el hecho de que el momento angular debe ser el mismo tanto en $t = +\infty$ como en $t = -\infty$. Es decir:

$$b' = b [1 - (\Delta E/E')]^{1/2}$$

donde:

E' = Energía de colisión relativa a la asíntota cov.

$$= E + \Delta E$$

Con lo que la sección diferencial nos queda:

$$I(\theta) \sin\theta = b' |db'/d\theta|$$

$$= (1 - \Delta E/E') \frac{|16 E^2 \theta (U - 4E^2 \theta^2)|}{(4E^2 \theta^2 + U)^3} \quad \dots (XIV)$$

Hasta este momento no hemos hecho ningún cálculo para el potencial $-2/R$. Sin embargo, no es necesario, ya que si definimos las variables:

$$Y_2 \equiv 1 / \sqrt{1 + E^2 b^2} \quad \text{y} \quad U_2 \equiv (Rc^2 + 2R\epsilon/E)$$

los resultados para la función de deflexión asumen la misma forma que en el caso del potencial $-1/R$, nada más que cambiando Y por Y_2 y U por U_2 , es decir:

$$\chi_{ion} = - \arcsen(Y_2) - \arcsen[Y_2 (1 - b^2 U_2)^{1/2}]$$

$$\chi_{cov} = - \arcsen(Y_2) + \arcsen[Y_2 (1 - b^2 U_2)^{1/2}]$$

Para las aproximaciones tenemos:

$$\chi_{ion} \sim - (1/bE) (1 + (1 - b^2 U_2)^{1/2})$$

$$\chi_{cov} \sim - (1/bE) (1 - (1 - b^2 U_2)^{1/2})$$

y para la sección diferencial:

$$I(\theta) \operatorname{sen}\theta = (1 - \Delta E/E') \frac{|4E^2\theta(U_2 - E^2\theta^2)|}{(E^2\theta^2 + U_2)^3} \quad \dots(XV)$$

Como más adelante vamos a comparar la posición de los puntos críticos de la sección diferencial de este modelo con las correspondientes al experimento, obtendremos las expresiones analíticas para ellos. Diferenciando las expresiones (XIV) y (XV):

$$d I(\theta) \operatorname{sen}\theta / d\theta = 0 = \left[\frac{-32 E^2 \theta^2 U + 4\theta E^4 \theta^4 + U^2}{(4E^2\theta^2 + U)^4} \right] \left(1 - \frac{\Delta E}{E'} \right)$$

$$\implies 48 E^4 \theta^4 - 32 E^2 \theta^2 U + U^2 = 0$$

Si hacemos: $\theta^2 = \kappa \implies 48 E^4 \kappa^2 - 32 E^2 U \kappa + U^2 = 0 \implies$

$$\kappa = \frac{32 E^2 U \pm \sqrt{32 E^4 U^2}}{96 E^4} \implies \kappa^+ = 0.634 U/E^2 \text{ y}$$

$$\kappa^- = 0.033 U/E^2$$

$$\implies |\theta_2| = \sqrt{\kappa^+} = 0.796 U^{1/2} / E$$

$$\implies |\theta_1| = \sqrt{\kappa^-} = 0.181 U^{1/2} / E \quad \dots(i)$$

Por otra parte:

$$d I(\theta) \operatorname{sen}\theta / d\theta = 0 = \left[\frac{-32 E^4 \theta^2 U_2 + 4E^2 U_2^2 + 12E^6 \theta^4}{(E^2\theta^2 + U_2)^4} \right] \left(1 - \frac{\Delta E}{E'} \right)$$

$$\implies 12 E^6 \theta^4 - 32 E^4 U_2 \theta^2 + 4 E^2 U_2^2 = 0$$

Si hacemos nuevamente $\theta^2 = \kappa$, entonces:

$$3 E^4 \kappa^2 - 8 E^2 U_2 \kappa + U_2^2 = 0 \implies \kappa = \frac{8 E^2 U_2 \pm \sqrt{52 E^4 U_2^2}}{6 E^4}$$

$$\kappa^+ = \frac{8 E^2 U_2 + \sqrt{52} E^2 U_2}{6 E^4}$$

$$|\theta_2| = 1.592 U^{1/2} / E$$

\implies

\implies

$\dots(j)$

$$\kappa^- = \frac{8 E^2 U_2 - \sqrt{52} E^2 U_2}{6 E^4}$$

$$|\theta_1| = 0.363 U^{1/2} / E$$

Para obtener el valor mínimo, sólo hacemos:

$$|U - 4E^2 \theta_{\min}^2| = 0$$

$$|\theta_{\min}| = 0.5 U^{1/2} / E \quad \dots(k)$$

$$|U - E^2 \theta_{\min}^2| = 0$$

$$|\theta_{\min}| = 1.0 U^{1/2} / E \quad \dots(l)$$

B) PROGRAMAS.

Con las expresiones (XII), (XIII), (XIV) y (XV), se elaboraron dos programas (BASIC), -uno para $-1/R$ (Programa 1) y otro para $-2/R$ (Programa 2) - que permitieron obtener un buen número de valores para cada una de estas funciones. Es importante aclarar que todos los cálculos se hicieron en unidades atómicas (a_0 y Hartrees) y que los resultados de la función de deflexión y de la sección diferencial se obtuvieron en radianes y en unidades arbitrarias, respectivamente, por lo que para graficarlos convenientemente, hubo que transformar a χ y a θ en grados y a las energías nuevamente en electrón-Volts.

Aunque la forma funcional de la sección diferencial es la misma para ambas ramas de la función de deflexión, en los dos programas la separamos en dos secciones (Súdcov y Sddion), con el objeto de poder definir más claramente qué parte de la función de deflexión da origen a cada uno de los máximos de la sección diferencial.

En lo que respecta al intervalo de valores que toma el parámetro de impacto, el extremo derecho de éste fue determinado utilizando el hecho de que, -en el caso límite $R_0 = R_c$ - tanto la situación de la dispersión covalente como la de la iónica, es la misma (ver fig.15) y por lo tanto la deflexión resultante será igual en ambos casos. Esto, junto con la dependencia de b en R_0 , -que significa tener esta situación para la misma b en ambas ramas- implica que las dos curvas para la función χ , coinciden en un punto. Algebraica-

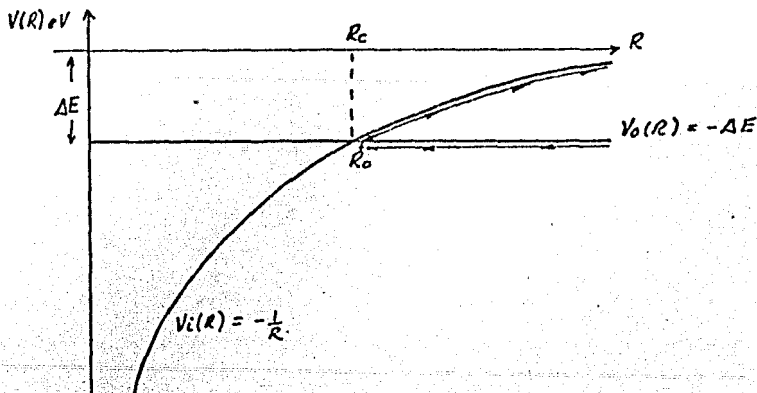


fig.15

Coincidencia de los canales iónico y covalente para el caso límite $R_0 = R_c$.

mente, ésto está expresado por:

$$R_0(b^*) = R_c \implies 1 - \frac{(b^*)^2}{(R_0(b^*))^2} + \frac{1}{R_0(b^*)E} = 0 \implies$$

$$1 - \left(\frac{b^*}{R_c}\right)^2 + \frac{1}{R_c E} = 0$$

de donde, despejando a b^* :

$$b^* = (R_c^2 + R_c/E)^{-1/2} = U^{-1/2} \quad \dots (m)$$

Sustituyendo este valor en la expresión para la función de deflexión, tenemos:

$$\chi^* = - \text{arc sen}(Y) - \text{arc sen} [Y(1 - b^{*2} U)^{1/2}]$$

$$= - \text{arc sen}(Y) - \text{arc sen}[Y(1 - U^{-1} U)^{1/2}]$$

$$= - \text{arc sen}(Y) \quad \dots (n)$$

Con la ecuación (m) se determinaron, en cada uno de los sistemas estudiados, los posibles valores para el extremo derecho del intervalo. En la Tabla 1 se muestran estos resultados junto con los obtenidos para la ecuación (n). En base a estos valores, se decidió tomar los intervalos [0, 8] y [0, 3.75] Angstroms para los Programas 1 y 2 respectivamente.

En algunos casos, por ejemplo en el sistema H(1s) + Cs, estos intervalos exceden nuestras necesidades, pero no hay problema, ya que para valores de b mayores que b^* -que implican $b > U^{-1/2}$ y por lo tanto $(1 - b^2 U) < 0$ - los programas no calculan nada, porque se está introduciendo un argumento negativo en una raíz cuadrada, error que se utiliza en la línea 440 de ambos programas para iniciar de nuevo el cálculo pero con un valor diferente para el parámetro de impacto.

En la tabla 1 incluimos también a los distintos valores empleados para ΔE [28]. Anteriormente dijimos que esta variable correspondía a la pérdida de energía total del sistema durante la colisión. Como esta pérdida es debida a la transferencia del electrón, esto equivale a encontrar la cantidad de energía que falta para poder "extraer" al electrón de la partícula correspondiente; en otras palabras, la diferencia entre el potencial de ionización del reactante que pierde al electrón y la afinidad electrónica del que lo atrapa, nos dice qué tanta energía falta para que se presente la transferencia del electrón, energía que el sistema tomará de su energía cinética total, con la consecuente disminución de ésta. Es claro que la cantidad ΔE es única para cada uno de los sistemas tratados. Sin embargo, como puede verse de la tercera columna de la Tabla 1, hemos asignado dos valores a esta variable en el caso del sistema H(1s) + Cs. La razón es

que en las referencias [4] y [4]" se da un valor (9.744) para el punto de cruce de los potenciales covalente y iónico, que introducido en la relación:

$$\Delta E = 1/Rc$$

(que se obtuvo al principio de 2.2 A)), nos da un valor diferente al obtenido de la relación:

$$\Delta E = I - AE \quad \text{donde:}$$

I = Pot. de ionización
AE = Afinidad electrónica

Esto se hace simplemente para poder establecer una comparación entre los resultados provenientes únicamente del modelo y del valor ΔE , y los obtenidos con este mismo modelo pero utilizando parámetros de potenciales más realistas y por lo tanto, menos escuetos que los de Gillen y Hickman.

2.3 RESULTADOS.

Con los datos proporcionados para los tres sistemas por estos dos programas, se construyeron las gráficas $\chi(b)$ vs. b e $I(\theta)\text{sen}\theta$ vs. $E'\theta$.

El objeto de la escala $\chi = E'\theta$, fue tener una gráfica de la sección diferencial menos dependiente de la energía de colisión. Esto se basa en dos hechos; uno de ellos es que en la dispersión elástica χ es sólo dependiente -en primera aproximación- del parámetro de impacto y no de la energía; el otro, es que ΔE es pequeña comparada con E' , lo que significa que "casi" se tiene una colisión elástica y por lo tanto, una sección diferencial aproximadamente independiente de la energía ([2] y [14]).

Como puede observarse en las gráficas Ib, IIb, IIc y IIIb, la rama covalente de $\chi(b)$ es muy "plana" comparada con la rama iónica. Los valores que asume χ para la primera están dentro del intervalo $[\chi^*, 0]$ (ver Tabla 1), mientras que los de la segunda se encuentran en $[-\Pi, \chi^*]$. Lo que nos dice esto, es que -si suponemos una distribución uniforme para los parámetros de impacto de las partículas incidentes- habrá el mismo número de partículas dispersadas en el intervalo $[\chi^*, 0]$ que en $[-\Pi, \chi^*]$, y por lo tanto, el pico covalente -que es el que está situado a ángulos (absolutos) pequeños- será mayor que el iónico. Precisamente esto es lo que se observa en las gráficas Id, If, IIf, IIId, IIIf y IIIh.

Los datos experimentales con los que se efectuaron las comparaciones, fueron tomados de las referencias [2] y [23]

Para Na + I, [4], [4]' y [4]" para H(ls) + Cs, y [3] y [15] para H+ + Hg. Como no hubo necesidad de transformar ninguna cantidad del sistema CI al de Laboratorio, -ésto lo justificamos en la sección 1.2 B)- simplemente nos limitamos a dar la forma adecuada ($\chi(b)$ vs. b e $I(\theta)$ vs. $E'(\theta)$) a los resultados experimentales.

Cada una de las secciones diferenciales fue graficada en un sistema de unidades arbitrario, independiente de los demás.

Dado que no conocemos ni el sistema de unidades arbitrarias usadas en algunos de los experimentos, ni los factores de normalización para la sección diferencial (más concretamente, de la señal detectada) empleados en las referencias [4]' y [4]" y que nuestra comparación será puramente cualitativa, vamos a fijar arbitrariamente -en el caso de Hg + H+ - el valor del máximo covalente obtenido con el modelo, igual al valor del correspondiente pico experimental. En el caso de Cs + H(ls), igualaremos los valores de los máximos intermedios. Esto permitirá determinar más fácilmente los corrimientos relativos en los puntos críticos, así como el ensanchamiento relativo en los picos, información que será valiosa en el momento de elaborar las conclusiones sobre el modelo.

A continuación describiremos para cada sistema los resultados de dichas comparaciones.

Sistema Na + I .

En éste, además de comparar la sección diferencial de nuestro modelo con la experimental, vamos a comparar los potenciales y funciones de deflexión con los del modelo propuesto por Delvigne y Los ([2] y [24]). Como la sección diferencial de éste concuerda bastante bien con el experimento, nos servirá como guía en nuestro intento para determinar el origen del máximo secundario.

La gráfica Ib (curva con línea punteada), muestra la función de deflexión calculada clásicamente por Delvigne y Los a partir de los potenciales:

$$V_{ion}(R) = - \frac{e^2}{R} - \frac{e^2(\alpha_{Na} + \alpha_I)}{2R^4} - \frac{2e^2(\alpha_{Na}\alpha_I)}{R^7} - \frac{C_{ion}}{R^6} + \\ + V_{ion} \exp(-R/\rho_{ion}) + \Delta E$$

que es un potencial de Rittner [2] con parámetros:

$$\alpha_{Na} = 0.408 \text{ \AA}^3$$

$$A_{ion} = 1913.6 \text{ eV}$$

$$\alpha_{I} = 6.431 \text{ \AA}^3$$

$$\rho_{ion} = 0.3489 \text{ \AA}$$

$$C_{ion} = 11.3 \text{ eV \AA}^6$$

$$\Delta E = 2.075 \text{ eV}$$

Y

$$V_{cov}(R) = - \frac{C_{cov}}{R^6} + A_{cov} \exp(-R/\rho_{cov})$$

que es simplemente la suma de un término de Van der Waals y de un término repulsivo, con parámetros:

$$C_{cov} = 1000 \text{ eV \AA}^6$$

$$A_{cov} = 3150 \text{ eV}$$

$$\rho_{cov} = 0.435 \text{ \AA}$$

Claramente las ramas covalente y iónica de la función de deflexión "a la Gillen" (línea continua), se asemejan a la parte atractiva de sus correspondientes en esta función de deflexión. Esto es consecuencia del parecido entre las secciones atractivas de los potenciales antes descritos y los propuestos en el modelo que estamos estudiando, especialmente para la zona de parámetros de impacto mayores que $10\alpha_0$.

Como puede verse de las gráficas I_c , I_d , I_e , I_f y de la Tabla II, la posición de los máximos covalentes ($\tau \sim 25$ eV-grad), de los mínimos ($\tau \sim 65$ eV-grad) y del máximo secundario en el caso $E' = 38.7$ eV ($\tau \sim 100$ eV-grad), concuerdan bastante bien con el experimento. Sin embargo no sucede lo mismo para esta última estructura en el caso de $E' = 13.1$ eV, ya que como puede observarse de la Tabla II, ésta se encuentra bastante desplazada hacia τ 's grandes. Esto se debe a que la probabilidad de seguir el canal iónico decrece a medida que b' crece hacia R_c . Como lo que esto significa es que habrá menos eventos en la distribución a medida que τ se acerque a τ_{min} (que es la correspondiente a $b'=R_c$), se tiene entonces como consecuencia un decrecimiento en la zona de ángulos menores del pico intermedio.

Con respecto al tercer máximo que presenta la sección diferencial experimental -que es el llamado arco iris iónico (ionic rainbow)- sólo diremos que no es reproducido por nuestro modelo, ya que precisamente el arco iris es un resultado del comienzo de la acción de la repulsión y en este esquema ignoramos por completo que exista una parte repulsiva en los potenciales covalente y iónico.

Por esta razón y por el hecho de que el modelo de potencial iónico fue especialmente formulado para el sistema $Na + I$ [6], el modelo de Delvigne y Los reproduce muy bien la rama iónica de la sección diferencial (ver fig.16). Sin

embargo, aquí existe una discrepancia con el modelo de Gillen en lo que respecta a la denominación de los máximos y a la explicación de su origen.

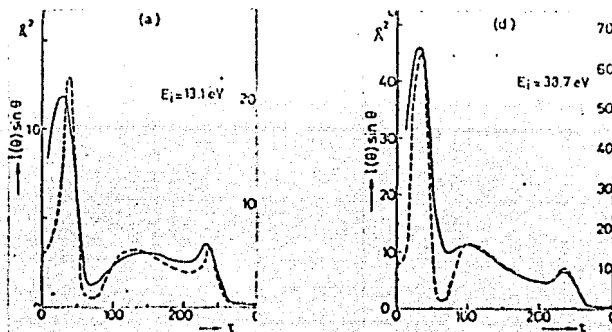


fig.16

Comparación entre las secciones diferenciales medidas (línea continua) y calculadas con el modelo de Delvigne y Los, a 13.1 y 38.7 eV.

A lo que Gillen llama máximo secundario y arco iris iónico, Delvigne le llama estructura de arco iris. Esto parece deberse a que el primero se apega más a la descripción puramente clásica de este fenómeno -la cual coincide, desde el punto de vista óptico, con la descripción de Descartes que revisaremos más adelante en el Apéndice- mientras que el segundo adopta una descripción semiclásica, en la cual ya se toma en cuenta el comportamiento ondulatorio de las partículas interactuantes. Esta descripción involucra la interferencia de las diversas trayectorias que "emergen" en la misma dirección θ , por lo cual el máximo secundario pasa también a formar parte de la estructura de arco iris.

Sistema H(1s) + Cs.

Al igual que en el sistema Na + I, aquí también compararemos con un modelo extra: el de Pradel, Maddarsi y Valance ([4], [4]', [4]" y [26]). Los potenciales propuestos para la interacción fueron determinados espectroscópicamente para $R < 9a_0$. Para $R > 9a_0$, la parte iónica se extendió con un potencial de Rittner y la parte covalente se extendió utilizando un potencial de Morse con parámetros $D_e = 1.81$ eV, $R_e = 4.71$ y $\beta = -0.513$.

Como puede observarse de la gráfica IIa, la parte atractiva es más intensa en los potenciales propuestos por

Pradel que en los del modelo de Gillen. Eso tiene como consecuencia que en la región de parámetros de impacto mayores que $7.5 a_0$, los ángulos de deflexión (θ) sean mayores para la rama iónica atractiva de la función de deflexión del modelo de Pradel que las correspondientes al modelo de Gillen (ver gráfica IIB).

En lo que respecta a la rama covalente atractiva de la función de deflexión, tenemos la situación opuesta, -ángulos de deflexión menores que en el modelo de Gillen- pues aquí las partículas, a pesar de tener parámetros de impacto grandes, "sienten" ya la influencia de la repulsión.

Como los valores de los ángulos de deflexión en la rama covalente atractiva del modelo de Pradel, varían mucho más rápidamente con b que en nuestro modelo, se espera que el pico covalente asociado a ellas, sea menor que el que se obtiene usando el modelo de Gillen, mientras que para el arco iris se esperaría lo contrario, pero aquí hay que tener cuidado, porque también debemos tomar en cuenta la contribución de las otras partes de la rama iónica, las cuales dan como resultado una atenuación en este máximo.

La función de deflexión calculada para $\Delta E = 2.974$ eV ($R_c = 9.74 a_0$), aparece situada en la gráfica IIB entre las curvas calculadas con el modelo de Pradel y el de Gillen a $\Delta E = 3.093$ eV. Claramente puede observarse que los valores que adquiere su rama iónica atractiva son más negativos que en el caso de $\Delta E = 3.093$ eV, y esto se debe a que las partículas -para la misma b y por lo tanto, para la misma R_0 - viajan ahora más tiempo a través del potencial Coulombiano.

A 70.2 y 80.4 eV, tenemos una buena concordancia entre las posiciones de los puntos críticos de las secciones diferenciales experimentales y las obtenidas por medio de nuestro cálculo, excepto para el máximo covalente a 70.2 eV. Esto puede deberse a la serie de transformaciones que se le hicieron a los datos experimentales para ponerlos en la forma $I(\theta)\text{sen}\theta$ vs. $E'\theta$. La concordancia entre los máximos secundarios, que son los que nos interesan, era de esperarse por la semejanza entre las ramas iónicas atractivas que ya hemos mencionado.

Sistema $H^+ + Mg$.

En este último sistema tenemos como modelo "extra" para la interacción, un potencial Ab Initio [3] para el canal de entrada ($H^+ + Mg(3s^2)$) y para el de salida simplemente una curva $-2/R$.

De los datos de la Tabla I puede verse que a medida que la energía de colisión aumenta, la rama covalente se "aplana"

cada vez más con el consecuente crecimiento del pico covalente. Esto ocasiona que el intervalo de θ 's asociado con la rama iónica se vaya ampliando más cada vez y por lo tanto, que el máximo secundario decrezca con la energía de colisión. Esto se observa perfectamente en las secciones diferenciales experimentales.

En las gráficas IIIg y h, y de la tabla II, puede observarse una buena concordancia en las tres τ 's de interés para $E' = 700$ eV. Sin embargo para 600 eV (gráficas IIIe y f) la situación cambia completamente, ya que tenemos fuertes corrimientos relativos en los tres puntos críticos. En lo que respecta a 500 eV (gráficas IIIc y d), definitivamente el mínimo no concuerda con los resultados experimentales, mientras que los máximos se apegan un poco más a éstos.

De la gráfica IIIa podemos ver que hay mayor semejanza entre el canal iónico del modelo de Gillen y el que se obtiene de la combinación del potencial Ab Initio de Olson [3] y del puramente coulombiano, que entre los canales covalentes de éstos. Se esperaría entonces que la concordancia entre el máximo secundario del experimento y de nuestro cálculo fuera mayor que para el pico covalente si estos potenciales se apegaran efectivamente al potencial real. Sin embargo la situación no es ésta, lo que refleja que no son solamente estos dos canales los que contribuyen a la formación de la sección diferencial, y que en especial, la rama iónica experimental se encuentra influenciada por la existencia de una repulsión en el potencial iónico real.

Claramente puede notarse en las gráficas IIIc,e y g, que ha medida que la energía de colisión crece, el arco iris decrece, lo cual significa que el proceso covalente puede ser más probable a mayor energía de colisión, o -de nuevo- que existen otros canales que contribuyen a la formación de la estructura de arco iris.

2.4 CONCLUSIONES.

Comparando entre sí los resultados para los máximos secundarios contenidos en la tabla II para los tres sistemas, llegamos a la conclusión de que la concordancia teoría-experimento para esta estructura, es mejor para el sistema $\text{Na} + \text{I}$ que para $\text{H}(\text{ls}) + \text{Cs}$, y a su vez la de éste es mejor que la obtenida para $\text{H}^+ + \text{Mg}$. Esto se debe a que en el primer proceso el punto de cruce R_c se encuentra más alejado (a 8.11 u.a.) de la región donde comienza la acción de la repulsión en el potencial iónico, mientras que en las otras dos reacciones se encuentra a 4.1 y 2.74 u.a. respectivamente. En segundo lugar, esta concordancia está estrechamente vinculada con la semejanza en los potenciales simples propuestos en el modelo de Gillen y los que se

obtienen a partir de datos experimentales, que como ya hemos mencionado y mostrado en las gráficas Ia, IIa y IIIa, es mayor para los casos Na + I y Hg + H+. En especial el efecto combinado de estos dos hechos se hace notar en este último sistema, en el cual a pesar de que sus potenciales son parecidísimos a los del modelo (para $R > R_c$), la cercanía de R_c a su parte repulsiva afecta enormemente los resultados.

Es evidente de todos estos resultados que la parte atractiva del potencial iónico es la causante del máximo secundario, y que las zonas repulsivas de ambos potenciales (covalente y iónico), sólo se ocupan de modificar su tamaño, posición y forma.

Para finalizar sólo diremos que el objetivo central de este trabajo ha sido desarrollar un modelo analítico simplificado que aclare -en primera aproximación- el origen del máximo secundario que se observa en las secciones diferenciales de algunos procesos de quemi-ionización. El conocimiento de un modelo así, nos ayudará a la aplicación e interpretación de una serie de modelos más complicados, entre los cuales, el de Delvigne - Los [2] y el de Ford - Wheeler modificado por Russek [29] constituyen las siguientes etapas de sofisticación.

SISTEMA	E' (eV)	ΔE (eV)	Rc (\AA)	b (\AA)	(b') (\AA)	χ^* (grad)
Na + I	13.1	2.075	13.11 (6.94 \AA)	14.30 (7.56 \AA)	13.11 (6.94 \AA)	- 4.93
Na + I	38.7	2.075	"	13.48 (7.13 \AA)	"	- 1.58
H + Cs	50.8	3.093	8.80 (4.66 \AA)	9.08 (4.80 \AA)	8.80 (4.66 \AA)	- 1.80 (107.9 ')
H + Cs	50.8	2.794	9.74 (5.15 \AA)	10.02 (5.30 \AA)	9.74 (5.15 \AA)	- 1.62 (-97.2 ')
H + Cs	70.2	3.093	8.80 (4.66 \AA)	9.00 (4.76 \AA)	8.80 (4.66 \AA)	- 1.29 (-77.5 ')
H + Cs	70.2	2.794	9.74 (5.15 \AA)	9.94 (5.26 \AA)	9.74 (5.15 \AA)	- 1.16 (-69.8 ')
H + Cs	80.4	3.093	8.80 (4.66 \AA)	8.97 (4.75 \AA)	8.80 (4.66 \AA)	- 1.12 (-67.4 ')
H + Cs	80.4	2.794	9.74 (5.154 \AA)	9.91 (5.246 \AA)	9.74 (5.154 \AA)	- 1.01 (-60.8 ')
H + Mg	500.0	8.274	6.58 (3.48 \AA)	6.63 (3.51 \AA)	6.58 (3.48 \AA)	- 0.48 (-28.7 ')
H + Mg	600.0	"	"	6.62 (3.51 \AA)	"	- 0.40 (-23.9 ')
H + Mg	700.0	"	"	6.62 (3.50 \AA)	"	- 0.34 (-20.4 ')

TABLA I

SISTEMA	Posición del máximo covalente (τ_1) (eV-grad)	Posición del mínimo (τ_{min}) (eV-grad)	Posición del máximo secundario (τ_2) (eV-grad)
Na + I 13.1 eV	28 24	70 64	147 104
Na + I 38.7 eV	30 22	73 62	98 99
H + Cs 70.2 eV	22.5 32.5	97.5 90.0	162.5 142.5
H + Cs 80.4 eV	30.0 32.5	92.5 90.0	160.0 142.5
H + Hg 500.0 eV	70 85	365 240	500 375
H + Hg 600.0 eV	65 85	340 240	540 375
H + Hg 700.0 eV	90 85	310 240	510 385

NOTA.- El primer renglón correspondiente a cada sistema, representa los valores experimentales, el segundo, los valores teóricos.

TABLA II

APENDICE I.

ANALOGIA ENTRE EL EFECTO DE ARCO IRIS OPTICO Y EL OBSERVADO EN EXPERIMENTOS DE DISPERSION DE PARTICULAS ATOMICAS [27].

Es interesante ver, como debido a la dualidad onda-partícula, algunos fenómenos macroscópicos se "repiten" a nivel microscópico.

En los capítulos anteriores hemos mencionado los ángulos y las estructuras de arco iris y de gloria, pero no hemos comentado el origen de dichas designaciones. Estas se deben a dos hechos combinados: uno de ellos es que la teoría matemática que describe esos dos efectos ópticos, también describe a las estructuras observadas en la sección diferencial de ciertos experimentos de colisiones atómicas; el segundo, -y más importante- es que la analogía entre estas estructuras, desde el punto de vista físico, es una consecuencia de dicho comportamiento dual.

Para apreciar mejor todo esto, vamos a dar una explicación a nivel óptico sobre la formación del arco iris -que es la estructura que nos interesa- y a lo largo de ésta, iremos estableciendo las similitudes con el arco iris atómico.

Esencialmente el origen de este fenómeno está estrechamente relacionado con la forma en que los rayos de luz provenientes del Sol son reflejados y refractados por las gotas de lluvia.

En la superficie de cada una de las gotas, parte de cada rayo incidente es reflejada y el resto es transmitido (refractado). Según esto, tendremos varios tipos de rayos emergiendo de la gota (ver fig. 17):

- Clase 1), los que fueron reflejados al primer contacto con la superficie de la gota,
- Clase 2), los que fueron transmitidos tanto en el primer como en el segundo contacto con la superficie de la gota,
- Clase 3), los que salen de la gota después de haber sufrido una reflexión interna,
- Clase 4), los que salen después de dos reflexiones internas dentro de la gota; etc..

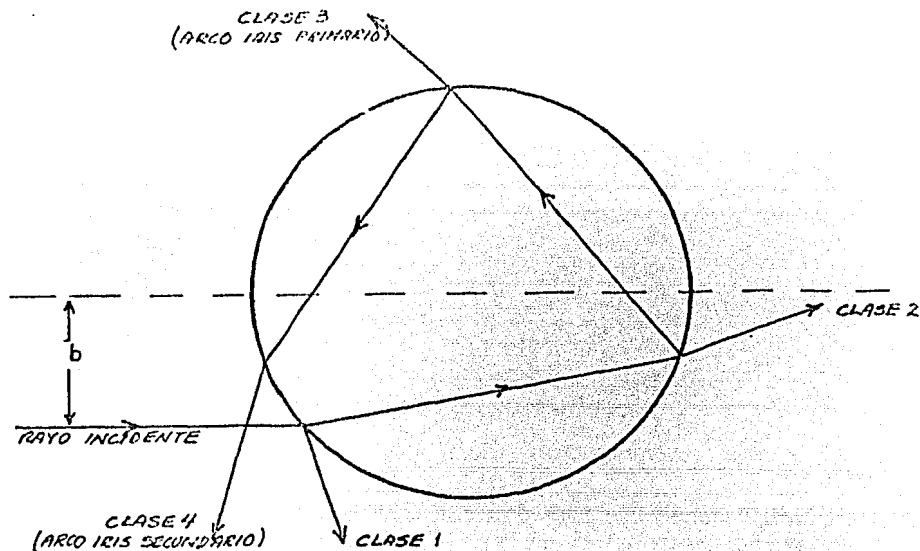


fig.17

Distintas clases de trayectorias para los rayos incidentes en una gota de agua.

Los primeros constituyen simplemente la luz reflejada por las gotas, los segundos, la luz transmitida y los de Clase 3 y 4, son los que forman los arco iris primario y secundario respectivamente.

A nivel atómico lo que tenemos en lugar de la luz incidente, es un haz de partículas proyectiles que inciden en un átomo o molécula blanco (el análogo a la gota de agua). Ahora en lugar de tener rayos que se reflejan o refractan en la frontera de la gota por efecto de un cambio en el índice de refracción, tenemos trayectorias que van deflectándose por el efecto combinado de las atracciones y las repulsiones que provoca la fuerza con que interactúan las partículas.

Las diferentes clases de rayos emergentes, corresponden en este nivel a los diferentes tipos de procesos (o canales) que siguen las partículas.

En ambos niveles la descripción matemática hace uso del parámetro de impacto, del ángulo de deflexión, de la función de deflexión y de la distribución angular de las partículas (o de la luz) dispersadas.

Como la dispersión de las partículas fue descrita en este trabajo clásicamente, la teoría óptica con que trataremos será la Cartesiana.

En ésta, para distintos valores del parámetro de impacto, se calcula cuidadosamente la trayectoria de cada rayo tomando en cuenta las diferentes reflexiones y refracciones a que es sujeto. Descarté encontre que los rayos de Clase 3 eran especialmente predominantes entre todo el conjunto, y que el comportamiento de sus deflexiones era bastante peculiar. Para $b = 0$, el rayo era dispersado a un ángulo de 130° , es decir, reflejado hacia el Sol en su segundo contacto con la superficie de la gota, mientras que para b 's mayores, el ángulo de deflexión iba decreciendo hasta llegar a un mínimo donde el comportamiento se invertía y cuyo valor (133°) correspondía al ángulo medido anteriormente para el arco iris por Roger Bacon (ángulo entre la dirección final e inicial del rayo). Como las gotas se encuentran uniformemente iluminadas por el Sol, esto significa que la distribución de los parámetros de impacto es uniforme y por lo tanto, se espera una mayor concentración de luz dispersada en aquellos lugares donde el ángulo de deflexión varíe más lentamente con b , es decir, en las regiones que circunden a un máximo o a un mínimo. Esta es la razón por la cual la estructura de arco iris resalta sobre el resto de la distribución de luz dispersada.

Hasta ahora no hemos mencionado nada sobre los colores del arco iris. Estos surgen cuando tomamos en cuenta la dependencia en la longitud de onda del índice de refracción, lo que ocasiona que cada color tenga un valor particular para su ángulo de deflexión mínimo y por lo tanto, que el arco iris, tal y como lo conocemos, ocupe un cierto intervalo angular en el espacio. Esto se refleja a nivel microscópico como una dependencia en la energía tanto de la función de deflexión, como de la sección diferencial.

Con respecto al arco secundario, solamente mencionaremos que es producido por los rayos de Clase 4, de una manera muy semejante a la que acabamos de mencionar, sólo que éste se distingue por localizarse a ángulos menores (130°), por tener los colores invertidos, la función de deflexión "invertida" (para $b=0$, $\theta=0$ y va creciendo hasta alcanzar un máximo, después del cual decrece) y por ser más tenue. Además entre esta estructura y el arco iris primario, se presenta una región donde la intensidad luminosa decrece considerablemente -la zona oscura de Alexander- que es el resultado de la ausencia de rayos de Clase 3 y 4 en la región comprendida entre los 130 y 133° (ver fig.18).

Todas estas peculiaridades se reflejan a nivel atómico como una serie de máximos y mínimos relativos en la sección diferencial.

Algunas veces -tanto macroscópica como microscópicamente- aparecen junto al arco iris otras estructuras llamadas arcos supernumerarios. Estas se presentan generalmente en su parte interna superior, y constituyen una manifestación de la naturaleza ondulatoria de la luz. Por esta razón, no pueden ser descritas por la teoría de Descartes y sólo comentaremos que la búsqueda de una explicación satisfactoria para ellas, desembocó en una de las descripciones más completas y satisfactorias de la Física : la teoría del arco iris.

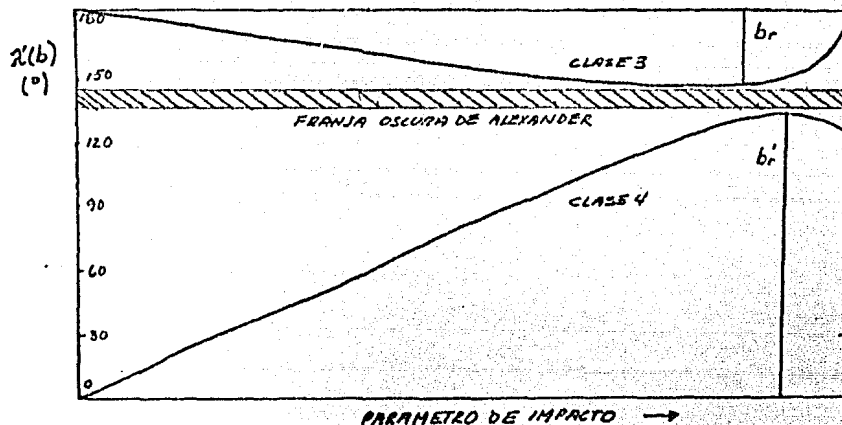
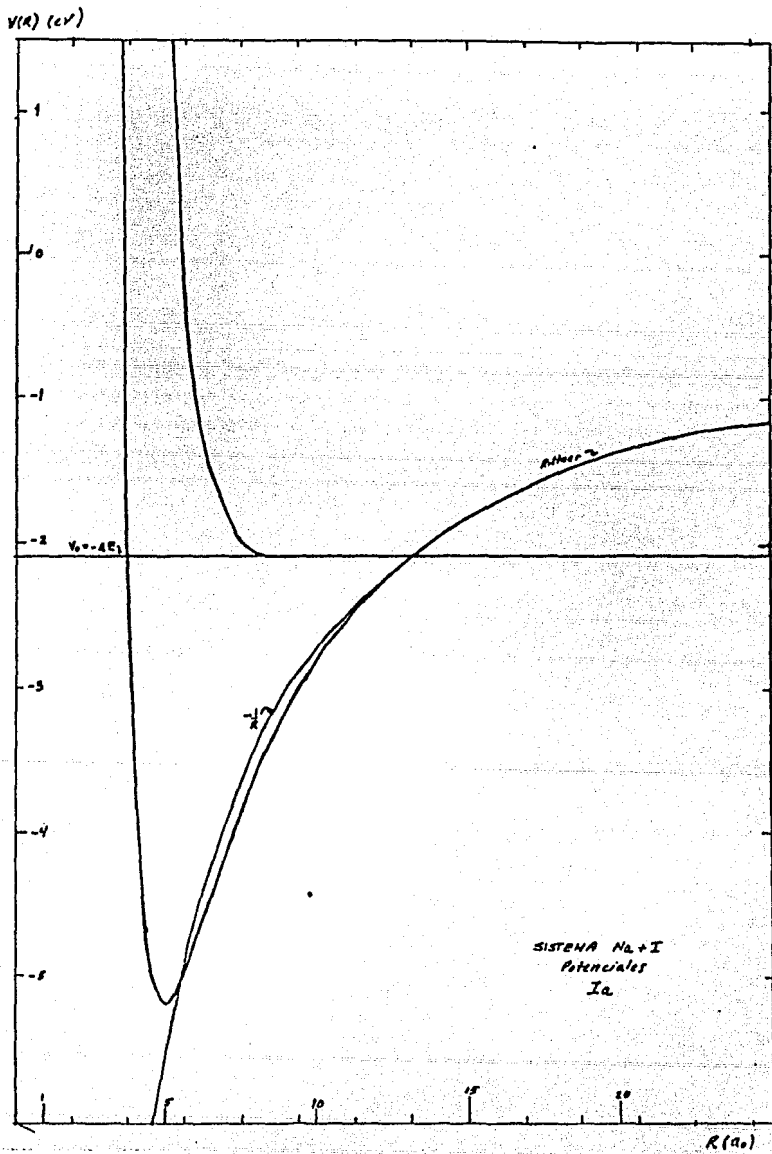


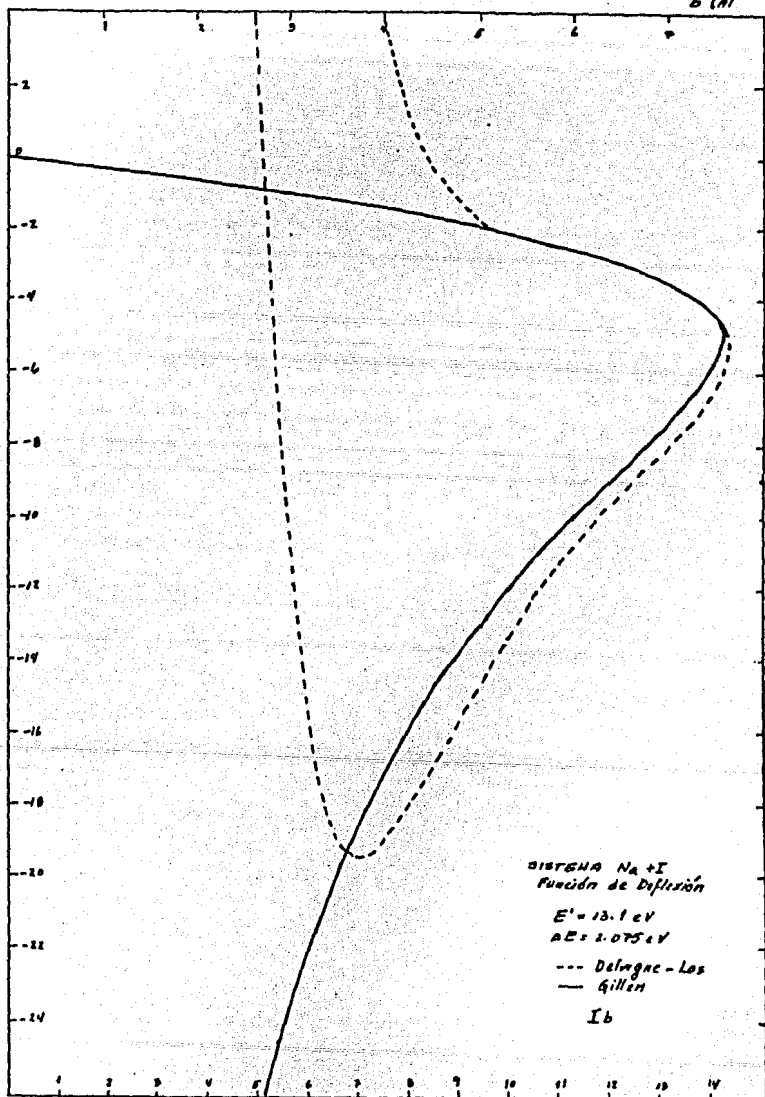
fig.18

Función de Deflexión para los arco iris primario y secundario. La región intermedia es conocida como la zona de Alexander.

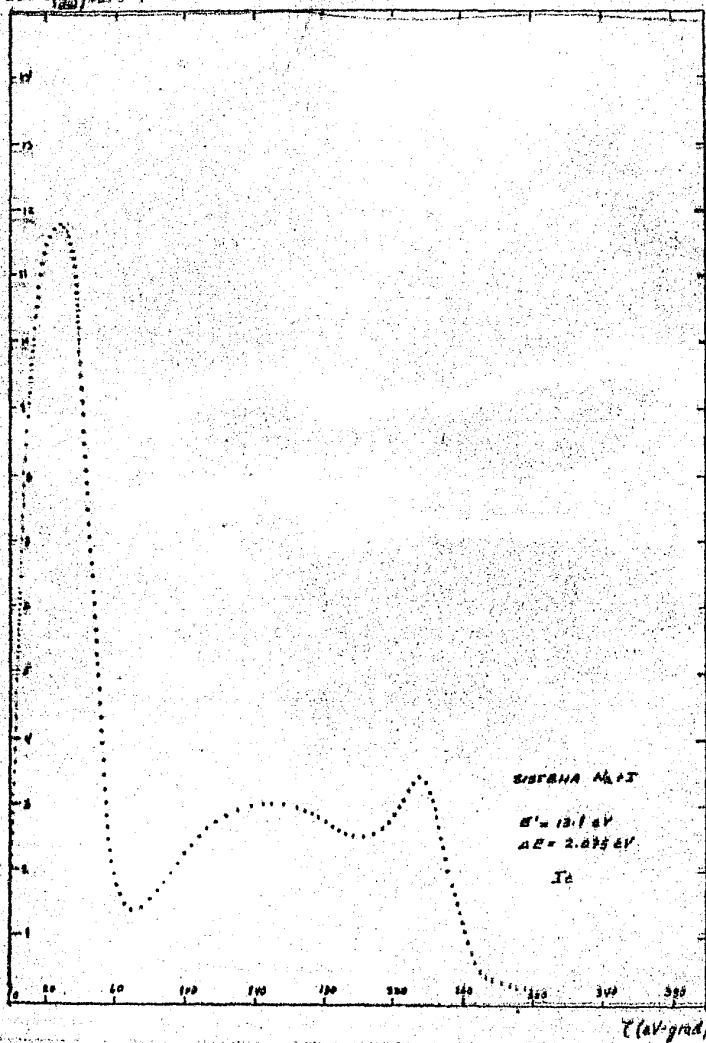
APENDICE II. PROGRAMAS UTILIZADOS.

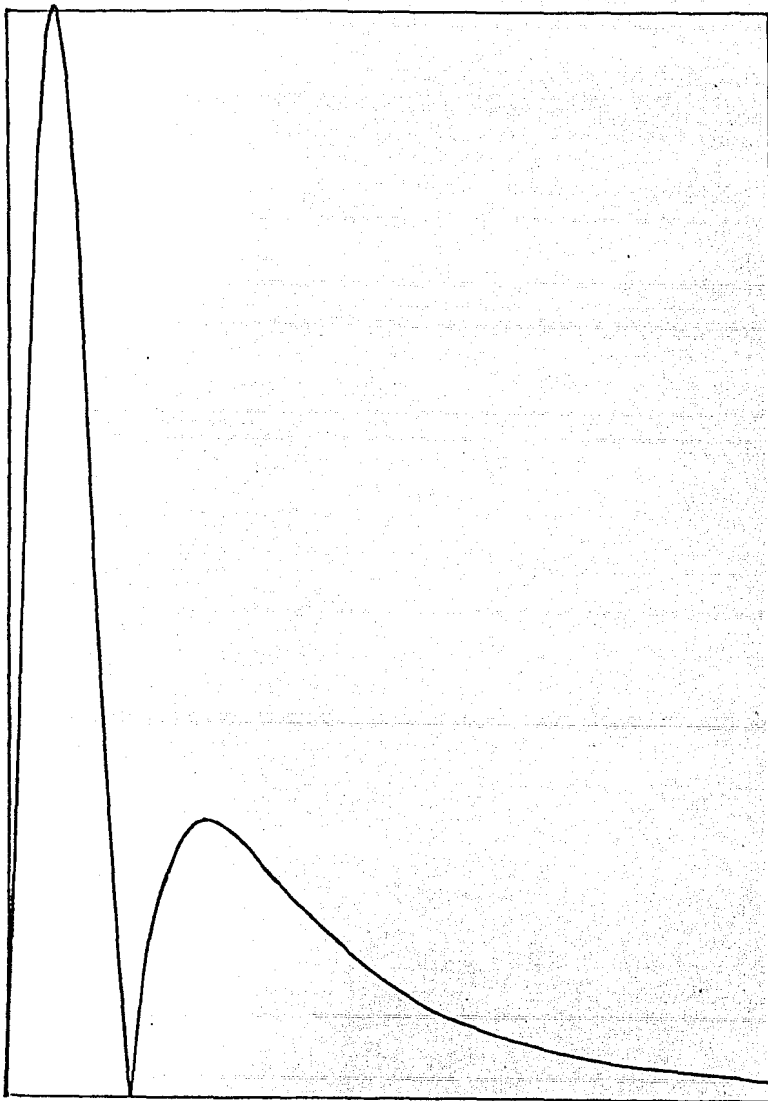
APENDICE III. GRAFICAS



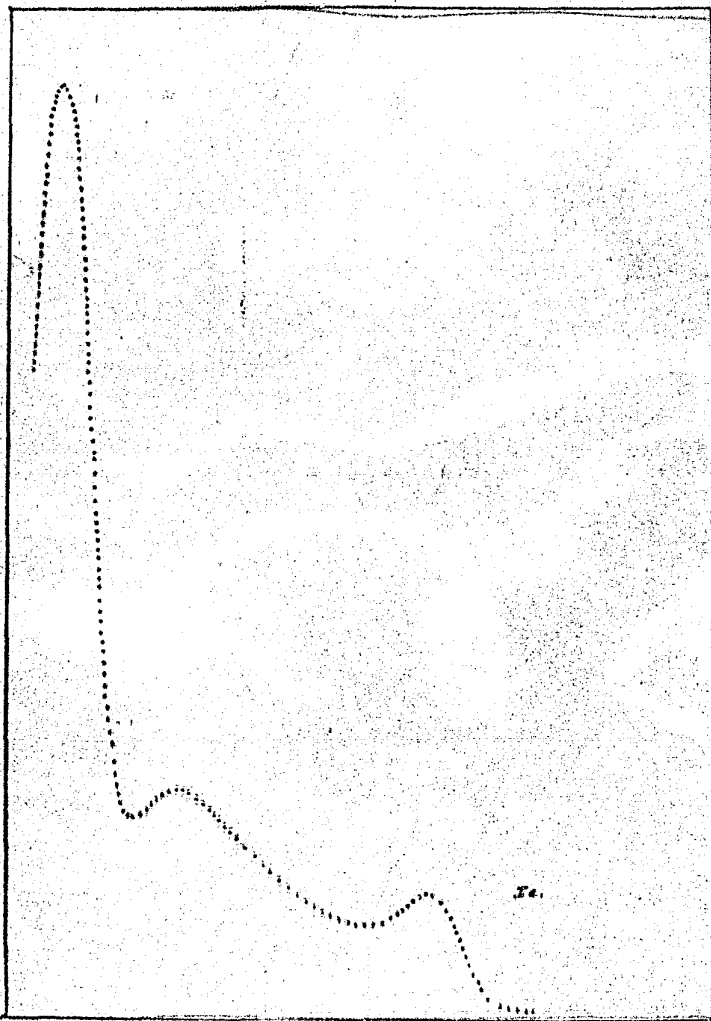
$\chi(b)$ (grau) b (Å) b (Å)

2000 $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{TOT}} \theta$ (in arbitrary)



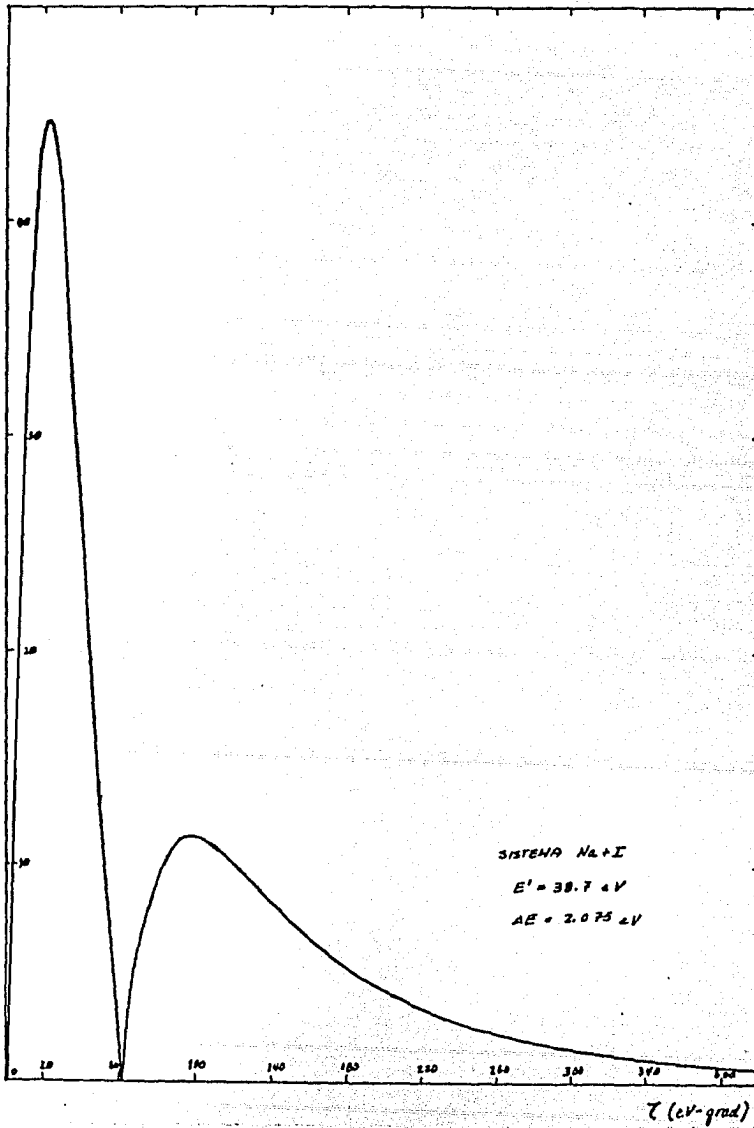


I_d

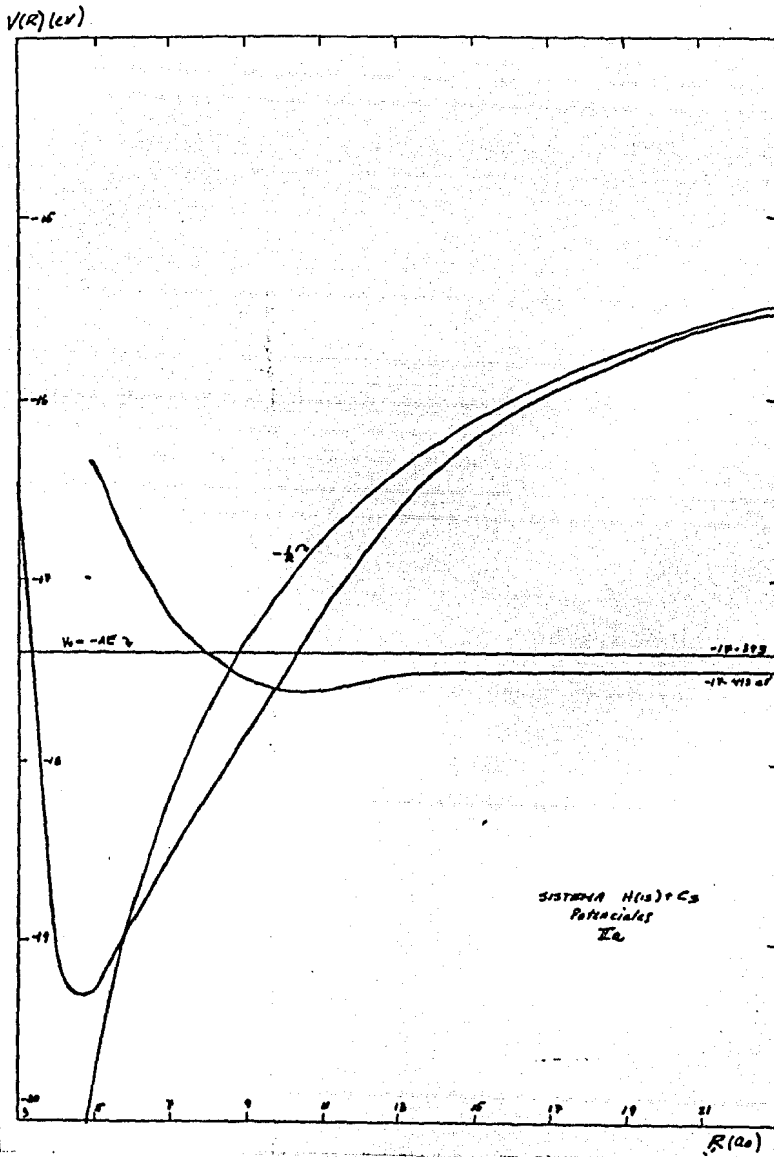


=" Fe "

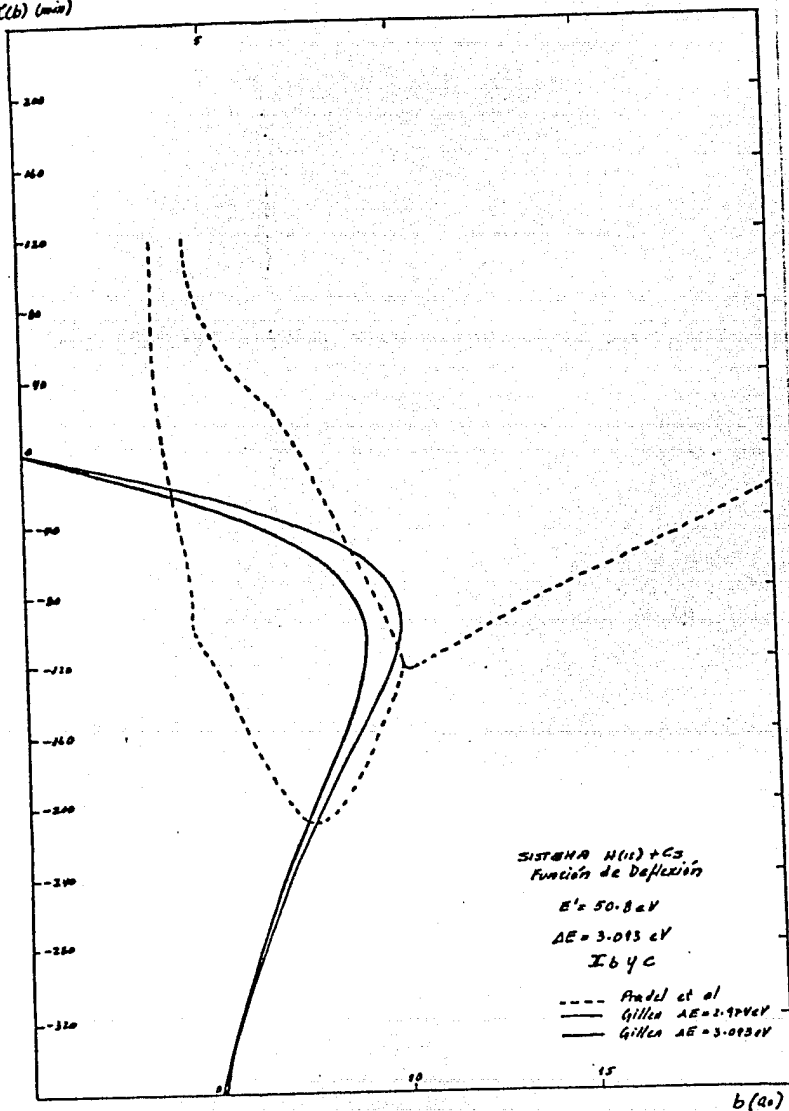
$$SDD = \left(\frac{dI}{I d\tau} \right) \sin \theta \text{ (un. arbitrias)}$$



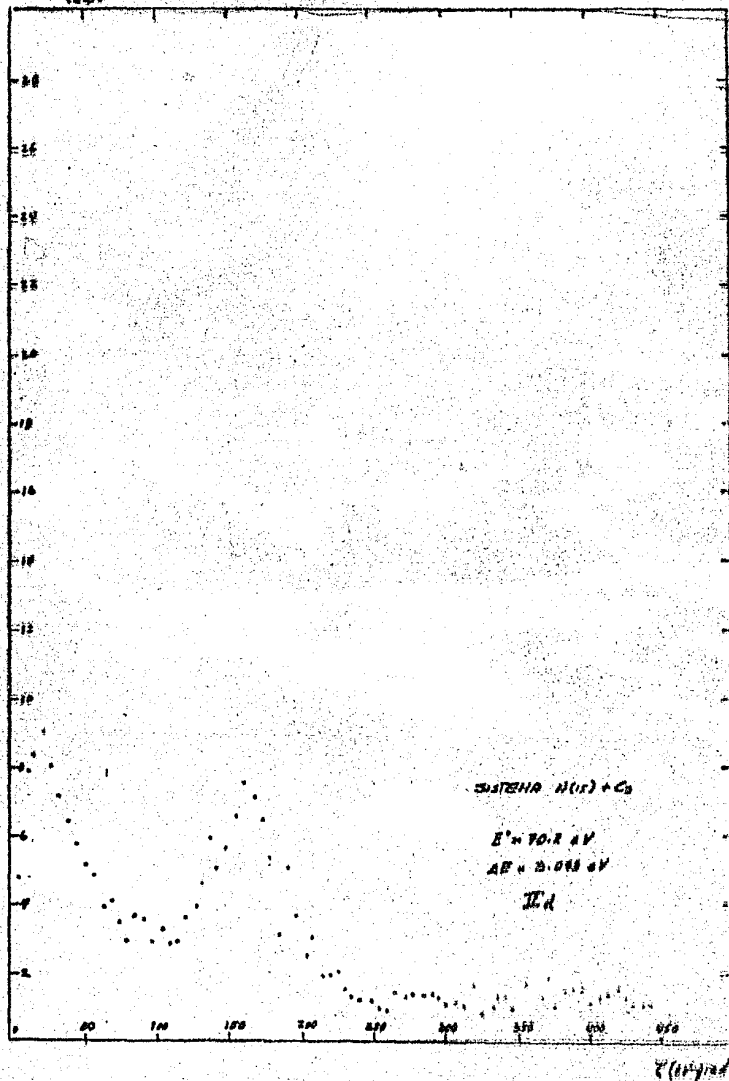
I.f.

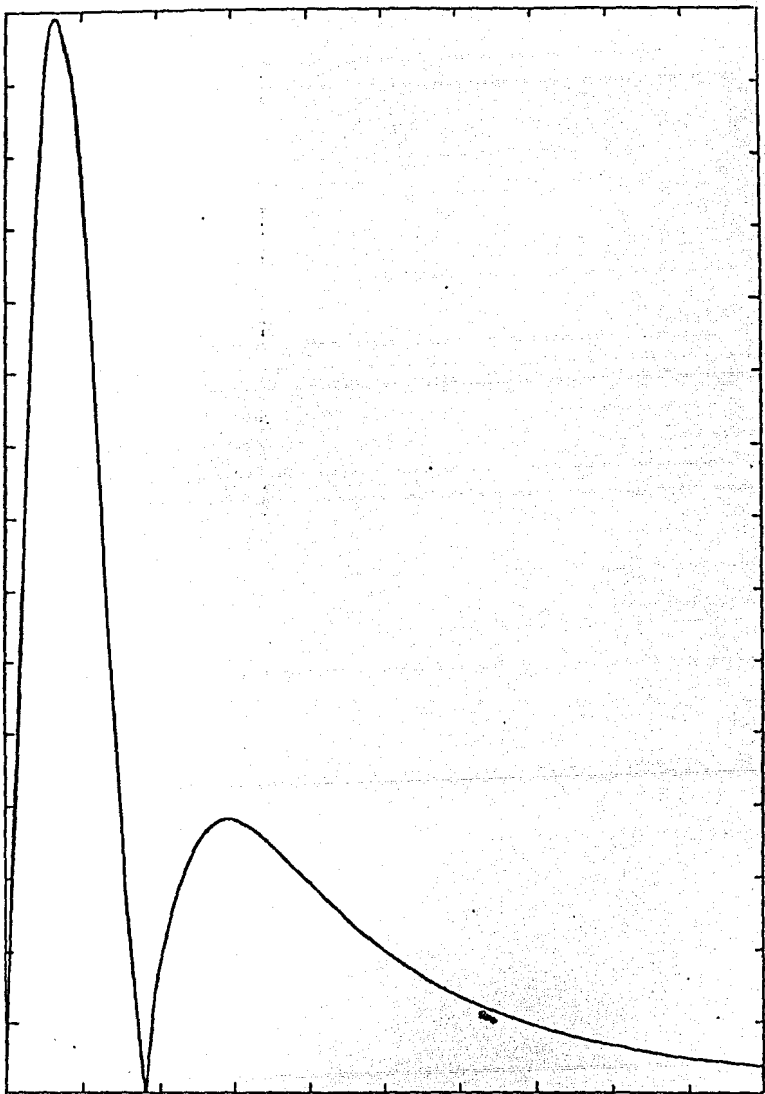


$\chi(b)$ (m.u.)



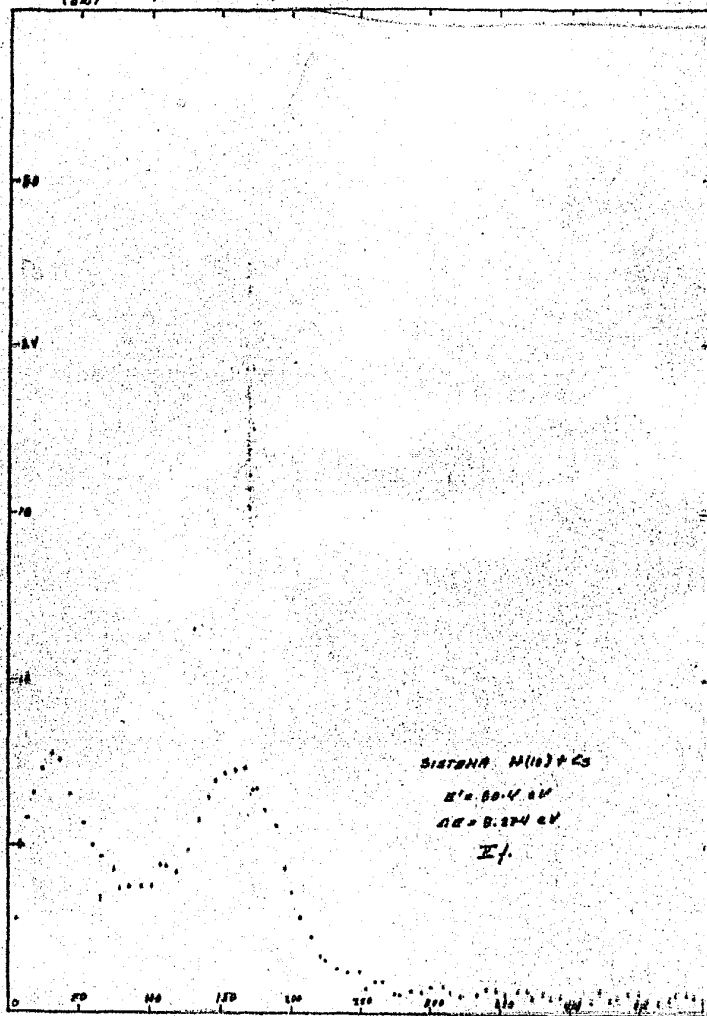
$EDD = \left(\frac{dE}{d\Omega}\right) \sin\theta$ (in arbitrary)





πe

$500 = \left(\frac{dE}{d\Omega}\right) \sin\theta$ (un arbitrarie)



θ (in grad)

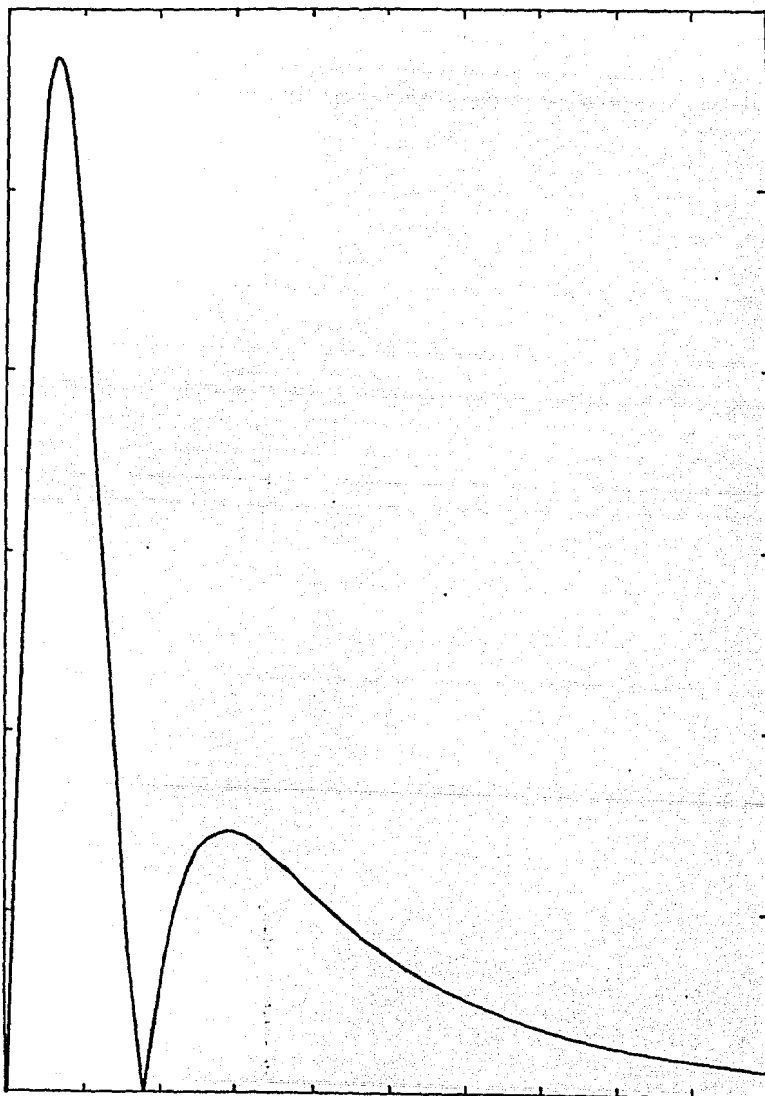
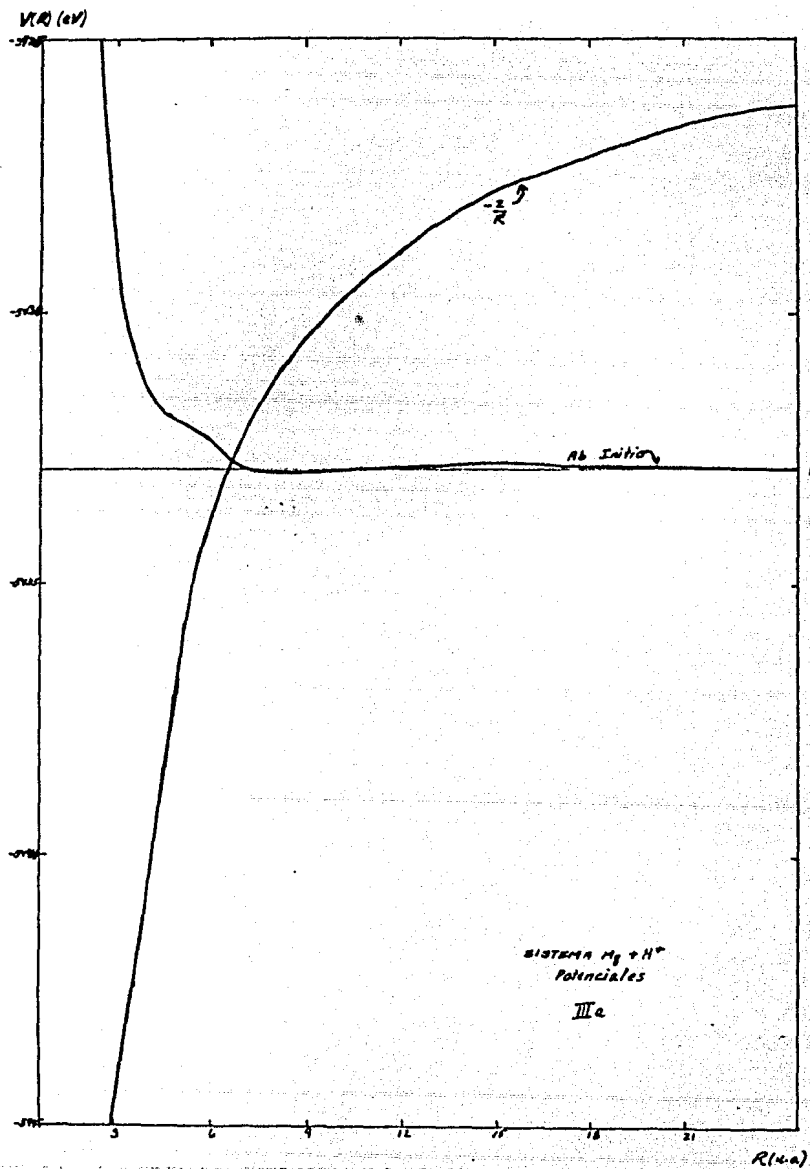
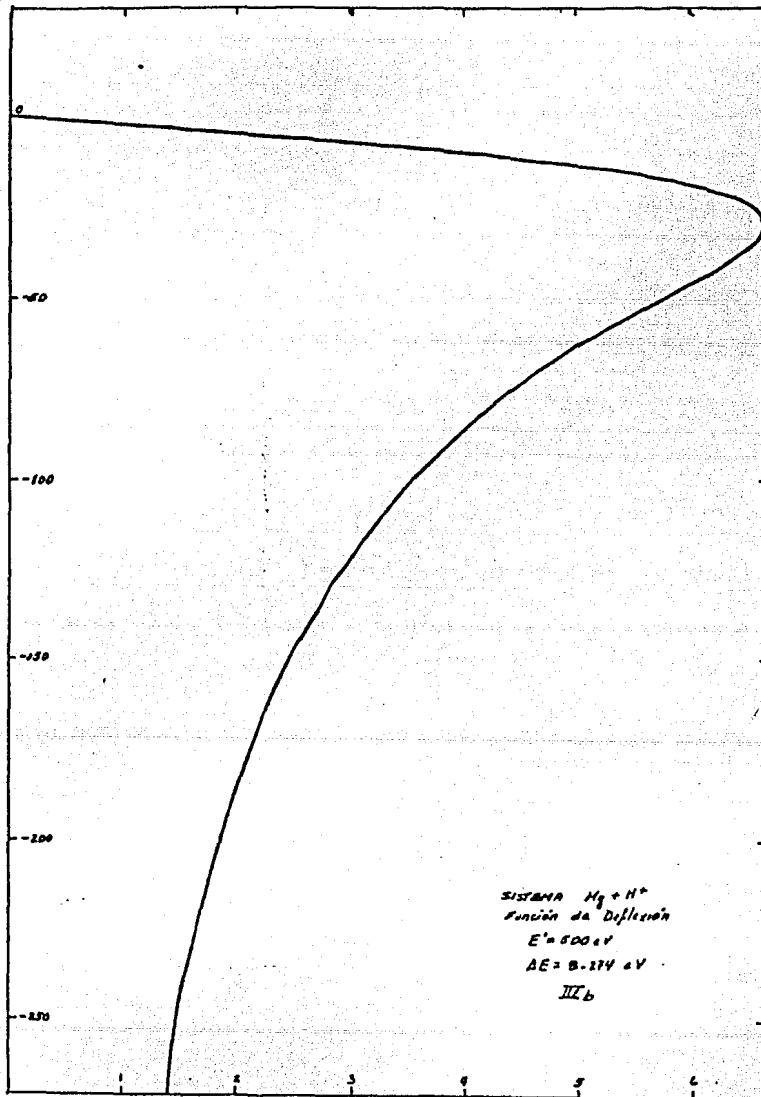


Fig.

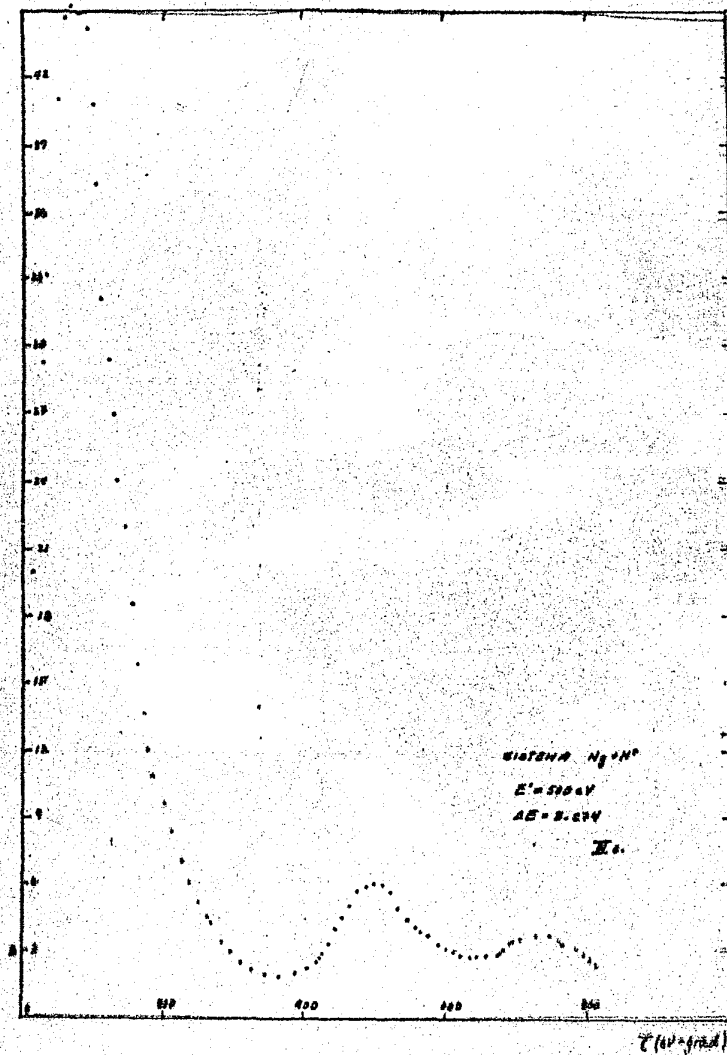


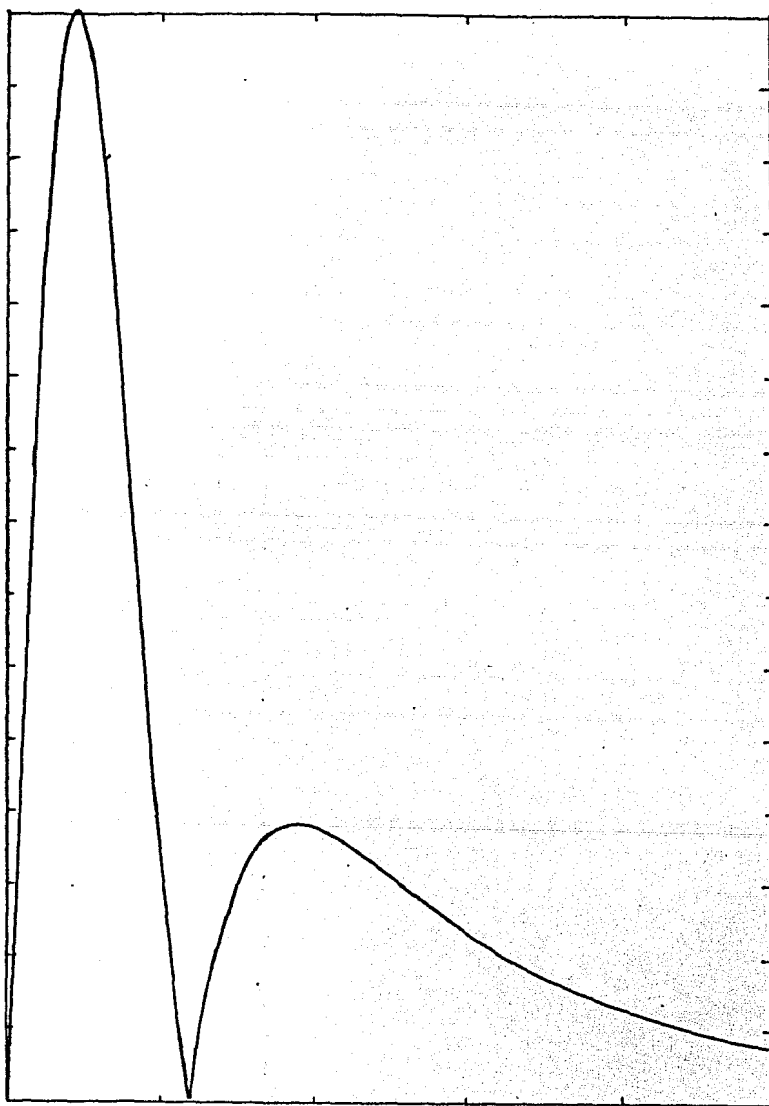
$Z(b)$ (mV)



$b(a)$

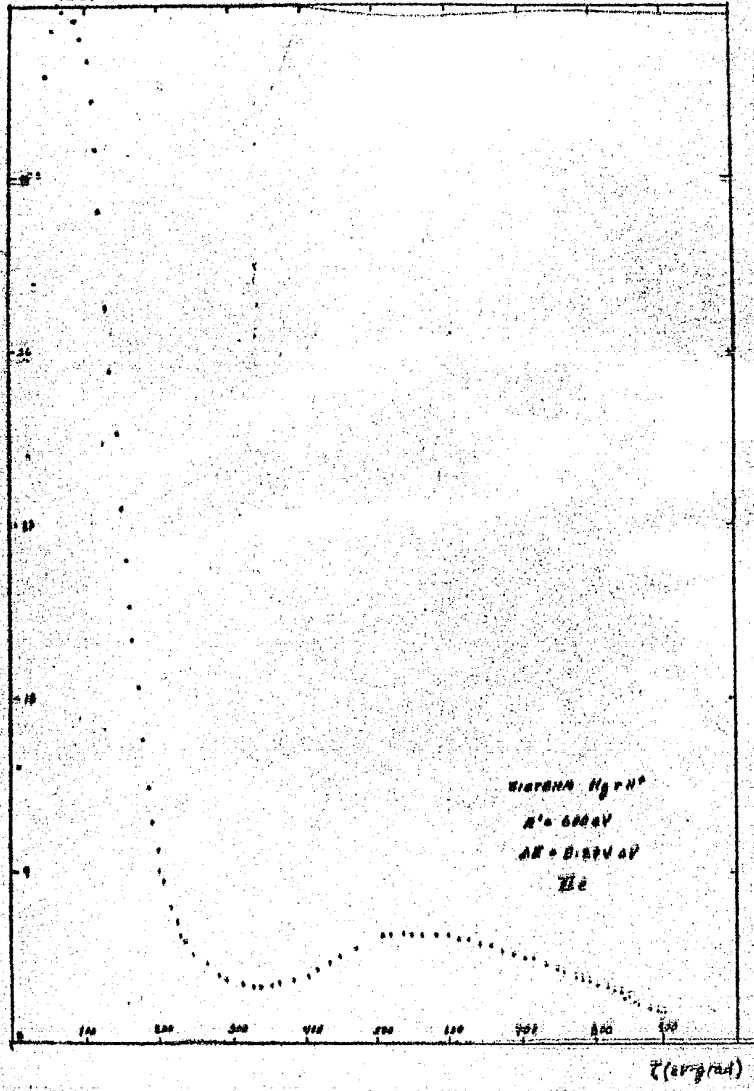
$\Delta D D = \left(\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} \right) \Delta \lambda \text{ (in } \mu\text{m)}$

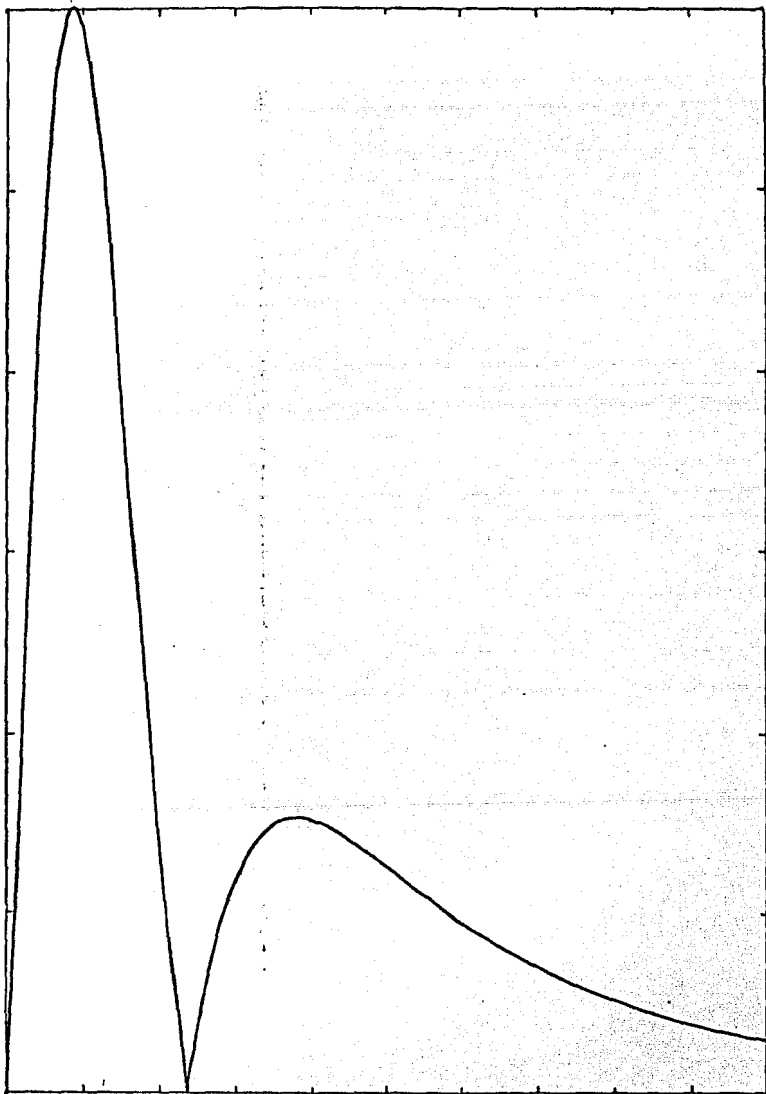




III d

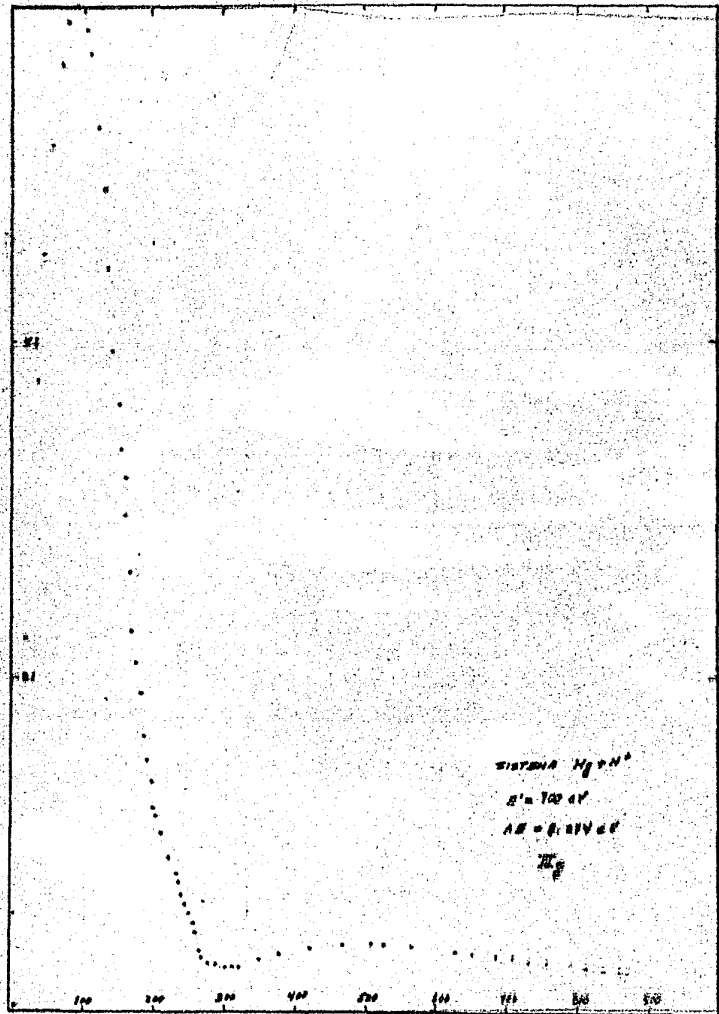
$\sigma_{00} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=0}$ (un. arbitrary)





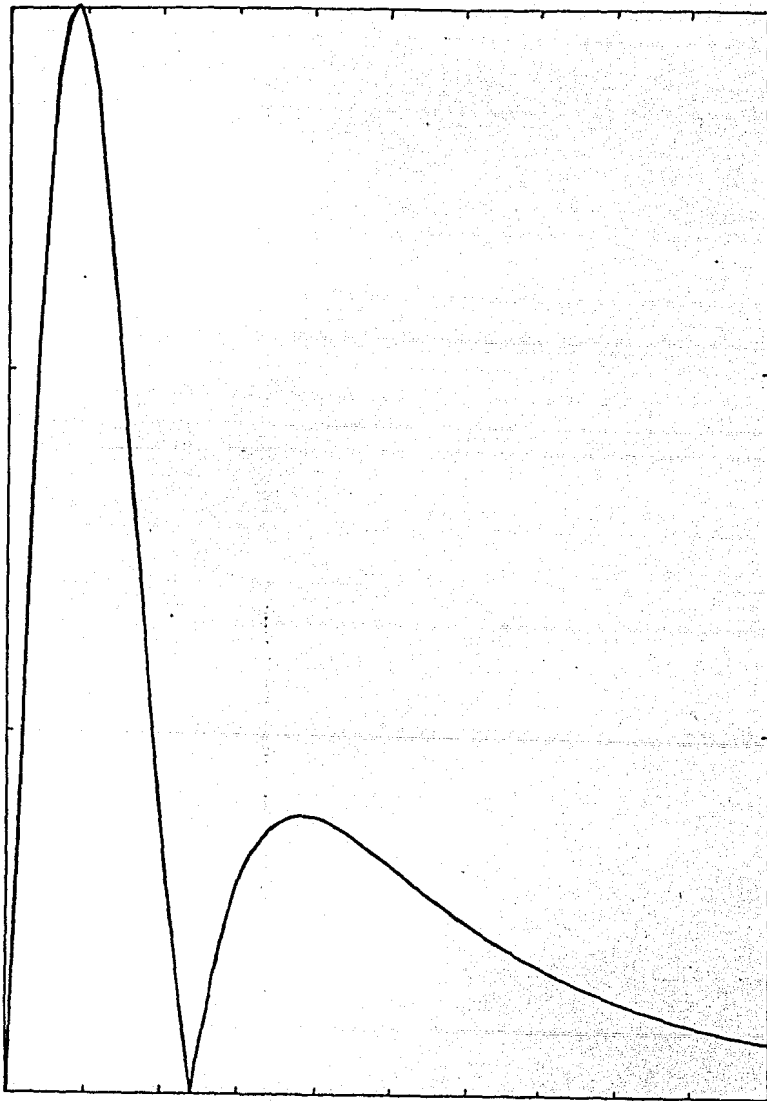
III f.

$$a(\theta) = \left(\frac{dI}{d\Omega}\right) \sin\theta \text{ (an arbitrary)}$$



SISTEMA $Mg + N^+$
 $E' = 100 \text{ eV}$
 $\Delta E = 0.014 \text{ eV}$
 $\frac{dI}{d\Omega}$

θ (in grad)



III h.

BIBLIOGRAFIA.

- [1] Pauly H., Toennies J.P.
The Study of Intermolecular Potentials with Molecular Beams at Thermal Energies.
Advances in atomic and molecular Physics, Bates D.R., Editor, Vol. 1, pp. 195-337 (1965) Academic Press N.Y.
- [2] Delvigne G.A.L., Los J.
Rainbow, Stueckelberg Oscillations and Rotational Coupling on the Differential Cross Section of $\text{Na} + \text{I} \rightarrow \text{Na} + \text{I}$.
Physica (Neth.) 67, 166-196 (1973).
- [3] Olson R.E., Liu B.
Potential Energies and Cross Sections for MgH^+ .
Phys. Rev. A20, 1366-1371 (1979).
- [4] Valance A., El Maddarsi M.
Differential Cross Section Calculation for Elastic Scattering of $\text{H}(1s)$ on Cs and Inelastic Scattering Via $\text{H}^- + \text{Cs}^+$ at 50 eV.
XIth. International Conference in the Physics of Electronic and Atomic Collisions. Kyoto. Takayanagi R. & Oda H. Eds. (1979), pp. 518-519.
- [4]' Pradel P., El Maddarsi M.
Differential Electron Attachment Cross Sections for $\text{H}(1s)$ Colliding with a Cesium Vapour Target.
XIth. International Conference in the Physics of Electronic and Atomic Collisions. Kyoto. Takayanagi R. & Oda H. Eds. (1979), pp. 524-525.
- [4]" Pradel P., El Maddarsi M., Valance A.
Differential Electron Attachment and Elastic Scattering of Atomic Hydrogen Colliding with a Cesium Vapor Target.
Chem. Phys. Lett. 71, 55-58 (1980).
- [5] Morse P.M.
Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics.
II. Vibrational Levels.
Phys. Rev. 34, 57-65 (1929).

- [6] Rittner E.S.
Binding Energy and Dipole Moment of Alkali Halide Molecules.
J. Chem. Phys. 19, 1030-1035 (1951).
- [7] Delvigne G.A.L., Los J.
Numerical Calculation of the Classical Deflection Function.
Physica (Neth.) 63, 339-350 (1973).
- [8] Hauser W.
Introduction to the Principles of Mechanics.
1st. Ed., Addison Wesley, Mass. (1966),
Caps. 7 y 8.
- [9] Landau L.D., Lifshitz E.M.
Física Teórica, Mecánica.
Vol.1. 2a. Ed., Reverte, Barcelona (1978),
Caps. 14, 17 y 18.
- [10] Evans R.D.
The Atomic Nucleus.
1st.Ed., Mc.Graw-Hill, N.Y. (1955),
Cap. 10.
- [11] Massey H.
Atomic and Molecular Collisions.
1st.Ed., Oxford University Press (1980).
Caps. 1 y 2.
- [12] Castillo Animas A.
Determinación de Potenciales Interatómicos a partir de Datos de Colisiones.
Tesis Profesional UNAM (1979).
Cap.II.
- [13] Lara Espinosa J.A.
Verificación Experimental de la Sección Transversal de Rutherford, para Energías entre 200 y 700 keV.
Tesis Profesional UNAM (1976).
Cap.III.
- [14] Levine R.D., Bernstein R.B.
Molecular Reaction Dynamics.
1st. Ed., Oxford University Press (1974).
Caps.2 y 3.

- [15] Alvarez I., Cisneros C., Russek A.
Angular Distributions for H- Formation in Single
Collisions of H+ on Hg.
Phys. Rev. A26, 77-84 (1982).
- [16] Pauly H.
Atom-Molecule Collision Theory. A guide for the
experimentalist.
Ed. Bernstein R.B.
Plenum Press, N.Y. (1979).
Cap. 4.
- [17] Díaz Peña H.
Fuerzas Intermoleculares.
Monografía #19, Serie de Química.
1a. Ed., Secretaría General de la OEA (1979).
Caps. 1 y 2.
- [18] Peña L. de la .
Introducción a la Mecánica Cuántica.
2a. Ed., CECSA, Mexico (1980).
Cap. 20.
- [19] Pilar F.L.
Elementary Quantum Chemistry.
1st. Ed., Mc.Graw-Hill, N.Y. (1968).
Caps. 10, 15 y 16.
- [20] Abramowitz M., Stegun I.
Handbook of Mathematical Functions.
9th. Ed., Dover, N.Y. (1970).
Cap. 4.
- [21] Los J., Kleyn A.W.
Alkali Halide Vapors, Structure, Spectra and Reaction
Dynamics.
Editors Davidovits P. and McFadden D.L.
Academic Press, N.Y. (1979).
Cap. 8.
- [22] Smith K.
Scattering Theory. Atom-Atom Scattering.
Editor Barut A.O.
Gordon and Breach, N.Y. (1969), pp. 249-309.
- [23] Gillen K.T., Hickman A.P.
Schematic Model for the Differential Cross Section in
Ion-Pair Formation.
Chem. Phys. (Neth.) 53, 383-387 (1980).

- [24] Delvigne G.A.J., Los J.
The Differential Cross-Section for Chemi-Ionization in
Alkali Atom- Halogen Molecule Collisions. Classical
Interpretation.
Physica (Neth.) 59, 61-76 (1972).
- [25] Baede A.P.M.
Molecular Scattering. Physical and Chemical Applications.
Advances in Chemical Physics, Editor Lawley K.P. (Series
Editors Prigogine I., Rice S.A.)
Vol. XXX., 463-531 (1977) Wiley, Interscience, N.Y.
- [26] Valance A., El Maddarsi M.
Application of Semiclassical Theory of Inelastic
Scattering.
Chem. Phys. Lett. 63, 247-250 (1979).
- [27] Nussenzveig H.M.
The Theory of the Rainbow.
Sci. Am. 236, 116-127 (1977).
- [28] American Institute of Physics Handbook.
Mc.Graw-Hill, N.Y. (1957).
- [29] Russek A.
Phys. Rev. A20, 113-120 (1979).

FE DE ERRATAS.

Página	Dice:	Debe decir:
iii	PCCBBC.	PCCEUC.
44	línea 440	líneas 435 y 450
59	00180 FOR I=1 TO 6	00180 FOR I=1 TO 8
59	00200 DATA 13.1, 38.7,50.8,68.3, 50.8,68.3	00200 DATA 13.1, 38.7,50.8,70.2, 80.4,50.8,70.2, 80.4
61	00180 FOR I=1 TO 5	00180 FOR I=1 TO 3
61	00200 DATA 1000.0, 2000.0,3000.0, 4000.0,5000.0	0200 DATA 500.0, 600.0,700.0