

29
38



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**DOS TRATAMIENTOS ALTERNATIVOS PARA DESCRIBIR
RESONANCIAS ATOMICAS Y SU EQUIVALENCIA FORMAL**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE :

F I S I C O

P R E S E N T A :

AGUSTIN FEDERICO RAMOS O'REILLY



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

CONTENIDO

- Introducción	1
- Autoionización - Interacción de configuraciones (formalismo de Fano)	10
- Resonancias en teoría de dispersión formal (formalismo de Feshbach)	22
- Equivalencia	36
- Conclusión y comentario	53
- Apéndice A	54
- Apéndice B	59
- Referencias	60

INTRODUCCION

Este trabajo fué propuesto por el Laboratorio de Física - Atómica y Molecular de la Facultad de Ciencias. Su fin es el de complementar a la herramienta teórica con la que se soportan los experimentos que ahí se realizan.

Los fenómenos físicos centrales en la discusión son el fenómeno de autoionización y las resonancias atómicas. Entonces para comenzar ésta introducción se hablará primero de lo que se entiende por resonancias atómicas y luego se hablará sobre la autoionización.

El sistema físico en el que se está pensando para las resonancias es un átomo (blanco) sobre el que incidirá un electrón (proyectil). La resonancia es el "amarre" temporal del proyectil al blanco. O en palabras de Bohr : "un proyectil disparado contra un sistema de muchos cuerpos puede transferir parte de su energía a las partículas del sistema (blanco) de tal forma que su energía restante no sea suficiente para escapar del sistema. Un estado ligado temporal se forma hasta que una fluctuación ocasional concentre la suficiente energía para permitir que una partícula escape. La variedad de resonancias viene del gran número de estados de excitación disponibles para las partículas del blanco."

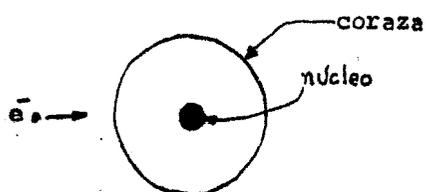
Con pocas excepciones todas las resonancias observadas en la sección elástica e inelástica se asocian con estados excitados del átomo blanco.

Varios autores atribuyen éstas resonancias a la formación de un "compuesto" electrón-átomo de vida corta que contiene dos o más electrones excitados. A estos estados compuestos se les

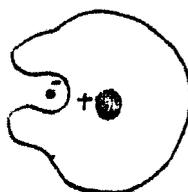
llama estados resonantes de coraza excitada. Cualitativamente, la formación de tales compuestos puede visualizarse de la siguiente manera : el electrón proyectil se acerca al blanco con tal ímpetu que "golpea" a uno ó más de los electrones del átomo, de tal forma que los "arroja" a un nivel excitado; esto reduce el apantallamiento del núcleo sobre el electrón proyectil que entonces "vé" una pequeña carga positiva que lo atrae para formar un estado ligado (el ión negativo) por un período de tiempo muy corto.

Tal ión negativo decae via "autoionización" dejando a un blanco más un electrón dispersado.

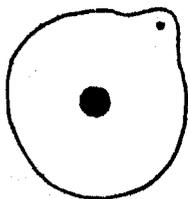
Esquemáticamente*:



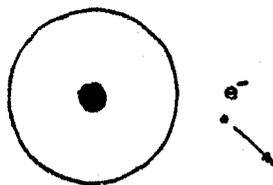
1. Atomo blanco



2. Colisión



3. "Compuesto"



4. Atomo y e dispersado

Fig 1. Proceso de resonancia.

(*) Hay que tener en cuenta que aunque éste esquema está basado en ideas clásicas puede servir para imaginar el proceso de resonancia que es enteramente cuántico.

A las resonancias también se les conoce como "estados compuestos" ó bien bajo el nombre de "iones negativos temporales" (Schulz 1973). Dado que el proyectil es un electrón cuya carga es negativa, el "compuesto" tiene una carga neta negativa. De aquí el nombre de "ión negativo temporal".

Un electrón en el campo del potencial del estado excitado puede quedar en un estado "ligado" ó bien en un estado "virtual". Esto hace que se consideren dos tipos posibles de resonancias - que se designan como tipo I y tipo II. La diferencia de ambas - se hace comparando la energía del ión resultante con la energía del estado excitado del blanco (padre). Si la energía del ión negativo se encuentra por debajo de todas las posibles energías de los estados del blanco excitado, se puede decir que el electrón ha sido ligado en el campo del potencial del átomo excitado. Este estado resonante es el tipo I. Si por el contrario, la energía del ión negativo resonante está por encima de la de los estados del blanco excitado, entonces el electrón no puede estar ligado en relación a los estados excitados del blanco padre. Tal estado es virtual y a la resonancia se le llama del tipo - II.

Ahora se hablará un poco sobre el fenómeno de Autoionización, también conocido como el efecto Auger, (De la Peña 1979). Para entender éste fenómeno, el caso del helio es muy ilustrativo. Se sabe que la energía de ionización del He se obtiene de la diferencia entre la energía del ión He^+ y la energía de su estado básico. El ión contiene un solo electrón y dos protones entonces su energía es de -54.4 eV y la energía del He en estado básico es de -108.8 eV por lo que la diferencia es de 54.4 eV. Esto - quiere decir que si a un átomo de He se le suministra una ener--

gía de 54.4 eV, el átomo se ioniza. Lo interesante es que el - nuevo sistema, o sea el ión junto con el electrón libre, se encuentra en el continuo pues el electrón libre puede poseer cualquier energía. Si en el umbral de ionización se fija el cero de energía, como se muestra en la figura 2, sucede que muchos de los posibles estados excitados discretos del átomo caen energéticamente dentro del intervalo del continuo. Este hecho produce el efecto Auger, o autoionización, que consiste en que siempre - que se excite el átomo a uno de éstos estados el sistema decaerá sin la emisión de radiación, sino emitiendo un electrón y dejando un ión positivo.

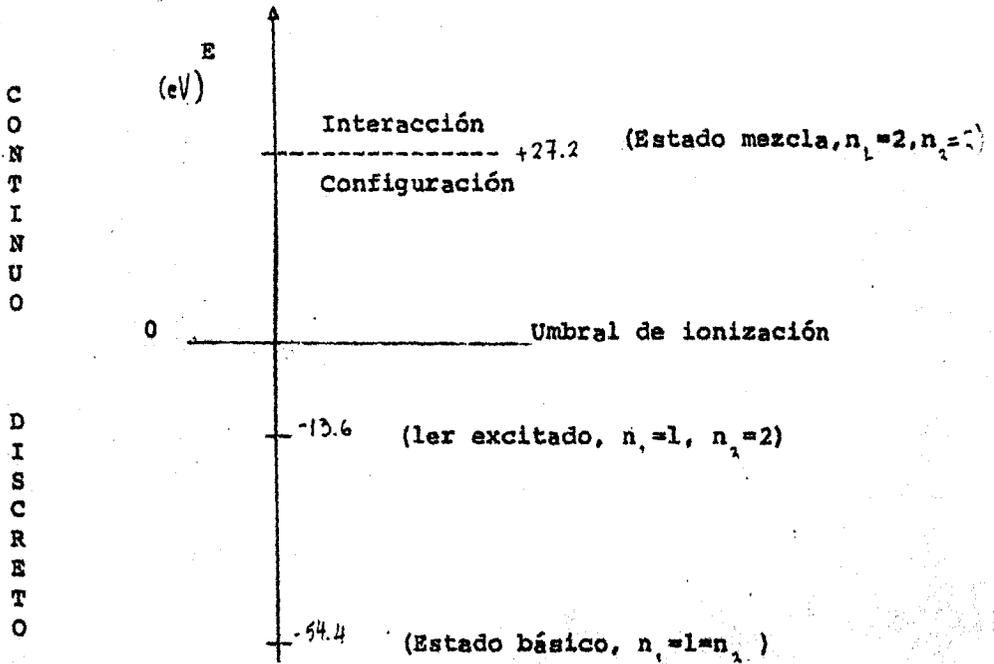


Fig 2. Espectro del Helio.

Regresando a la cuestión de resonancias, ahora se comentará un poco sobre la historia de las resonancias en la física atómica.

Tradicionalmente, la observación de las resonancias en las curvas de sección transversal contra energía para la detección de los estados cuánticos de vida corta era algo exclusivo de los físicos nucleares. No fué sino hasta el descubrimiento de la resonancia del helio por Schulz, que los físicos atómicos comenzaron a estudiar las resonancias en átomos y moléculas.

Sin embargo, en el año de 1921 James Frank en un intento por explicar el fenómeno observado en las descargas eléctricas en un gas de neón, sugería que cuando un electrón de una capa cerrada exterior es excitado a un orbital desocupado, es posible que un electrón se ligue a éste orbital y entonces se forme un ión excitado de neón. Esta sugerencia profética paso desapercibida por cuarenta años hasta que Ugo Fano descubrió tales estados de iones negativos excitados.

Continuando con el desarrollo histórico de los experimentos en resonancias, se encuentra que en los años 20's y principios de los 30's, se hacían mediciones de la transmisión de electrones a través de gases con la finalidad de encontrar los estados excitados de los átomos.

Actualmente se sabe que éstos experimentos, particularmente en el caso del helio, podrían haber revelado resonancias. El que no se encontraran resonancias, es debido por un lado a que los electrones dispersados elásticamente a grandes ángulos no eran excluidos de los haces transmitidos y por otro a que nadie esperaba encontrar una estructura por debajo del primer estado excitado del átomo.

A principios de la década de los sesentas se consideraba como algo sin características importantes al espectro de energía que se encuentra por encima de la energía de ionización, es de-

cir al continuo de energía. Asimismo, el espectro de energía de los iones negativos que se encuentra por encima de la energía de amarre del electrón más lejano del átomo era considerado como algo carente de estructura. Más aún, muy pocos estados excitados de iones negativos eran conocidos, esto debido en parte a que para la mayoría de los iones negativos las energías de amarre son muy pequeñas.

La historia de las resonancias atómicas se debe en gran medida a George Schulz.

Schulz, en colaboración con Russ Fox, y durante la década de los 50's, se dedicaba a la medición detallada de la forma de la sección transversal para la excitación de los átomos de He del estado $1S_0$ al primer estado excitado (metaestable) 2^3S_1 . Como resultado de sus experimentos encontraron un crecimiento lineal en la sección transversal con respecto a ΔE_e (energía de exceso por encima del valor de umbral de 19.8 eV), en contraste con la dependencia con $(\Delta E_e)^2$ dada por la teoría de Wigner. En 1957 Schulz y Fox publicaron sus experimentos. En relación a éstos Gerjuoy y Baranger publicaron un artículo sugiriendo que después de la energía de umbral el comportamiento lineal en la sección transversal podría explicarse en términos de una resonancia del tipo Breit-Wigner localizada por encima de los 19.8 eV. Entonces Baranger y Gerjuoy postularon un estado "compuesto" del He que se encontraba por encima del estado 2^3S_1 .

Para 1963 Schulz trabajaba en el Westinghouse Research Laboratory, estudiando la dispersión elástica de electrones con helio con el fin de encontrar "picos de Wigner". Se predecía que éstos picos ocurrirían en la sección transversal elástica cuando un nuevo canal de dispersión se abriera, un canal inelástico. Obviamente las observaciones se hicieron alrededor de los 19.8 -

eV del umbral del estado excitado 2^3S . Como resultado, se encontró una resonancia a 19.3 eV, cerca de 0.5 eV por debajo del umbral para 2^3S .

La resonancia del helio encontrada por Schulz es quizás un ejemplo elegante de un mecanismo ya bien conocido en física nuclear, o sea el amarre temporal de un proyectil por la transferencia de energías a las partículas del blanco.

Entonces, de ideas teóricas parcialmente correctas, y de la búsqueda de sus efectos, se llegó al descubrimiento de las resonancias en dispersión atómica. Durante la apertura de la tercera Conferencia Internacional sobre la Física de las Colisiones Atómicas y Electrónicas, Massey calificó el descubrimiento de las resonancias atómicas como "el desarrollo más excitante de la física atómica durante veinte años".

Actualmente hay varios esquemas formales que tratan sobre la descripción de los estados resonantes en física atómica.

Se han desarrollado teorías "cuasiestacionarias" para calcular tanto las energías de resonancia como sus anchos correspondientes en los experimentos de dispersión. Métodos como la técnica cuasivariacional de Taylor y Williams (1965), la técnica de interacción de Høloien (1958) en la que se usan funciones modificadas de Laguerre, la técnica de interacción de configuración truncada de Lipsky y Russek (1966), y más recientemente la técnica de acoplamiento cercano (close-coupling) de Burke y Schey (1962) así como la teoría de Fano.

Las primeras técnicas que se mencionan buscan la obtención de las energías de resonancia y sus anchos pero no intentan calcular las secciones transversales de dispersión. La técnica de close-coupling calcula la sección transversal y estudia la reso-

nancia como parte del fenómeno total de dispersión. La teoría de Fano ha probado ser de gran utilidad en el estudio de los perfiles de línea.

Según Taylor (1966) todos los métodos mencionados llevan a resultados numéricos equivalentes y se puede mostrar que son formas especiales de la teoría general de Feshbach para la dispersión resonante. La ventaja con los métodos cuasiestacionarios es que son matemáticamente más sencillos de aplicar que la teoría de acoplamiento cercano, la cual se vuelve muy complicada para átomos de más de dos electrones.

El presente trabajo consta de tres partes. En la primera parte se describe el formalismo de Fano (1961) para el estudio del fenómeno de autoionización, en la segunda se describe el tratamiento formal de las resonancias del tipo I en teoría de dispersión con la técnica de operadores de proyección de Feshbach (1958) y en la última parte se demuestra la equivalencia entre ambos.

Desde el punto de vista del formalismo de Feshbach, los operadores de proyección se emplean para dividir el espacio de Hilbert en dos subespacios, a saber un subespacio P que contiene la parte del vector de estado que corresponde al continuo y un subespacio Q que contiene la parte que corresponde al discreto. Esto es, el vector de estado, que es el que describe al sistema, en un principio estará en el continuo (el proyectil aproximándose al blanco), luego caerá en el discreto (el electrón es atrapado por el átomo), y finalmente volverá al continuo (el "compuesto" se autoioniza).

El método para calcular resonancias se reduce a diagonali-

zar el hamiltoniano del sistema compuesto usando una base tal - que no incluya la parte continua, es decir para cuando el electrón está atrapado.

El tratamiento de Fano para el fenómeno de autoionización - es conocido con el nombre de interacción de configuraciones. Su trabajo consiste en explicar los picos asimétricos que aparecen en un espectro de absorción óptica y que él atribuye a una interacción de configuraciones cuyos efectos son particularmente notorios en los niveles que se encuentran por encima del umbral de ionización, para los cuales coinciden las energías de algunos estados de configuraciones diferentes. Esta mezcla de una configuración que pertenece al discreto con el continuo es lo que da lugar a la autoionización, la cual se manifiesta como picos asimétricos, ya que al mezclarse las configuraciones para formar un estado estacionario de energía E , los coeficientes varían muy rápidamente cuando la energía pasa por un nivel autoionizante.

Como se vé, tanto en la autoionización como en el caso de resonancias en dispersión, el problema teórico que en última instancia se resuelve es el de la mezcla de un estado que pertenece al espectro discreto pero que energéticamente cae en el continuo. Físicamente, para lograr ésta mezcla en el caso de dispersión se necesita que un electrón colisione con cierta energía contra un átomo neutro en estado excitado; en el caso de autoionización se logra cuando a un átomo neutro se le proporciona la energía suficiente y específica para que algún electrón pase a un estado que energéticamente pertenece al continuo. En el primer caso la interacción de configuraciones conducirá a la autoneutralización del ión negativo que se había formado. En el segundo la interacción de configuraciones provoca la autoionización.

De lo anterior, no es extraño esperar que ambos formalismos sean equivalentes.

I AUTOIONIZACION - INTERACCION DE CONFIGURACIONES

En ésta parte se discutirá el formalismo de Fano (1961).

Según Fano el efecto de "interacción de configuraciones" es el causante de los picos asimétricos que aparecen en un espectro de absorción óptica. Es la mezcla de una configuración que pertenece a un estado discreto autoionizante con el continuo lo que da lugar a la autoionización.

La ecuación a resolver es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, siendo $|\Psi\rangle$ el vector de estado del sistema. El sistema a estudiar es un átomo neutro.

Los estados electrónicos de los átomos se clasifican generalmente en términos de cierta configuración en la aproximación de partícula independiente. Los estados estacionarios pueden representarse como superposiciones de estados de diferentes configuraciones que se "mezclan" por la interacción. Es decir, por aquellos términos del Hamiltoniano que no son importantes para la aproximación de partícula independiente.

Fano considera que el sistema atómico posee varios estados discretos no degenerados y que, de todos ellos, el estado $|\varphi\rangle$ cae energéticamente en el espectro de estados del continuo.

Para encontrar los efectos del acoplamiento entre los estados del discreto y del continuo, lo que propone Fano es la diagonalización de la porción de la matriz de energía que pertenece a los estados del discreto y continuo. Llamando $|\psi_E\rangle$ a los estados del continuo, esta submatriz viene dada por :

$$\left. \begin{aligned} \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle &= E_{\varphi} \\ \langle \psi_E | \hat{H} | \varphi \rangle &= V_E \quad \text{y} \\ \langle \psi_{E''} | \hat{H} | \psi_{E'} \rangle &= E' \delta(E'' - E') \end{aligned} \right\} \quad (I.1)$$

Dado que el operador Hamiltoniano \hat{H} es el operador de - evolución del sistema, la E_φ define a la probabilidad de transición del estado discreto $|\varphi\rangle$ al estado discreto $|\varphi\rangle$, lo que físicamente significa que el electrón que esté en el estado $|\varphi\rangle$ no escape del átomo al pasar el tiempo. La $\sqrt{V_{E'}}$ define la probabilidad de transición del estado discreto al estado continuo $|\psi_{E'}\rangle$ y va a tener que ver (se verá más adelante) con que tan intensa es la interacción, pues representa el hecho de la autoionización es decir que el electrón en el estado $|\varphi\rangle$ se libere del átomo. Por último E' está relacionada con la probabilidad de transición entre estados del continuo. Dado que la energía esperada para el estado $|\varphi\rangle$ cae en el rango de energía del continuo, E_φ se encuentra dentro del intervalo de valores de E'

Por tanto, los valores de la energía E que satisfagan las condiciones a la frontera impuestas a la ecuación de Schrödinger y que se encuentran dentro del intervalo de E' serán eigenvalores de las ecuaciones (I.1).

El vector de estado $|\Psi\rangle$ que se quiere determinar se puede expresar como una superposición del estado discreto $|\varphi\rangle$ y de los estados del continuo $|\psi_{E'}\rangle$ ya que éstos dos, o discreto o continuo forman dos subespacios ajenos ($\langle\varphi|\psi_{E'}\rangle \neq 0$) y juntos dan todas las posibles proyecciones del vector de estado $|\Psi\rangle$:

$$|\Psi\rangle = a|\varphi\rangle + \int dE' b_{E'} |\psi_{E'}\rangle, \quad (\text{I.2})$$

siendo $a = \langle\varphi|\Psi\rangle$ y $b_{E'} = \langle\psi_{E'}|\Psi\rangle$ funciones de la energía.

Aprovechando esta descomposición Fano obtiene dos ecuaciones acopladas cuya solución es equivalente a diagonalizar (I.1).

En efecto, al sustituir la ecuación (I.2) en la ecuación de Schrödinger $\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$ se obtiene :

$$a \hat{H} |\varphi\rangle + \int dE' b_E' \hat{H} |\psi_{E'}\rangle = E |\Psi\rangle . \quad (\text{I.3})$$

Multiplicando ésta ecuación por el bra $\langle \psi_{E''} |$ y sustituyendo las ecuaciones (I.1) se obtiene :

$$a \langle \psi_{E''} | \hat{H} |\varphi\rangle + \int dE' b_E' \langle \psi_{E''} | \hat{H} |\psi_{E'}\rangle = E \langle \psi_{E''} | \Psi\rangle \text{ ó bien}$$

$$V_{E''} a + E'' b_{E''} = E b_{E''} . \quad (\text{I.4})$$

Multiplicando la ecuación (I.3) por $\langle \varphi |$:

$$a \langle \varphi | \hat{H} |\varphi\rangle + \int dE' b_E' \langle \varphi | \hat{H} |\psi_{E'}\rangle = E \langle \varphi | \Psi\rangle \quad \text{Y}$$

sustituyendo las expresiones (I.1) :

$$E_{\varphi} a + \int dE' V_{E'}^* b_{E'} = E a . \quad (\text{I.5})$$

Las ecuaciones (I.4) y (I.5) son las ecuaciones acopladas.

Para resolver éste sistema es necesario expresar b_E en términos de a pero puesto que aparece una división entre $E - E'$ y éste puede ser cero, es necesario introducir la solución de Dirac :

$$b_E = \left[\frac{1}{E - E'} + Z(E') \delta(E - E') \right] V_E a , \quad (\text{I.6})$$

entendiendo que al sustituir en la ecuación hay que tomar la parte principal de la integral sobre $(E - E')^{-1}$ y que la función $Z(E')$ se determina a posteriori.

Si se pide que los estados $|\psi_E\rangle$ tengan un comportamiento asintótico proporcional a $\text{Sen}(k(E)r + \delta)$, es decir, si lo que se pide es que lejos de la región de interacción tan solo el continuo de estados describa el comportamiento del sistema, se encuentra lo siguiente :

La superposición de los estados del continuo $|\psi_E\rangle$ (en la región asintótica) con los coeficientes $b_{E'}$, es decir la integral sobre los valores de la energía E del sistema, produce -- dos términos, a saber :

$$\int dE' b_{E'} |\psi_{E'}\rangle \propto \left\{ -\pi \text{Cos}(k(E)r + \delta) + Z(E) \text{Sen}(k(E)r + \delta) \right\}, \quad (\text{I.7})$$

que se pueden agrupar en uno solo si se define :

$$\Delta = -\text{arc tan} \left(\frac{\pi}{Z(E)} \right), \quad (\text{I.8})$$

$$\text{esto es } \int dE' b_{E'} |\psi_{E'}\rangle \propto \text{Sen}(k(E)r + \delta + \Delta), \quad (\text{I.9})$$

dado que $\text{Sen}(a+b) = \text{Sen}a \text{Cos}b + \text{Sen}b \text{Cos}a$ y que por la relación (I.8) $\text{Sen} \Delta / (\pi) = -\text{Cos} \Delta / (Z(E))$.

El valor de $Z(E)$ se determina al sustituir la ecuación (I.6) en la ecuación (I.5),

$$E_{\psi} a + \int dE' V_{E'}^* \left[\frac{1}{E - E'} + Z(E) \delta(E - E') \right] V_{E'} a = E a,$$

o bien,

$$E_{\psi} + \mathcal{P} \int dE' |V_{E'}|^2 \frac{1}{E - E'} + |V_E|^2 Z(E) = E,$$

donde \mathcal{P} indica que se tome la parte principal de la integral.

Si se define

$$F(E) = \int dE' |V_E|^2 \frac{1}{E-E'} , \quad (I.10)$$

entonces la ecuación anterior se reescribe como :

$$E_\varphi + F(E) + |V_E|^2 Z(E) = E ,$$

o bien

$$Z(E) = \frac{E - (E_\varphi + F(E))}{|V_E|^2} . \quad (I.11)$$

$|V_E|^2$ representa la intensidad de la interacción de configuraciones, es decir que tan intenso es el acoplamiento entre el estado discreto con el continuo, o bien que tan probable es la transición entre los estados $|\psi\rangle$ y $|\psi_E\rangle$.

Regresando a la ecuación (I.8), es claro que la $\tan \Delta$ tendrá un cambio muy brusco ($\tan \Delta \rightarrow \infty$) cuando la Δ pase por el valor $\pi/2$, esto implica que la función $Z(E)$ tenderá a cero. De la ecuación (I.11) la función $Z(E)$ tiende a cero cuando la intensidad de la interacción $|V_E|^2$ es sumamente grande o bien - siempre que los valores de la energía E satisfagan la relación:

$$E = E_\varphi + F(E) . \quad (I.12)$$

Este valor de la energía E es el que define la resonancia. La función $F(E)$ representa el corrimiento de la posición de la energía de resonancia con respecto de E_φ , y Δ es el corrimiento de fase de la onda final con respecto a la onda inicial y se debe a la interacción de configuraciones entre el continuo y el - discreto.

Físicamente lo que se está analizando a partir de la ecuación (I.7) es que el vector de estado después de la interacción

describa a un electrón libre, es decir que el átomo se autoionice. La onda resultante para este electrón, que es una función sinusoidal, tiene un desfase Δ de la misma naturaleza que los desfases encontrados en la descripción de resonancias en la teoría de dispersión, en la cual el electrón entrante es descrito por una función sinusoidal y el efecto de la dispersión tan solo es cambiar la fase de ésta función.

El coeficiente a , que representa la proyección del vector de estado $|\Psi\rangle$ en el discreto se determina por ortonormalización. Para los términos del continuo ésta condición se expresa como :

$$\langle \Psi_{\bar{E}} | \Psi_E \rangle = a^*(\bar{E})a(E) + \int dE' b_{E'}^*(\bar{E})b_{E'}(E) = \delta(\bar{E}-E) \quad (I.13)$$

siendo \bar{E} y E dos valores de la energía que pueden ser diferentes, sustituyendo la ecuación (I.6) la ecuación anterior se reescribe como :

$$a^*(\bar{E}) \left\{ 1 + \int dE' v_{E'}^* \left[\frac{1}{\bar{E}-E'} + Z(\bar{E}) \delta(\bar{E}-E') \right] \left[\frac{1}{E-E'} + Z(E) \delta(E-E') \right] v_{E'} \right\} a(E) = \delta(\bar{E}-E) \quad (I.13a)$$

Aquí hay que tener cuidado en la integración sobre la E' debido a la doble singularidad cuando $\bar{E} = E$. Con las ecuaciones (A.1)-(A.9)* se encuentra que :

$$\left\{ |a(E)|^2 |v_E|^2 (\pi^2 + Z^2(E)) \delta(\bar{E}-E) + a^*(\bar{E}) \left[1 + \frac{1}{\bar{E}-E} [F(E) - F(\bar{E}) + Z(E)|v_E|^2 - Z(\bar{E})|v_{\bar{E}}|^2] \right] \right\} a(E) = \delta(\bar{E}-E) \quad (I.13b)$$

(*) Ver apéndice A (parte A)

pero de la ecuación (I.11) para la energía E , se vé que los términos que están en la llave se anulan por que :

$$\begin{aligned} & \left\{ 1 + \frac{1}{\bar{E}-E} \left[F(E) - F(\bar{E}) + Z(E) |V_E|^2 - Z(\bar{E}) |V_{\bar{E}}|^2 \right] \right\} = \\ & = \frac{1}{\bar{E}-E} \left\{ (\bar{E}-E) + (F(E) - F(\bar{E}) + Z(E) |V_E|^2 - Z(\bar{E}) |V_{\bar{E}}|^2) \right\} \\ & = \frac{1}{\bar{E}-E} \left\{ (\bar{E}-E) + (E-\bar{E}) \right\} \\ & = 0, \text{ entonces la ecuación (I.13b) queda como} \end{aligned}$$

$(a(E) |V_E|^2 (\pi^2 + Z^2(E)) \delta(\bar{E}-E) = \delta(\bar{E}-E)$, por lo que el coeficiente $|a(E)|^2$ queda como

$$|a(E)|^2 = \frac{1}{|V_E|^2 (\pi^2 + Z^2(E)) [E-E_p - F(E)] + \kappa^2 |V_E|^4} = \frac{|V_E|^2}{[E-E_p - F(E)] + \kappa^2 |V_E|^4} \quad (\text{I.14})$$

Este resultado demuestra que la interacción de configuraciones está "diluyendo" el estado discreto $|\varphi\rangle$ en una banda de estados estacionarios cuyo perfil está representado por una curva de resonancia con un ancho de línea de :

$$\Gamma = 2\pi |V_E|^2. \quad (\text{I.15})$$

Esto quiere decir que si se prepara el sistema en el estado discreto $|\varphi\rangle$, éste se autoionizará al cabo de un tiempo medio:

$$t = \frac{\hbar}{2\pi |V_E|^2}. \quad (\text{I.16})$$

En términos del corrimiento de fase Δ , los coeficientes a y b_E quedan descritos como :

$$a = \frac{\text{Sen } \Delta}{\pi V_E} \quad \text{y} \quad (I.16)$$

$$b = \frac{V_{E'}}{\pi V_E} \frac{\text{Sen } \Delta}{E - E'} - \text{Cos } \Delta \delta(E - E') \quad (I.17)$$

La ecuación (I.16) se obtiene al sustituir la ecuación (I.8) para $Z(E)$, es decir $Z(E) = -\pi \text{Cos } \Delta / \text{Sen } \Delta$, en la ecuación (I.14). La ecuación (I.17) se obtiene al sustituir la ecuación (I.16) en la ecuación (I.6) y usando la ecuación anterior para $Z(E)$.

Ahora se estudiará la variación de la probabilidad de excitación del vector de estado $|\bar{\Psi}_E\rangle$.

Sea cual fuere el mecanismo de excitación, ésta probabilidad puede representarse en términos de los elementos de matriz de un operador de transición \hat{T} adecuado, entre un estado inicial $|i\rangle$ y el estado deseado $|\bar{\Psi}_E\rangle$. Con ayuda de las ecuaciones (I.2), (I.16) y (I.17) se expresa ésta probabilidad en términos del corrimiento de fase Δ como :

$$\begin{aligned} \langle \bar{\Psi}_E | \hat{T} | i \rangle &= (a^* \langle \varphi | + \int dE' b_{E'}^* \langle \psi_{E'} |) \hat{T} | i \rangle \\ &= \frac{1}{\pi V_E^*} \langle \bar{\Psi} | \hat{T} | i \rangle \text{Sen } \Delta - \langle \psi | \hat{T} | i \rangle \text{Cos } \Delta, \quad (I.18) \end{aligned}$$

con

$$|\bar{\Psi}\rangle = |\varphi\rangle + \int dE' \frac{V_{E'} |\psi_{E'}\rangle}{E - E'} \quad (I.19)$$

Esto indica que el estado $|\varphi\rangle$ se vé modificado por una mezcla de estados del continuo. Cuando el valor de la energía es -

cercano a la resonancia ($E \sim E_p + F$) hay una rápida variación en el corrimiento de fase Δ ; por ende, de la ecuación (I.18), - también se ocasiona una rápida variación en la probabilidad de transición. Además como las funciones seno y coseno tienen paridades opuestas, las contribuciones de $\langle \Phi | \hat{T} | i \rangle$ y de $\langle \psi | \hat{T} | i \rangle$ a la probabilidad de transición $\langle \Psi | \hat{T} | i \rangle$ interfieren con fases opuestas.

Es decir, si a un átomo en estado neutro que tiene un estado discreto que energéticamente cae dentro del intervalo del continuo, se le proporciona una energía cercana a la energía de resonancia para ese estado discreto, será muy probable que se excite y pase a ese estado y a su vez que se autoionice.

La razón de la probabilidad de transición $\langle \Psi | \hat{T} | i \rangle$ a la probabilidad de transición para el continuo $\langle \psi | \hat{T} | i \rangle$ puede representarse por una familia de curvas, las cuales son funciones de la energía reducida ξ , que se define como:

$$\xi = -\cot \Delta = \frac{E - E_p - F}{\pi |V_E|^2} = \frac{E - E_p - F}{1/2 \Gamma}, \quad (\text{I.20})$$

y del parámetro q definido por:

$$q = \frac{\langle \Phi | \hat{T} | i \rangle}{\pi V_E^* \langle \psi | \hat{T} | i \rangle} \quad (\text{I.21})$$

Esta familia queda descrita por*:

$$\frac{|\langle \Psi | \hat{T} | i \rangle|^2}{|\langle \psi | \hat{T} | i \rangle|^2} = \frac{(q + \xi)^2}{1 + \xi^2}. \quad (\text{I.22})$$

(*) Ver Apéndice A (parte B)

En la figura 3 se muestran algunas de las curvas resultantes para diferentes valores de q y de ξ .

Ahora (Fano 1965), sea $\sigma(\xi)$ la sección transversal total para el proceso de excitación. Si se define σ_a como la sección que corresponde a las transiciones a estados del continuo por interacción con el estado discreto autoionizante, es decir,

$$\sigma_a = |\langle \psi_{\xi} | \hat{T} | i \rangle|^2 \quad \text{y} \quad (\text{I.23})$$

σ_b la sección que corresponde a transiciones al continuo que no interactúan con el discreto. Entonces :

$$|\langle \psi_{\xi} | \hat{T} | i \rangle|^2 = \sigma(\xi) - \sigma_b. \quad (\text{I.24})$$

Usando la ecuación (I.22) se puede escribir ésta ecuación como :

$$\sigma(\xi) = \frac{(q+\xi)^2}{1+\xi^2} \sigma_a + \sigma_b. \quad (\text{I.25})$$

Esta última expresión determina la forma en que varía la sección transversal de excitación y se conoce como la ecuación o perfil de Fano-Beutler. Los valores de q , Γ , σ_a y σ_b son prácticamente independientes de la energía en la vecindad de la línea.

En un principio se aplicó la ecuación (I.25) para la excitación del nivel $2s2p$ del helio con bombardeo electrónico, resultando una q negativa. Durante los años 1963-64 fueron llevadas a cabo extensas observaciones de espectros de absorción en el continuo de ionización con energías de los fotones de más de

100 eV. Estas observaciones dieron a conocer nuevas líneas de absorción cuyos perfiles son distintos entre sí. Con un amplio intervalo de valores de q , éstos perfiles quedan bien determinados por la ecuación (I.25).

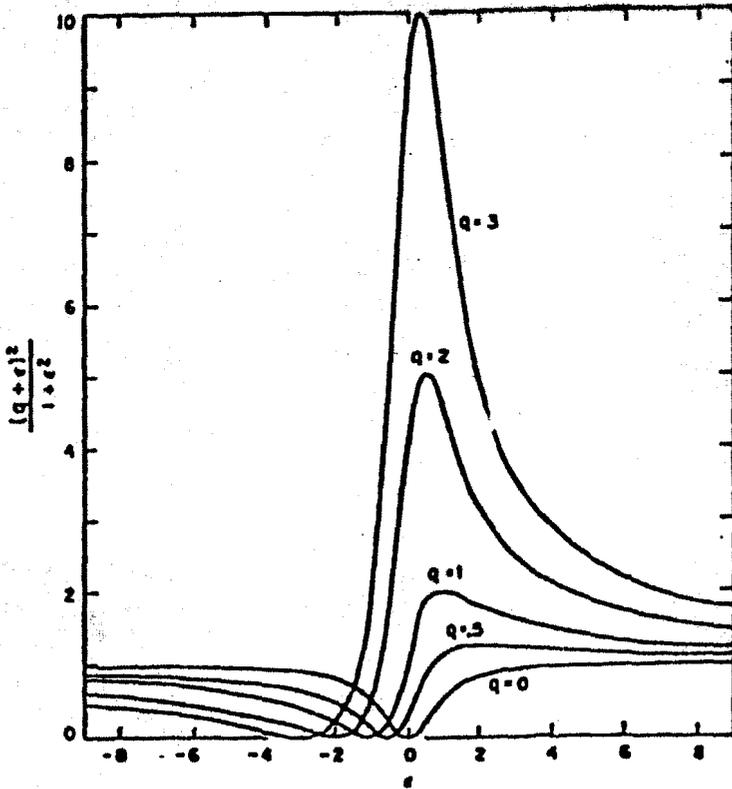
Si se quiere analizar el perfil de una línea en términos de una componente simétrica y una antisimétrica, se debe escribir :

$$\zeta(\xi) = C(E) + 1/2 \left[B \left[(E-E_0)^2 + (\Gamma/2)^2 \right]^{-1} + D(E-E_0) \left[(E-E_0)^2 + (\Gamma/2)^2 \right]^{-3/2} \right], \quad (I.27)$$

que es la fórmula de Shore.

Los parámetros B y D son constantes que especifican la simetría y la antisimetría de la línea. Están relacionados con la fórmula de Fano por $B/D = (q^2 - 1)/2q$. Comer y Read (1972) desarrollaron un método muy simple para obtener las energías de resonancias después de ajustar los perfiles usando la fórmula de Shore. Simpson (1966) describe como con los datos experimentales se puede evaluar el parámetro q .

Figura 3. Perfiles naturales de línea para diferentes valores de q . Se invierte la curva para q negativa (de Fano (1961)).



II RESONANCIAS EN LA TEORIA DE DISPERSION FORMAL

En un experimento de dispersión, los elementos que están en juego son un proyectil y un blanco (por ejemplo un electrón y un átomo). En el experimento el proyectil se dispara contra el blanco, luego el blanco lo dispersa y al final, con un detector se registra el proyectil dispersado ó el blanco.

El experimento está bien definido ya que se puede controlar la energía del proyectil que por ende es conocida, y con el detector se miden cantidades proporcionales a las secciones transversales en función del ángulo de dispersión.

Un concepto útil para entender el fenómeno de dispersión es el de canal. En el sistema que se está analizando (electrón-átomo) hay dos tipos de canales que son los canales abiertos y los cerrados. Los últimos, tienen que ver con estados ligados del sistema, y los primeros están dados por las posibles maneras en que el proyectil (electrón) colisione con el blanco (átomo) y también por las posibles maneras en que algún electrón del sistema ya formado escape del mismo (proyectil dispersado). Entonces, los canales abiertos que también se conocen como canales asintóticos se dividen en dos tipos de canales, los canales de entrada que se definen como los estados cuánticos del proyectil cuando se aproxima al blanco, estando éste último en su estado básico; y los canales de salida que son los posibles estados resultantes del efecto de la dispersión. Ambos canales de salida se definen por los números cuánticos del proyectil y del blanco siempre que éstos se encuentren bien separados el uno del otro. Esto es por que cuando el proyectil se encuentra muy cercano al blanco no hay posibilidad de caracterizar el canal de entrada o al de salida ya que "pertenece" al blanco, es decir se encuentra en un canal cerrado.

Un efecto interesante en un experimento de dispersión es la resonancia que se encuentra en la sección transversal para algunos valores específicos de la energía del proyectil. Por simplicidad tan solo se discutirán las resonancias en la sección transversal elástica. Estas se entienden si se considera que hay ciertas energías para las cuales el proyectil penetra al blanco y forma un "compuesto ligado" (proyectil-blanco); éste dura muy poco tiempo (1×10^{-14} seg.) y luego decae dejando al blanco en su estado original y al proyectil elásticamente dispersado.

A continuación se describirá la teoría de Feshbach para el caso de dispersión en un sistema electrón-átomo.

El sistema cuántico a estudiar es un electrón haciendo el papel de proyectil y un átomo de N electrones como blanco, de aquí que el sistema ligado ó sistema compuesto tenga $3(N+1)$ - grados de libertad.

El problema a resolver es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\hat{H}|\Phi(r_1, \dots, r_{N+1})\rangle = E|\Phi(r_1, \dots, r_{N+1})\rangle \quad (\text{II.1})$$

siendo $|\Phi\rangle$ el vector de estado del sistema.

Las energías que producen los estados resonantes se obtienen si se excluyen las ondas de los canales de entrada y las de los de salida y si se resuelve la ecuación (II.1) para los niveles de energía del sistema compuesto como si éste fuera un estado ligado. Esto se hace como en muchos de los problemas de

mecánica cuántica colocando al sistema dentro de una "caja".

Formalmente, lo que se hace es lo siguiente:

El espacio de Hilbert del Hamiltoniano del sistema compuesto se subdivide, con ayuda de los operadores \hat{P} y \hat{Q} , en los subespacios P y Q. El subespacio P contendrá aquellas partes del vector de estado $|\Psi\rangle$ que tengan proyección en los canales asintóticos de salida. El subespacio Q, que es el complemento de P, contendrá las que no tengan proyección en dichos canales. En otras palabras Q contiene a los posibles estados resonantes y en P estarán aquellos estados para los cuales el proyectil es dispersado por el blanco pero no capturado.

Hecho ésto, tan solo hay que diagonalizar en el subespacio Q al Hamiltoniano del sistema compuesto.

En términos de canales, todas las funciones de P serán funciones de los canales abiertos y las de Q las de los cerrados.

Adelantando un poco los resultados de éste tratamiento, en el análisis se verá que aparece un operador que relaciona los canales abiertos con los canales cerrados y viceversa. A éste operador se le llama potencial de polarización óptico y es el que en última instancia proporciona información sobre la probabilidad de transición de un canal abierto de entrada a uno cerrado y luego de éste a un canal abierto de salida. En sí, lo que mostrará será el efecto de la resonancia, cuando algún electrón de cierta energía característica penetre al blanco, forme el compuesto ligado y después de un tiempo sea dispersado.

Entrando en materia, los operadores de proyección \hat{P} y \hat{Q}

satisfacen las siguientes relaciones :

$$\left. \begin{aligned} \hat{P}\hat{Q} &= \hat{Q}\hat{P} = 0, \\ \hat{P}^2 &= \hat{P}, \quad \hat{Q}^2 = \hat{Q} \quad \text{y} \\ \hat{P} + \hat{Q} &= \hat{1} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2})$$

Además; $\hat{P}|\Psi(r)\rangle \rightarrow |\Psi(r)\rangle$ $V_i \rightarrow \infty$, o sea que el operador P proyecta (selecciona) a aquellas componentes del vector de estado $|\Psi\rangle$ en el canal de salida asintótico (canal abierto). Físicamente lo que se pide con esta condición es que para distancias relativamente grandes (lejos de la región de interacción) el estado cuántico del sistema sea el que corresponde al de una partícula libre; o bien que la función de onda que describa el flujo de electrones de la salida sea la misma, salvo por algún desfaseamiento, con respecto a la función que describa al flujo de entrada.

Por las propiedades de los operadores \hat{P} y \hat{Q} , se descompone el vector de estado $|\Psi\rangle$ como

$$|\Psi\rangle = \hat{P}|\Psi\rangle + \hat{Q}|\Psi\rangle, \quad (\text{II.3})$$

en donde el primer término significa que el electrón se encuentre aproximándose ó alejándose del átomo y el segundo, que se encuentre dentro del átomo formando un estado ligado.

Al sustituir la ecuación (II.3) en la ecuación de Schrödinger (II.1) resulta que

$$\hat{H}(\hat{Q}|\Psi\rangle + \hat{P}|\Psi\rangle) = E(\hat{Q}|\Psi\rangle + \hat{P}|\Psi\rangle) \quad \text{y} \quad (\text{II.4})$$

si se aplica el operador \hat{P} por la izquierda y se usan las propiedades de los operadores (ecuaciones (II.2)) se obtiene:

$$(\hat{P}\hat{H}\hat{P} - E) \hat{P}|\Psi\rangle = -\hat{P}\hat{H}\hat{Q}\hat{Q}|\Psi\rangle. \quad (\text{II.5})$$

Similarmente aplicando el operador \hat{Q} por la izquierda a la ecuación (II.4) se obtiene :

$$(\hat{Q}\hat{H}\hat{Q} - E) \hat{Q}|\Psi\rangle = -\hat{Q}\hat{H}\hat{P}\hat{P}|\Psi\rangle. \quad (\text{II.6})$$

Usando la notación :

$$\hat{H}_{pp} = \hat{P}\hat{H}\hat{P}, \quad \hat{H}_{aa} = \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}, \quad \hat{H}_{pa} = \hat{P}\hat{H}\hat{Q}, \quad \hat{H}_{ap} = \hat{Q}\hat{H}\hat{P}, \quad (\text{II.7})$$

las ecuaciones (II.5) y (II.6) se pueden reescribir como:

$$(\hat{H}_{pp} - E) \hat{P}|\Psi\rangle = -\hat{H}_{pa} \hat{Q}|\Psi\rangle \quad (\text{II.8})$$

$$(\hat{H}_{aa} - E) \hat{Q}|\Psi\rangle = -\hat{H}_{ap} \hat{P}|\Psi\rangle, \quad (\text{II.9})$$

que forman un sistema de ecuaciones acopladas.

Para desacoplarlas, se despeja $\hat{Q}|\Psi\rangle$ de la ecuación (II.9) aplicándole el operador inverso $(\hat{H}_{aa} - E)^{-1}$, así

$$\hat{Q}|\Psi\rangle = \frac{1}{E - \hat{H}_{aa}} \hat{H}_{ap} \hat{P}|\Psi\rangle, \quad (\text{II.10})$$

que se sustituye en la ecuación (II.8) para obtener :

$$(\hat{H}_{pp} - E) \hat{P}|\Psi\rangle = -\hat{H}_{pa} \frac{1}{(E - \hat{H}_{aa})} \hat{H}_{ap} \hat{P}|\Psi\rangle,$$

o bien :

$$\left[\hat{H}_{PP} + \hat{H}_{PQ} \frac{1}{E - \hat{H}_{QQ}} \hat{H}_{QP} \right] \hat{P} |\Psi\rangle = E \hat{P} |\Psi\rangle . \quad (\text{II.11})$$

Si se analiza el segundo término entre corchetes (de derecha a izquierda), se vé que primero relaciona un canal abierto (p) con uno cerrado (Q) através del Hamiltoniano \hat{H} (que és el operador de evolución del sistema), luego viene un término que va asociado con la resonancia [ya que el operador $(E - \hat{H}_{QQ})^{-1}$ varía rápidamente con la energía cuando $\langle \Psi | \hat{H}_{QQ} | \Psi \rangle$ es cercano a E] y por último relaciona el canal cerrado (Q) con el abierto (P) através de \hat{H} . Es decir, éste operador describe el proceso en el cual el proyectil llega al blanco, queda atrapado por él y luego es dispersado. Este operador fué el que se mencionó con anterioridad y se le llama potencial de polarización óptico \hat{V}_{opt} :

$$\hat{V}_{opt} = \hat{H}_{PQ} \frac{1}{E - \hat{H}_{QQ}} \hat{H}_{QP} . \quad (\text{II.12})$$

Reescribiendo la ecuación (II.11) con \hat{V}_{opt} se obtiene:

$$(\hat{H}_{PP} + \hat{V}_{opt}) \hat{P} |\Psi\rangle = E \hat{P} |\Psi\rangle . \quad (\text{II.13})$$

Ahora, sea $\{|\phi_n\rangle\}$ una base ortonormal que genera al subespacio Q. Entonces el operador \hat{Q} puede escribirse como :

$$\hat{Q} = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|.$$

claramente $\hat{Q}|\phi_j\rangle = |\phi_j\rangle, (j=1, \dots, n, \dots)$ pues $\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$

Si se toma a ϵ_n como el valor esperado de la energía para el canal cerrado n , es decir que $\hat{H}_{aa}|\phi_n\rangle = \epsilon_n|\phi_n\rangle$, entonces aplicando el operador inverso $(E - \hat{H}_{aa})^{-1}$ sobre cualquiera de los vectores $|\phi_n\rangle$ se obtiene que :

$$(E - \hat{H}_{aa})^{-1}|\phi_n\rangle = (E - \epsilon_n)^{-1}|\phi_n\rangle, \quad (\text{II.14})$$

y esto es por que si se supone que :

$$\frac{1}{E - \hat{H}_{aa}}|\phi_n\rangle = \lambda|\phi_n\rangle,$$

se busca λ , que tiene que ser distinta de cero pues la definición de un operador inverso implica que su eigenvalor sea distinto de cero. Entonces para encontrar λ se hace uso del operador unitario $\hat{\mathbb{I}}$ de la siguiente manera :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbb{I}}|\phi_n\rangle &= (1)|\phi_n\rangle \\ &= (E - \hat{H}_{aa})(E - \hat{H}_{aa})^{-1}|\phi_n\rangle \\ &= (E - \epsilon_n)\lambda|\phi_n\rangle, \end{aligned}$$

de donde

$$\lambda = \frac{1}{E - \epsilon_n}.$$

Todo esto se ha hecho con la intención de poder describir el potencial óptico en términos de los vectores $|\phi_n\rangle$. Con la expresión anterior, y haciendo uso de las propiedades de los operadores \hat{P} y \hat{Q} (ecuaciones (II.2)), se puede ver que el operador inverso $(E - \hat{H}_{qq})^{-1}$ queda en términos de los vectores base $|\phi_n\rangle$, como :

$$\frac{1}{E - \hat{H}_{qq}} = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{E - \epsilon_n} + \frac{1}{E - \hat{H}_{qq}} \hat{P} \quad (\text{II.15})$$

Sustituyendo ésta expresión en la ecuación (II.12), el potencial óptico queda como:

$$\hat{V}_{opt} = \sum_n \hat{H}_{pa} \frac{1}{E - \epsilon_n} \hat{H}_{qp} \quad (\text{II.16})$$

y claramente la ecuación para \hat{V}_{opt} muestra que habrá polos (resonancias) siempre que el valor de la energía E sea cercano a algún ϵ_n .

Sustituyendo la ecuación (II.16) en la ecuación (II.13), la ecuación a resolver queda reescrita como :

$$\left\{ \hat{H}_{pp} + \sum_n \frac{\hat{H}_{pa} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \hat{H}_{pa}}{E - \epsilon_n} \right\} \hat{P}|\Psi\rangle = E \hat{P}|\Psi\rangle. \quad (\text{II.17})$$

Para efectos de poder discriminar las resonancias, se supondrá que las resonancias están lo suficientemente espaciadas en sus valores correspondientes de energía, de tal forma que se selecciona una sola resonancia tomando los valores de la energía E alrededor de un valor específico ξ_3 para el cual hay resonancia.

Con la condición de que la energía $E \sim \xi_3$, el potencial óptico se puede separar en dos términos y entonces la ecuación (II.17) queda como :

$$\left\{ \hat{H}_{pp} + \sum_{n \neq 3} \frac{\hat{H}_{pa} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \hat{H}_{ap}}{E - \xi_n} - E \right\} \hat{P} |\Psi\rangle = - \left\{ \frac{\hat{H}_{pa} |\phi_3\rangle \langle \phi_3| \hat{H}_{ap}}{E - \xi_3} \right\} \hat{P} |\Psi\rangle, \quad (\text{II.18})$$

que se reescribe como :

$$\left(\hat{H}' - E \right) \hat{P} |\Psi\rangle = - \left\{ \frac{\hat{H}_{pa} |\phi_3\rangle \langle \phi_3| \hat{H}_{ap}}{E - \xi_3} \right\} \hat{P} |\Psi\rangle, \quad (\text{II.19})$$

con :

$$\hat{H}' = \hat{H}_{pp} + \sum_{n \neq 3} \frac{\hat{H}_{pa} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \hat{H}_{ap}}{E - \xi_n}. \quad (\text{II.20})$$

Como se vé, el Hamiltoniano \hat{H}' está compuesto por dos términos. El primero trata a la partícula que no es atrapada por el blanco, es decir el paso de canal abierto a canal abierto; el segundo contiene la parte restante del potencial óptico que no contribuye para la resonancia. La partícula sí es atrapada por el blanco, pero como los valores de la energía cumplen que $E \sim \xi_3$, la diferencia entre E y ξ_n no se hace pequeña.

Resumiendo, \hat{H}' será la parte del Hamiltoniano completo \hat{H} que varía lentamente con la energía y que da lugar a la dispersión no resonante.

La ecuación (II.19) que es la que se tiene que resolver es una ecuación semejante a la ecuación diferencial general del tipo :

$$(\nabla^2 + k^2) \chi(\vec{r}) = f(\vec{r}). \quad (\text{II.21})$$

La función de Green conocida como el propagador de \vec{r} a \vec{r}' se define como :

$$(\nabla^2 + k) \hat{G}(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

para el caso de operadores, si se reemplaza $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ por el operador unitario \hat{I} se vé que la función de Green (ahora operador \hat{G}) satisface (Rodberg 1967) :

$$(\hat{H}' - E) \hat{G} = \hat{I},$$

de donde el operador \hat{G} es

$$\hat{G} = (\hat{H}' - E)^{-1} \quad \text{y} \quad (\text{II.22})$$

una solución particular de la ecuación (II.19) será

$$\hat{P}|\Psi\rangle = -\hat{G} \left\{ \frac{\hat{H}_{p_0} |\phi_3\rangle \langle \phi_1| \hat{H}_{op}}{E - \epsilon_1} \right\} \hat{P}|\Psi\rangle, \quad (\text{II.23})$$

lo cual se comprueba fácilmente ya que

$$(\hat{H}' - E) \hat{P}|\Psi\rangle = -(\hat{H}' - E) \hat{G} \left\{ \frac{\hat{H}_{p_0} |\phi_3\rangle \langle \phi_1| \hat{H}_{op}}{E - \epsilon_1} \right\} \hat{P}|\Psi\rangle =$$

$$= - \left\{ \frac{\hat{H}_{pq} \langle \phi_s | \hat{H}_{qp} \rangle}{E - \epsilon_s} \right\} \hat{P} |\Psi\rangle$$

Entonces la solución de la ecuación (II.19) se obtiene - de la solución general de la ecuación homogénea asociada, más una solución particular.

Para la parte homogénea se tiene :

$$(E - \hat{H}') \hat{P} |\Psi_0^{\pm}\rangle = 0, \quad (\text{II.24})$$

las funciones $\hat{P} |\Psi_0^{\pm}\rangle$ (que se supondrán conocidas), son las que describen la dispersión no resonante. El superíndice (+) representa a la función saliente y el (-) a la función entrante.

Así, en el caso de función saliente :

$$\hat{P} |\Psi\rangle^+ = \hat{P} |\Psi_0^+\rangle + (E - \hat{H}')^{-1} \frac{\hat{H}_{pq} \langle \phi_s | \hat{H}_{qp} \rangle}{E - \epsilon_s} \hat{P} |\Psi\rangle^+, \quad (\text{II.25})$$

Si se observa ésta ecuación, la función saliente aún no - ha quedado despejada. Para despejarla, hay que aplicar el operador $\langle \phi_s | \hat{H}_{qp}$ por la izquierda, luego despejar la relación $\langle \phi_s | \hat{H}_{qp} | \hat{P} \Psi^+ \rangle / (E - \epsilon_s)$ cuyo resultado se sustituye de nuevo en la ecuación (II.25) para obtener

$$\hat{P} |\Psi\rangle^+ = \hat{P} |\Psi_0^+\rangle + (E - \hat{H}') \frac{\hat{H}_{pq} \langle \phi_s | \langle \phi_s | \hat{H}_{qp} | \hat{P} \Psi_0^+ \rangle}{E - \epsilon_s + \langle \phi_s | \hat{H}_{qp} (E - \hat{H}')^{-1} \hat{H}_{qp} | \phi_s \rangle}, \quad (\text{II.26})$$

o bien :

$$\hat{P}|\Psi\rangle^{\dagger} = \hat{P}|\Psi_0\rangle^{\dagger} + \frac{(E - \hat{H}')^{-1} \hat{H}_{pq} |\phi_s\rangle \langle \phi_s| \hat{H}_{qp} |\hat{P} \Psi_0\rangle^{\dagger}}{E - (E_s + \Delta^{(s)}) + \frac{i}{2} \Gamma^{(s)}} \quad (\text{II.27})$$

en donde

$$\Delta^{(s)} - \frac{i}{2} \Gamma^{(s)} = \langle \phi_s | \hat{H}_{qp} (E - \hat{H}')^{-1} \hat{H}_{pq} | \phi_s \rangle. \quad (\text{II.28})$$

Aquí, si se utiliza la definición formal del operador inverso $(E - \hat{H}')^{-1}$ (Rodberg 1967) :

$$\frac{1}{(E - \hat{H}')} = \mathcal{P} \left[\frac{1}{(E - \hat{H}')} \right] - i\pi \delta(E - \hat{H}'), \quad (\text{II.29})$$

donde la \mathcal{P} quiere decir la parte principal, se vé que las definiciones explícitas de $\Delta^{(s)}$ y de $\Gamma^{(s)}$ son :

$$\Delta^{(s)} = \langle \phi_s | \hat{H}_{qp} \mathcal{P} \left[(E - \hat{H}')^{-1} \right] \hat{H}_{pq} | \phi_s \rangle \quad (\text{II.30})$$

$$\Gamma^{(s)} = 2\pi \langle \phi_s | \hat{H}_{qp} \delta(E - \hat{H}') \hat{H}_{pq} | \phi_s \rangle. \quad (\text{II.31})$$

Estos son los parámetros que definen la resonancia. Esta afirmación será más evidente si se analiza el problema a través de la sección transversal.

La sección transversal de dispersión elástica $d\sigma/d\Omega$ está relacionada con la amplitud de dispersión $f(\theta)$ (De la Peña 1979) como :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2, \quad (\text{II.32})$$

y a su vez, la amplitud de dispersión es proporcional a la probabilidad de transición entre un estado entrante $|\hat{P}\Psi\rangle^\dagger$ y un estado sin perturbar $|\hat{f}\rangle$ por medio del potencial de interacción, que en éste caso es el potencial óptico \hat{V}_{opt} . Si se utiliza la ecuación (II.27) se puede ver que ésta transición toma la forma*:

$$\langle \hat{f} | \hat{V}_{opt} | \hat{P}\Psi \rangle^\dagger = \langle \hat{f} | \hat{H}' - \hat{H}_0 | \hat{P}\Psi \rangle^\dagger + \left(\frac{\langle \Psi^- | \hat{H}_{PQ} | \phi_s \rangle \langle \phi_s | \hat{H}_{QP} | \hat{P}\Psi_0 \rangle^\dagger}{E - (\xi_s + \Delta^{(s)}) + \frac{1}{2}i\Gamma^{(s)}} \right) / \text{res} \quad (\text{II.33})$$

Entonces la ecuación para la sección transversal mostrará la forma de una ecuación del tipo Breit-Wigner con cambios bruscos en donde el valor de la energía es $E \sim \xi_s + \Delta^{(s)}$. La $\Delta^{(s)}$ representa el corrimiento del valor de la energía de resonancia con respecto de ξ_s . La resonancia se encuentra para los valores de energía E que satisfacen :

$$E = \xi_s + \Delta^{(s)}, \quad (\text{II.34})$$

y su ancho de banda correspondiente es el valor de $\Gamma^{(s)}$ dado por la ecuación (II.31). Asimismo, cuando E no es cercano a ξ_s , el término no resonante dominará y la sección transversal variará suavemente con la energía.

Con todo este tratamiento, lo que se ha demostrado es que los eigenvalores del Hamiltoniano \hat{H}_{00} llevan a cambios bruscos en la sección transversal cuando el valor de la energía E es cercano a alguno de ellos. Y también, se puede decir que es el po-

(*) Ver Apéndice B

tencial óptico \hat{V}_{opt} el potencial que describe al SISTEMA COMPUESTO electrón-átomo, y su presencia está implicando el efecto de resonancia.

III EQUIVALENCIA

Para demostrar la equivalencia entre ambos formalismos es necesario hacer una relación uno a uno entre los elementos sobre los cuales están basados los mismos. También, es necesario que los elementos relacionados jueguen el mismo papel en su respectivo contexto.

Desde el punto de vista de los operadores de proyección, según Peterkop (1966), en el formalismo de Fano se emplea la representación en la cual las eigenfunciones de los operadores \hat{P} y \hat{Q} se escogen como las funciones básicas de los subespacios P y Q respectivamente. Esto quiere decir que la matriz de los elementos del Hamiltoniano del sistema se diagonaliza por separado en éstos subespacios. En el caso del tratamiento formal de dispersión, las ecuaciones desacopladas significan la diagonalización en el espacio suma $P + Q$.

Como los subespacios P y Q son ajenos y el espacio de Hilbert es la unión de ambos, ambos esquemas están resolviendo el mismo problema por lo que deben ser equivalentes.

Ahora, se indicarán cuales son los elementos que se relacionan entre ambos formalismos, para que al final, con éstas bases se resuelva como un ejercicio la igualdad entre las expresiones obtenidas por cada formalismo para la energía de resonancia y el ancho de banda.

En el tratamiento de dispersión formal, el operador \hat{H}_{Qq} está relacionado con los estados del discreto ó en el lenguaje de canales con los canales cerrados. Entonces éste operador de-

ha de estar relacionado con el elemento de matriz que Fano considera para los estados discretos, ya que éste define a la probabilidad de transición de un estado discreto a él mismo ó bien de un canal cerrado a canal cerrado.

El operador \hat{H}_{pp} del tratamiento formal describe a las transiciones entre el subespacio P, en otras palabras de los estados del continuo al continuo por lo que debe de relacionarse con el elemento de matriz entre estados del continuo que se define en el esquema de Fano.

Por último, el operador \hat{H}_{pQ} relaciona al subespacio Q con el subespacio P, es decir la transición entre los estados del discreto con el continuo y entonces debe de corresponder con el elemento de matriz de discreto y continuo del tratamiento de Fano.

Estrictamente, la correspondencia debe de darse entre los valores esperados de los operadores con los elementos de matriz y no entre operadores y elementos de matriz. Así, lo que se buscará será :

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_{QQ} \rangle_{\Psi} &\longleftrightarrow \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle , \\ \langle \hat{H}_{PP} \rangle_{\Psi} &\longleftrightarrow \langle \psi_{\epsilon} | \hat{H} | \psi_{\epsilon} \rangle \quad y \\ \langle \hat{H}_{PQ} \rangle_{\Psi} &\longleftrightarrow \langle \psi_{\epsilon} | \hat{H} | \varphi \rangle . \end{aligned}$$

Para lograr esto, primero hay que determinar cuales son los operadores de proyección \hat{P} y \hat{Q} para el formalismo de Fano. La ecuación (I.2) del formalismo de Fano es:

$$|\Psi\rangle = a |\varphi\rangle + \int d\epsilon' b_{\epsilon'} |\psi_{\epsilon'}\rangle. \quad (\text{III.1})$$

y como $\langle \varphi | \psi_{E'} \rangle = 0$ y $\langle \psi_{E'} | \psi_{E''} \rangle = \delta(E' - E'')$ es claro que

$$\begin{aligned} \langle \psi_{E''} | \Psi \rangle &= a \langle \psi_{E''} | \varphi \rangle + \int dE' b_{E'} \langle \psi_{E''} | \psi_{E'} \rangle \\ &= 0 + \int dE' b_{E'} \delta(E'' - E') \\ &= b_{E''} \quad \text{y} \end{aligned} \tag{III.2}$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \Psi \rangle &= a \langle \varphi | \varphi \rangle + \int dE' b_{E'} \langle \varphi | \psi_{E'} \rangle \\ &= a + 0 \\ &= a, \end{aligned} \tag{III.3}$$

o sea que $b_{E'} = \langle \psi_{E'} | \Psi \rangle$ y $a = \langle \varphi | \Psi \rangle$ cuyos conjugados serán $b_{E'}^* = \langle \Psi | \psi_{E'} \rangle$ y $a^* = \langle \Psi | \varphi \rangle$.

Sustituyendo las ecuaciones (III.2) y (III.3) en la ecuación (III.1), se tiene que

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \langle \varphi | \Psi \rangle |\varphi\rangle + \int dE' \langle \psi_{E'} | \Psi \rangle |\psi_{E'}\rangle \\ &= |\varphi\rangle \langle \varphi | \Psi \rangle + \int dE' |\psi_{E'}\rangle \langle \psi_{E'} | \Psi \rangle \\ &= \left[|\varphi\rangle \langle \varphi| + \int dE' |\psi_{E'}\rangle \langle \psi_{E'}| \right] |\Psi\rangle, \end{aligned}$$

y lo que está entre corchetes será entonces el operador unitario $\hat{1}$:

$$\hat{1} = |\varphi\rangle \langle \varphi| + \int dE' |\psi_{E'}\rangle \langle \psi_{E'}|. \tag{III.4}$$

Esta última relación se asemeja con $\hat{\mathbb{I}} = \hat{Q} + \hat{P}$ del desarrollo formal. Entonces se hace

$$\hat{Q}^{(*)} = |\varphi\rangle\langle\varphi|,$$

un operador formado con el vector $|\varphi\rangle$ del subespacio de los estados discretos y

$$\hat{P} = \int dE' |\psi_{E'}\rangle\langle\psi_{E'}|,$$

un operador formado con los vectores $|\psi_{E'}\rangle$ pertenecientes al subespacio de los estados continuos.

Por construcción, éstos operadores son operadores de proyección ya que:

$$\begin{aligned} \hat{Q}\hat{P} |\varphi\rangle &= \hat{Q} \left(\int dE' b_{E'} |\psi_{E'}\rangle \right) \\ &= \int dE' b_{E'} \hat{Q} |\psi_{E'}\rangle \\ &= \int dE' b_{E'} |\varphi\rangle\langle\varphi|\psi_{E'}\rangle \\ &= 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{Q} |\varphi\rangle &= \hat{P} (a |\varphi\rangle) \\ &= a \int dE' b_{E'} |\psi_{E'}\rangle\langle\psi_{E'}|\varphi\rangle \\ &= 0, \end{aligned}$$

así que, entonces $\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0$

(*) Sin pérdida de generalidad y por simplicidad se ha tomado un solo estado discreto $|\varphi\rangle$ para describir a \hat{Q} . Sin embargo se podría haber tomado el caso de varios discretos, es decir $\hat{Q} = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ pero como Fano tan solo consideró un estado, así se hará.

$$\begin{aligned}
 \hat{Q}^2|\Psi\rangle &= \hat{Q} (|\varphi\rangle\langle\varphi|\Psi\rangle) \\
 &= (|\varphi\rangle\langle\varphi|)(|\varphi\rangle\langle\varphi|\Psi\rangle) \\
 &= |\varphi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle\langle\varphi|\Psi\rangle \\
 &= |\varphi\rangle\langle\varphi|\Psi\rangle \\
 &= \hat{Q}|\Psi\rangle \quad \text{de donde } \hat{Q}^2 = \hat{Q} .
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{P}^2|\Psi\rangle &= \hat{P} \left(\int dE' |\psi_{E'}\rangle\langle\psi_{E'}| \right) \\
 &= \int dE' \hat{P} |\psi_{E'}\rangle\langle\psi_{E'}|\Psi\rangle \\
 &= \int dE' \int dE'' |\psi_{E''}\rangle\langle\psi_{E''}|\psi_{E'}\rangle\langle\psi_{E'}|\Psi\rangle \\
 &= \int dE' \int dE'' |\psi_{E''}\rangle\delta(E'' - E')\langle\psi_{E'}|\Psi\rangle \\
 &= \int dE' |\psi_{E'}\rangle\langle\psi_{E'}|\Psi\rangle \\
 &= \hat{P}|\Psi\rangle \quad \text{es decir } \hat{P}^2 = \hat{P} .
 \end{aligned}$$

Con todo esto, ahora ya se pueden buscar las relaciones entre los valores esperados de los operadores del tratamiento de dispersión formal y los elementos de matriz descritos en el formalismo de Fano.

Así, la relación para el valor esperado del operador entre los canales cerrados (en éste caso solo hay un canal) será:

$$\begin{aligned}
 \langle\Psi|\hat{H}_{QQ}|\Psi\rangle &= \langle\Psi|\hat{Q}\hat{H}\hat{Q}|\Psi\rangle \\
 &= \langle\Psi|(|\varphi\rangle\langle\varphi|)\hat{H}(|\varphi\rangle\langle\varphi|)|\Psi\rangle \\
 &= \langle\Psi|\varphi\rangle\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle\langle\varphi|\Psi\rangle \\
 &= a^* \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle a \\
 &= |a|^2 \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle \quad . \quad \quad \quad \text{(III.5)}
 \end{aligned}$$

la relación para el valor esperado del operador entre canales abiertos (continuo) será:

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H}_{pp} | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \hat{P} \hat{H} \hat{P} | \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | \left(\int dE'' |\psi_{E''}\rangle \langle \psi_{E''}| \right) \hat{H} \left(\int dE' |\psi_{E'}\rangle \langle \psi_{E'}| \right) | \Psi \rangle \\
 &= \left(\int dE'' \langle \Psi | \psi_{E''}\rangle \langle \psi_{E''}| \right) \hat{H} \left(\int dE' |\psi_{E'}\rangle \langle \psi_{E'}| \Psi \rangle \right) \\
 &= \left(\int dE'' b_{E''}^* \langle \psi_{E''}| \right) \int dE' \hat{H} |\psi_{E'}\rangle b_{E'} \\
 &= \iint dE'' dE' b_{E''}^* b_{E'} \langle \psi_{E''} | \hat{H} | \psi_{E'} \rangle \quad (III.6)
 \end{aligned}$$

y por último para el valor esperado del operador entre canal cerrado y canal abierto (discreto-continuo) será

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H}_{p\Omega} | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \hat{P} \hat{H} \hat{Q} | \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | \left(\int dE' |\psi_{E'}\rangle \langle \psi_{E'}| \right) \hat{H} (|\varphi\rangle \langle \varphi|) | \Psi \rangle \\
 &= \int dE' \langle \Psi | \psi_{E'}\rangle \langle \psi_{E'}| \hat{H} |\varphi\rangle \langle \varphi| \Psi \rangle \\
 &= \int dE' b_{E'}^* \langle \psi_{E'} | \hat{H} | \varphi \rangle a \\
 &= \int dE' a b_{E'}^* \langle \psi_{E'} | \hat{H} | \varphi \rangle \quad (III.7)
 \end{aligned}$$

Si se usan los valores explícitos dados para los elementos de matriz, es decir las expresiones (I.1) del tratamiento de Fano, que determinan E_{φ} , E' y $V_{E'}$, las ecuaciones (III.5) a la (III.6) se reescriben como:

$$\langle \Psi | \hat{H}_{\Omega\Omega} | \Psi \rangle = |a|^2 E_{\varphi} \quad (III.8)$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_{pq} | \Psi \rangle = \int dE' a b_{E'}^* b_{E'} \quad y \quad (\text{III.9})$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H}_{pp} | \Psi \rangle &= \iint dE'' dE' b_{E''}^* b_{E'} \delta(E'' - E') \\ &= \int dE' b_{E'}^* b_{E'} \\ &= \int dE' |b_{E'}|^2 \quad . \quad (\text{III.10}) \end{aligned}$$

Los operadores de proyección \hat{P} y \hat{Q} del tratamiento formal también se relacionarán a través de sus valores esperados con los parámetros a y $b_{E'}$ del formalismo de Fano. Así que el valor esperado del operador \hat{P} del continuo estará relacionado con el parámetro $b_{E'}$ como :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{P} | \Psi \rangle &= \langle \Psi | (\int dE' b_{E'} | \psi_{E'} \rangle) \\ &= \int dE' b_{E'} \langle \Psi | \psi_{E'} \rangle \\ &= \int dE' b_{E'} b_{E'}^* \\ &= \int dE' |b_{E'}|^2 \quad y \quad (\text{III.11}) \end{aligned}$$

el valor esperado del operador \hat{Q} del discreto estará relacionado con el parámetro a como :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle &= \langle \Psi | (| \varphi \rangle \langle \varphi | \Psi \rangle) \\ &= \langle \Psi | (a | \varphi \rangle) \\ &= a \langle \Psi | \varphi \rangle \\ &= |a|^2 \quad . \quad (\text{III.12}) \end{aligned}$$

Resumiendo :

$$\langle \Psi | \hat{H}_{Qq} | \Psi \rangle = |a|^2 E_\varphi . \quad (\text{III.13})$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_{Pq} | \Psi \rangle = \int dE' a b_{E'}^* v_{E'} = (\langle \Psi | \hat{H}_{Op} | \Psi \rangle)^* , \quad (\text{III.14})$$

$$\langle \Psi | \hat{H}_{Pp} | \Psi \rangle = \int dE' |b_{E'}|^2 E' , \quad (\text{III.15})$$

$$\langle \Psi | \hat{P} | \Psi \rangle = \int dE' |b_{E'}|^2 , \quad (\text{III.16})$$

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = |a|^2 \quad (\text{III.17})$$

Estas son la relaciones entre los elementos de ambos formalismos. Ahora, para verificar que los elementos relacionados juegan el mismo papel, se partirá de las ecuaciones acopladas (II.8) y (II.9) del formalismo de operadores para llegar a las expresiones (I.4) y (I.5) del formalismo de Fano. Primero, de las expresiones (III.14) y (III.15) aquí obtenidas se obtendrán las formas de los operadores \hat{H}_{Pq} y \hat{H}_{Pp} en términos de los kets $|\varphi\rangle$ y $|\psi_{E'}\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H}_{Pq} | \Psi \rangle &= \int dE' a b_{E'}^* v_{E'} \\ &= \int dE' v_{E'} \langle \Psi | \psi_{E'} \rangle \langle \varphi | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \left(\int dE' v_{E'} |\psi_{E'}\rangle \langle \varphi| \right) | \Psi \rangle , \end{aligned}$$

así que entonces

$$\hat{H}_{Pq} = \int dE' v_{E'} |\psi_{E'}\rangle \langle \varphi| . \quad (\text{III.18})$$

Por otra parte

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H}_{pp} | \Psi \rangle &= \int dE' |b_{E'}|^2 E' \\ &= \int dE \langle \Psi | \psi_{E'} \rangle \langle \psi_{E'} | \Psi \rangle E \\ &= \langle \Psi | \left(\int dE' E' | \psi_{E'} \rangle \langle \psi_{E'} | \right) | \Psi \rangle \end{aligned}$$

entonces

$$\hat{H}_{pp} = \int dE' E' | \psi_{E'} \rangle \langle \psi_{E'} | \quad (\text{III.19})$$

La primera de las ecuaciones acopladas es la ecuación (II.8) del formalismo de operadores a saber :

$$\hat{H}_{pp} | \Psi \rangle + \hat{H}_{p0} | \Psi \rangle = E \hat{P} | \Psi \rangle .$$

Sustituyendo las ecuaciones (III.18) y (III.19) se tiene - que :

$$\int dE' E' | \psi_{E'} \rangle \langle \psi_{E'} | \Psi \rangle + \int dE' V_{E'} | \psi_{E'} \rangle \langle \psi_{E'} | \Psi \rangle = E \int dE' | \psi_{E'} \rangle \langle \psi_{E'} | \Psi \rangle$$

o bien

$$\int dE' E' | \psi_{E'} \rangle b_{E'} + \int dE' V_{E'} | \psi_{E'} \rangle a = E \int dE' | \psi_{E'} \rangle b_{E'} \quad \text{que}$$

al multiplicarle por $\langle \psi_{E''} |$ se convierte en

$$\int dE' E' \delta(E'' - E') b_{E'} + \int dE' V_{E'} \delta(E'' - E') a = E \int dE' \delta(E'' - E') b_{E'}$$

por lo que

$$E' b_{E'} + V_{E'} a = E b_{E'} \quad (\text{III.20})$$

que es la ecuación (I.4) del formalismo de Fano.

La segunda de las ecuaciones acopladas es la ecuación (II.9) del formalismo de operadores a saber :

$$\hat{H}_{qq} |\Psi\rangle + \hat{H}_{qp} |\Phi\rangle = E \hat{Q} |\Psi\rangle ,$$

multiplicándola con $\langle \Psi |$ por la izquierda se tiene que :

$$\langle \Psi | \hat{H}_{qq} |\Psi\rangle + \langle \Psi | \hat{H}_{qp} |\Phi\rangle = E \langle \Psi | \hat{Q} |\Psi\rangle \quad \text{y}$$

si se substituyen aquí las expresiones para los valores esperados de los operadores que están dadas por las ecuaciones (III.13), (III.14) y (III.17) se obtiene

$$|a|^2 E_p + \left(\int dE' a b_E^* V_E \right)^* = E |a|^2 \quad \text{ó bien}$$

$$|a|^2 E_p + \int dE' a^* b_E V_E^* = E |a|^2 ,$$

por lo que $\int dE' a^* b_E V_E^* = |a|^2 (E - E_p)$ que al multiplicarla por a da como resultado la ecuación (I.5) del formalismo de Fano:

$$\int dE' b_E V_E^* + E_p a = a E . \quad \text{(III.21)}$$

Entonces, de esto se tiene que los elementos relacionados juegan el mismo papel por lo tanto el formalismo de operadores de proyección y el formalismo de Fano son equivalentes.

Con éstas bases, en lo que resta de ésta sección se verá - que las expresiones para la energía y para el ancho de banda en la resonancia son iguales en ambos formalismos.

En el formalismo de Fano, la resonancia se da cuando el -

valor de la energía es:

$$E_{\text{Fano}} = E_{\varphi} + F = E_{\varphi} + \int dE' \frac{|V_{E'}|^2}{E - E'}$$

con dispersión formal, la resonancia se obtiene cuando la energía cumple la relación :

$$E_{\text{Disp}} = \xi_s + \Delta^{(s)} \quad \text{y}$$

en ese tratamiento se vió que la ξ_s es el valor esperado del operador \hat{H}_{oa} con el eigenvector $|\phi_s\rangle$ del discreto, siendo éste $|\phi_s\rangle$ el vector de estado resonante que se separó de los demás - vectores resonantes al pedir que la energía cumpla la relación $E \sim \xi_s$. Fano en su tratamiento consideró un solo estado del discreto que además es resonante y lo llamó $|\varphi\rangle$. Como se vió en ésta sección, el operador \hat{Q} que corresponde al formalismo de Fano se define únicamente con $|\varphi\rangle$, cuyo valor esperado de energía es E_{φ} . Entonces es claro que los vectores $|\phi_s\rangle$ y $|\varphi\rangle$ son el mismo vector tan solo con diferente nombre. Consecuentemente

$$E_{\varphi} = \xi_s$$

lo cual es cierto ya que $\hat{Q}|\phi_s\rangle = |\phi_s\rangle$ y entonces

$$\begin{aligned} \xi_s &= \langle \phi_s | \hat{H}_{\text{oa}} | \phi_s \rangle \\ &= \langle \phi_s | \hat{Q} \hat{H} \hat{Q} | \phi_s \rangle \\ &= (\langle \phi_s | \phi_s \rangle \langle \phi_s |) \hat{H} (|\phi_s\rangle \langle \phi_s | \phi_s \rangle) \\ &= \langle \phi_s | \hat{H} | \phi_s \rangle \\ &= \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle \\ &= E_{\varphi} . \end{aligned}$$

(III.22)

Por lo anterior, para demostrar la igualdad entre energías tan solo basta demostrar que

$$\Delta^{(s)} = F(E) = \rho \int dE' \frac{|V_{E'}|^2}{E - E'}$$

En el tratamiento de dispersión formal se encontró que (ec. (II.30)) :

$$\Delta^{(s)} = \langle \psi_s | \hat{H}_{ap} \rho \left[\frac{1}{E - \hat{H}'} \right] \hat{H}_{pa} | \psi_s \rangle$$

en donde \hat{H}' es la parte del Hamiltoniano que varía lentamente con la energía y está dado por la ecuación (II.20) :

$$\hat{H}' = \hat{H}_{pp} + \sum_{n \neq s} \frac{\hat{H}_{pa} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \hat{H}_{ap}}{E - \epsilon_n}$$

pero en éste caso el operador \hat{Q} para el formalismo de Fano tan solo consta de un término, $|\psi_s\rangle$, por lo que $\hat{H}' = \hat{H}_{pp}$. O sea que :

$$\begin{aligned} \Delta^{(s)} &= \langle \psi_s | \hat{H}_{ap} \rho \left[\frac{1}{E - \hat{H}_{pp}} \right] \hat{H}_{pa} | \psi_s \rangle \\ &= \langle \psi_s | \hat{Q} \hat{H} \hat{P} \rho \left[\frac{1}{E - \hat{H}_{pp}} \right] \hat{P} \hat{H} \hat{Q} | \psi_s \rangle \\ &= \langle \psi_s | \hat{H} \hat{P} \rho \left[\frac{1}{E - \hat{H}_{pp}} \right] \hat{P} \hat{H} | \psi_s \rangle . \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

Las relaciones (III.13) - (III.17) están en términos del vector de estado $|\Psi\rangle$ y la expresión que se tiene que calcular está en términos del vector de estado discreto $|\psi_s\rangle$, por eso lo primero que se hará será reescribir a $\hat{P} \hat{H} |\psi_s\rangle$ en términos de $|\Psi\rangle$.

Si a la ecuación de Schrödinger $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ se le aplica el operador \hat{P} por la izquierda y se sustituye el vector $|\Psi\rangle$ del lado izquierdo en términos de los operadores \hat{P} y \hat{Q} se tiene :

$$\hat{P}\hat{H}|\Psi\rangle = E\hat{P}|\Psi\rangle$$

$$\hat{P}\hat{H}(\hat{Q}|\Psi\rangle + \hat{P}|\Psi\rangle) = E\hat{P}|\Psi\rangle$$

$$\hat{P}\hat{H}(a|\phi_s\rangle + \hat{P}|\Psi\rangle) = E\hat{P}|\Psi\rangle$$

$$a\hat{P}\hat{H}|\phi_s\rangle + \hat{H}_{pp}|\Psi\rangle = E\hat{P}|\Psi\rangle, \text{ así que}$$

$$a\hat{P}\hat{H}|\phi_s\rangle = E\hat{P}|\Psi\rangle - \hat{H}_{pp}|\Psi\rangle$$

$$= (E - \hat{H}_{pp})\hat{P}|\Psi\rangle, \text{ de donde}$$

$$\hat{P}\hat{H}|\phi_s\rangle = \frac{E - \hat{H}_{pp}}{a}\hat{P}|\Psi\rangle \quad \text{y (III.24)}$$

el bra asociado a éste ket será

$$\begin{aligned} \langle\phi_s|\hat{H}\hat{P} &= \langle\phi_s|\hat{H}^t\hat{P}^t \\ &= \langle\Psi|\hat{P}^t \frac{(E^* - \hat{H}_{pp}^t)}{a^*} \\ &= \langle\Psi|\hat{P} \frac{(E^* - \hat{H}_{pp})}{a^*}, \quad \text{(III.25)} \end{aligned}$$

en donde se usó el hecho de que el operador \hat{P} , por ser de proyección es hermitiano $\hat{P}^t = \hat{P}$ (Cohen (1977)); el Hamiltoniano también es un operador hermitiano $\hat{H}^t = \hat{H}$, por lo que la energía E es real; asimismo, por lo anterior, el operador \hat{H}_{pp} también

es hermitiano ya que :

$$\hat{H}_{pp}^{\dagger} = (\hat{P} \hat{H} \hat{P})^{\dagger} = (\hat{P} (\hat{H} \hat{P}))^{\dagger} = (\hat{H} \hat{P})^{\dagger} \hat{P}^{\dagger} = (\hat{H} \hat{P})^{\dagger} \hat{P} = \hat{P}^{\dagger} \hat{H} \hat{P} = \hat{P} \hat{H} \hat{P} = \hat{H}_{pp} \quad (\text{III.26})$$

y como el valor esperado de \hat{H}_{pp}^{\dagger} es $\langle \hat{H}_{pp}^{\dagger} \rangle = \int dE' |b_{E'}|^2 E'^*$ y el valor esperado de \hat{H}_{pp} es $\langle \hat{H}_{pp} \rangle = \int dE |b_E|^2 E$, necesariamente:

$$E'^* = E' \quad (\text{III.27})$$

Sustituyendo las expresiones encontradas para $\hat{P} \hat{H} |\phi_s\rangle$ y $\langle \phi_s | \hat{H} \hat{P}$ (ec. III.24-25) en la ecuación (III.23) :

$$\begin{aligned} \Delta^{(s)} &= (\langle \phi_s | \hat{H} \hat{P}) \rho \left[\frac{1}{E - \hat{H}_{pp}} \right] (\hat{P} \hat{H} |\phi_s\rangle) \\ &= \langle \Psi | \hat{P} \frac{E - \hat{H}_{pp}}{a^*} \rho \left[\frac{1}{E - \hat{H}_{pp}} \right] \frac{E - \hat{H}_{pp}}{a} \hat{P} | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{P} \frac{E - \hat{H}_{pp}}{a} \rho \left[\frac{E - \hat{H}_{pp}}{E - \hat{H}_{pp}} \right] \frac{\hat{P}}{a} | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{|a|^2} \langle \Psi | \hat{P} (E - \hat{H}_{pp}) \hat{P} | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{|a|^2} \left[\langle \Psi | \hat{P} E \hat{P} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{P} \hat{H}_{pp} \hat{P} | \Psi \rangle \right] \\ &= \frac{1}{|a|^2} \left[E \langle \Psi | \hat{P} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{H}_{pp} | \Psi \rangle \quad \text{Y} \end{aligned}$$

sustituyendo las ecuaciones (III.15) y (III.16) se obtiene:

$$\begin{aligned} \Delta^{(s)} &= \frac{1}{|a|^2} \left(E \int dE' |b_{E'}|^2 - \int dE' |b_{E'}|^2 E' \right) \\ &= \int dE' \left(\frac{E |b_{E'}|^2 - E' |b_{E'}|^2}{|a|^2} \right) \\ &= \int dE' \frac{|b_{E'}|^2}{|a|^2} (E - E') \quad (\text{III.28}) \end{aligned}$$

De la ecuación (III.20), se obtiene la norma de V_E , como:

$$\begin{aligned}
 |V_E|^2 &= V_E V_E^* \\
 &= \frac{|b_E|^2 (E-E')}{a b_E^*} \frac{|b_E|^2 (E-E')}{a^* b_E} \\
 &= \frac{|b_E|^2 (E-E')^2}{|a|^2} .
 \end{aligned} \tag{III.29}$$

Ahora si se multiplica la ecuación (III.28) por la relación $(E - E') / (E - E')$, para lo cual se tiene que usar la parte principal para evitar discontinuidades, y si se sustituye la ecuación (III.29), se obtiene el resultado buscado :

$$\begin{aligned}
 \Delta^{(s)} &= \mathcal{P} \int dE' \frac{|b_E|^2 (E - E')}{|a|^2} \frac{(E - E')}{(E - E')} \\
 &= \mathcal{P} \int dE' \frac{|b_E|^2 (E - E')^2}{|a|^2 (E - E')} \\
 &= \mathcal{P} \int dE' \frac{|V_E|^2}{(E - E')} \\
 &= F(E) .
 \end{aligned} \tag{III.30}$$

Por lo tanto, de las ecuaciones (III.22) y (III.30), y de las ecuaciones para las energías de resonancia tanto para el formalismo de Fano como en el de dispersión formal, se verifica la igualdad :

$$E_{\text{Disp}} = E_{\text{Fano}} . \tag{III.31}$$

Ahora se verificará la igualdad para los anchos de resonancia en ambas descripciones.

En el tratamiento de Fano se encuentra un ancho de resonancia

cia dado por la ecuación (I.15) :

$$\Gamma_{\text{fondo}} = 2\pi |V_E|^2$$

con la teoría de dispersión formal, el ancho lo da la ecuación (II.31) :

$$\Gamma_{\text{Disp}} = 2\pi \langle \psi_s | \hat{H}_{0p} \delta(E - \hat{H}') \hat{H}_{p0} | \psi_s \rangle .$$

Usando las ecuaciones (III.24) y (III.25) en la expresión anterior se encuentra que:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{Disp}} &= 2\pi \langle \psi_s | \hat{H}\hat{P} \delta(E - \hat{H}_{pp}) (\hat{P}\hat{H} | \psi_s \rangle) \\ &= 2\pi \langle \Psi | \hat{P} \frac{E - \hat{H}_{pp}}{a^*} \delta(E - \hat{H}_{pp}) \left(\frac{E - \hat{H}_{pp}}{a} \hat{P} | \Psi \rangle \right) \\ &= \frac{2\pi}{|a|^2} \langle \Psi | \hat{P} (E - \hat{H}_{pp}) \left\{ E \delta(E - \hat{H}_{pp}) \hat{H} | \Psi \rangle - \delta(E - \hat{H}_{pp}) \hat{H}_{pp} | \Psi \rangle \right\} , \end{aligned}$$

a continuación, se sustituyen las expresiones para los operadores \hat{P} y \hat{H}_{pp} dadas por las ecuaciones (III.11) y (III.19) respectivamente para obtener :

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{Disp}} &= \frac{2\pi}{|a|^2} \langle \Psi | \hat{P} (E - \hat{H}_{pp}) \left\{ E \delta(E - \hat{H}_{pp}) \int dE' b_E | \psi_E \rangle - \delta(E - \hat{H}_{pp}) \int dE' b_E E' | \psi_E \rangle \right\} \\ &= \frac{2\pi}{|a|^2} \left[\langle \Psi | \hat{P} (E - \hat{H}_{pp}) \right] \left[E \int dE' b_E \delta(E - \langle \psi_E | \hat{H}_{pp} | \psi_E \rangle) | \psi_E \rangle - \int dE' b_E E' \delta(E - \langle \psi_E | \hat{H}_{pp} | \psi_E \rangle) | \psi_E \rangle \right] , \end{aligned} \quad (\text{III.32})$$

pero $\langle \psi_E | \hat{H}_{pp} | \psi_E \rangle = \langle \psi_E | \hat{P}\hat{H}\hat{P} | \psi_E \rangle$

$$= \langle \psi_E | \hat{H} | \psi_E \rangle$$

$$= E' \quad \text{entonces :}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{D,sp} &= \frac{2\pi}{|a|^2} \left[\langle \Psi | \hat{P} (E - \hat{H}_{pp}) \right] \left[E \int dE' b_{E'} \delta(E-E') |\psi_{E'}\rangle - \int dE' b_{E'} E' \delta(E-E') |\psi_{E'}\rangle \right] \\
&= \frac{2\pi}{|a|^2} \left[\langle \Psi | \hat{P} (E - \hat{H}_{pp}) \right] \left[E b_{E'} |\psi_{E'}\rangle - E' b_{E'} |\psi_{E'}\rangle \right] \\
&= \frac{2\pi}{|a|^2} b_{E'} (E E \langle \Psi | \hat{P} | \psi_{E'} \rangle - E \langle \Psi | \hat{P} \hat{H}_{pp} | \psi_{E'} \rangle - E' E \langle \Psi | \hat{P} | \psi_{E'} \rangle + E' \langle \Psi | \hat{P} \hat{H}_{pp} | \psi_{E'} \rangle) \\
&= \frac{2\pi}{|a|^2} b_{E'} (E^2 \langle \Psi | \psi_{E'} \rangle - E \langle \Psi | \hat{H}_{pp} | \psi_{E'} \rangle - E' E \langle \Psi | \psi_{E'} \rangle + E' \langle \Psi | \hat{H}_{pp} | \psi_{E'} \rangle) \\
&= \frac{2\pi}{|a|^2} b_{E'} (E^2 b_{E'}^* - E \langle \Psi | \hat{H}_{pp} | \psi_{E'} \rangle - E' E b_{E'}^* + E' \langle \Psi | \hat{H}_{pp} | \psi_{E'} \rangle) \\
&= \frac{2\pi}{|a|^2} b_{E'} (E^2 b_{E'}^* - E E' \langle \Psi | \psi_{E'} \rangle - E' E b_{E'}^* + E' E' \langle \Psi | \psi_{E'} \rangle) \\
&= \frac{2\pi}{|a|^2} b_{E'} (E^2 b_{E'}^* - E E' b_{E'}^* - E' E b_{E'}^* + E'^2 b_{E'}^*) \\
&= \frac{2\pi |b_{E'}|^2}{|a|^2} (E^2 - 2E'E + E'^2) \\
&= 2\pi \frac{|b_{E'}|^2}{|a|^2} (E - E')^2 \\
&= 2\pi |v_{E'}|^2 \\
&= \Gamma_{Fano} .
\end{aligned}$$

(III.34)

Por lo tanto esta ecuación muestra la igualdad para los anchos de resonancia encontrados en cada formalismo:

$$\Gamma_{D,sp} = \Gamma_{Fano}$$

CONCLUSION

En la sección anterior se encontraron las relaciones - entre los elementos de la teoría de dispersión formal con los elementos del tratamiento de Fano. Asimismo, se comprobó que las relaciones entre los elementos de la teoría de dispersión o sea las ecuaciones acopladas, corresponden a una relación - equivalente entre los elementos de la teoría de Fano.

Por lo tanto, queda entonces demostrada la equivalencia entre los dos formalismos.

COMENTARIO

En la comunicación de las ideas físicas de cualquier teoría es de suma importancia la claridad en el lenguaje con que se expresan. Este lenguaje, no es necesariamente único. En los problemas que se estudiaron se encuentra precisamente esto. Por un lado el lenguaje para la descripción del problema de autoionización y por otro lado el lenguaje utilizado para el estudio formal de las resonancias atómicas..

En éstos términos, el presente trabajo es un intérprete - entre ambos formalismos ya que comprueba su equivalencia y su valor está en relación a la importancia que vaya tomando la - teoría de resonancias en física atómica, ya que se está asegurando que para el tratamiento de resonancias se pueden tomar - las ideas de Fano del fenómeno de autoionización, es decir la formulación de perfiles de línea.

APENDICE A

A) La ecuación (I.13a) es:

$$a^*(E) \left\{ 1 + \int dE' v_{E'}^* \left[\frac{1}{\bar{E} - E'} + Z(\bar{E}) \delta(\bar{E} - E') \right] \left[\frac{1}{E - E'} + Z(E) \delta(E - E') \right] v_{E'} \right\} a(E) =$$

$$= \delta(\bar{E} - E), \quad (\text{A.1})$$

desarrollando el producto entre corchetes se tiene:

$$\left[\frac{1}{\bar{E} - E'} + Z(\bar{E}) \delta(\bar{E} - E') \right] \left[\frac{1}{E - E'} + Z(E) \delta(E - E') \right] =$$

$$= \frac{1}{(\bar{E} - E')(E - E')} + \frac{Z(E) \delta(E - E')}{\bar{E} - E'} + \frac{Z(\bar{E}) \delta(\bar{E} - E')}{E - E'} + Z(E) Z(\bar{E}) \delta(\bar{E} - E') \delta(E - E)$$

$$(\text{A.2})$$

La integral del segundo y el tercer término de la ecuación (A.2) es:

$$\int dE' v_{E'}^* \left[\frac{Z(E) \delta(E - E')}{\bar{E} - E'} + \frac{Z(\bar{E}) \delta(\bar{E} - E')}{E - E'} \right] v_{E'} =$$

$$= \int dE' v_{E'}^* \frac{Z(E) \delta(E - E')}{\bar{E} - E'} v_{E'} + \int dE' v_{E'}^* \frac{Z(\bar{E}) \delta(\bar{E} - E')}{E - E'} v_{E'} =$$

$$= \frac{Z(E) |v_E|^2}{\bar{E} - E} + \frac{Z(\bar{E}) |v_{\bar{E}}|^2}{E - \bar{E}}$$

$$= \frac{1}{E - E'} (Z(E) |V_{\xi}|^2 - Z(\bar{E}) |V_{\xi}|^2). \quad (\text{A.3})$$

El primer término de la ecuación (A.2) se descompone en fracciones parciales* como :

$$\frac{1}{(\bar{E}-E')(E-E')} = \frac{1}{\bar{E}-E} \left(\frac{1}{E-E'} + \frac{1}{\bar{E}-E'} \right) + \pi^2 \delta(\bar{E}-E') \delta\left[E'+1/2(\bar{E}+E)\right]. \quad (\text{A.4})$$

Entonces para la integral del primer término de la ecuación (A.4) se usa la ecuación (I.10) que define a la función F(E), así:

$$\int dE' V_{\xi}^* \frac{1}{\bar{E}-E} \left(\frac{1}{E-E'} + \frac{1}{\bar{E}-E'} \right) V_{\xi} = \frac{1}{\bar{E}-E} (F(E) + F(\bar{E})). \quad (\text{A.5})$$

Faltan por integrar el último término de la ec. (A.2) y el segundo término de la ec. (A.4). Usando la relación :

$$f(\bar{E}) \delta(E-E') = f(E) \delta(E-E'), \quad (\text{A.6})$$

se reescribe al último término de la ecuación (A.2) como

$$Z(E)Z(\bar{E}) \delta(\bar{E}-E') \delta(E-E') = Z(E) Z(\bar{E}) \delta(\bar{E}-E') \delta(E-E'). \quad (\text{A.7})$$

En virtud a que $\delta(\bar{E}-E') \delta\left[E'+1/2(\bar{E}+E)\right] = \delta(\bar{E}-E') \delta(E-E')$, se pueden agrupar el último término de la ec. (A.2) (ahora (A.7)) con el segundo término de la ec. (A.4) de tal forma que :

$$\begin{aligned} Z(E)Z(\bar{E}) \delta(\bar{E}-E') \delta(E-E') + \pi^2 \delta(\bar{E}-E') \delta\left[E-1/2(\bar{E}+E)\right] &= \\ &= (Z(E)Z(\bar{E}) + \pi^2) \delta(\bar{E}-E') \delta(E-E'), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

(*) La descomposición en fracciones parciales la hace Fano en el apéndice A de su artículo (1961).

cuya integral es :

$$\int dE' V_E^* (Z(E)Z(E') + \kappa^2) \delta(\bar{E}-E') \delta(E-E') V_E =$$

$$= |V_E|^2 (\kappa^2 + Z^2(E)) \delta(\bar{E}-E). \quad (\text{A.9})$$

Entonces las ecuaciones (A.3), (A.5) y (A.9) son las partes integradas de la ecuación (A.2), que se substituye en la ecuación (A.1) para obtener:

$$|a(E)|^2 |V_E|^2 (\kappa^2 + Z^2(E)) \delta(\bar{E}-E) +$$

$$+ a(\bar{E}) \left\{ 1 + \frac{1}{\bar{E} - E} (F(E) - F(\bar{E}) + Z(E) |V_E|^2 - Z(\bar{E}) |V_{\bar{E}}|^2) \right\} \times$$

$$\times a(E) = \delta(\bar{E}-E), \quad (\text{A.10})$$

que es la ecuación (I.13b).

B)

La ecuación (I.18) para la probabilidad de excitación del vector de estado (Ψ_E) es :

$$\langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle = \frac{1}{\pi V_E^*} \langle \Phi | \hat{T} | i \rangle \text{Sen } \Delta - \langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle \text{Cos } \Delta \quad (\text{A.11})$$

La energía reducida ξ se define en la ecuación (I.20) como:

$$\xi = -\text{Cot } \Delta = -\text{Cos } \Delta / \text{Sen } \Delta = \frac{E - E - F}{\pi |V_E|^2}, \quad (\text{A.12})$$

$$\text{de donde} \quad \text{Cos } \Delta = -\xi \text{ Sen } \Delta. \quad (\text{A.13})$$

El parámetro q está definido en la ecuación (I.21) como,

$$q = \frac{\langle \Phi | \hat{T} | i \rangle}{\pi V_E^* \langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle}, \text{ de donde}$$

$$\langle \Phi | \hat{T} | i \rangle = \pi V_E^* \langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle q. \quad (\text{A.14})$$

Susituyendo las ecuaciones (A.13) y (A.14) en la ecuación (A.11), se reescribe ésta última como :

$$\langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle = \langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle q \text{Sen } \Delta + \langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle \xi \text{Sen } \Delta,$$

$$\text{o bien,} \quad \langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle = (q + \xi) \langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle \text{Sen } \Delta, \quad (\text{A.15})$$

$$\text{por lo que :} \quad \left| \frac{\langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle}{\langle \Psi_E | \hat{T} | i \rangle} \right|^2 = (q + \xi)^2 |\text{Sen } \Delta|^2. \quad (\text{A.16})$$

De la ecuación (I.16) y de la ecuación (I.14) se puede expresar a $|\text{Sen } \Delta|^2$ como

$$|\text{Sen } \Delta|^2 = \left| \frac{a \pi V_E}{\pi^2 + \mathbf{z}^2} \right|^2 = \frac{\pi^2}{\pi^2 + \mathbf{z}^2} = \frac{1}{1 + \mathbf{z}^2/\pi^2}, \quad (\text{A.17})$$

pero de las ecuaciones (I.11) y de la definición de la energía reducida dada en la ecuación (A.12), es claro que,

$$z = \pi \xi , \quad (\text{A.18})$$

por lo que la ecuación (A.17) se reescribe como,

$$|\text{sen } \Delta|^2 = \frac{1}{1 + \xi^2} \quad (\text{A.19})$$

Finalmente, sustituyendo la ecuación anterior en la ecuación (A.16), se obtiene la ecuación (I.22) :

$$\left| \frac{\langle \hat{T}_\xi | \hat{T} | 1 \rangle}{\langle \hat{T}_\xi | \hat{T} | 1 \rangle} \right|^2 = \frac{(\alpha + \xi)^2}{1 + \xi^2} . \quad (\text{A.20})$$

Apéndice B

La matriz \hat{T} efectiva para la ecuación de Schrodinger $\hat{H}|\mathcal{E}\rangle = E|\mathcal{E}\rangle$ es

$$\langle \mathcal{E} | \hat{T} | \mathcal{E} \rangle = \langle \mathcal{E} | \hat{V}_{0pt} | \hat{P} \Psi^+ \rangle, \quad (\text{B.1})$$

siendo $|\mathcal{E}\rangle$ un eigenvector del operador \hat{H}_{pp} que es la parte del Hamiltoniano \hat{H}^1 que describe el movimiento sin perturbar entre la partícula incidente y el blanco.

Sustituyendo la expresión para $|\hat{P} \Psi^+\rangle$ ec (II.25) en la ecuación (B.1)*; y recordando que el vector $|\hat{P} \Psi_0^+\rangle$ es la solución saliente no resonante de

$$(\hat{H} - E) |\hat{P} \Psi_0^+\rangle = 0 \quad \text{y} \quad (\text{B.2})$$

que por lo tanto satisface que

$$\begin{aligned} P \Psi_0^+ &= \mathcal{E}_0 + \left[1 / (E^\dagger - H_0) \right] (H' - H_0) P \Psi_0^+ \\ &= \left\{ 1 + \left[1 / (E^\dagger - H') \right] (H' - \hat{T}_0) \right\} \mathcal{E}_0, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

se ve que

$$\langle \mathcal{E} | \hat{V}_{0pt} | \hat{P} \Psi_0^+ \rangle = \langle \mathcal{E} | \hat{H}' - \hat{H}_0 | \hat{P} \Psi_0^+ \rangle + \underbrace{\left(\frac{\langle \mathcal{E} | \hat{H}_{pa} | \mathcal{E}_0 \rangle \langle \mathcal{E}_0 | \hat{H}_{ap} | \hat{P} \Psi_0^+ \rangle}{E - (E_0 + \Delta) + i/2\Gamma} \right)}_{\text{nores} \quad \text{reson}} \quad (\text{B.4})$$

que es la ecuación (II.33)

(*) En el artículo de Taylor se hace referencia a M.L. Goldberg y K. M. Watson "Collision Theory" (John Wiley and Sons, Inc 1964).

REFERENCIAS

- Biondi M., Phys. Today, págs 44-49, October (1979)
- Burke P. M. , Schey H., Phys. Rev., 126, 147 (1962)
- Cohen C., Diu B., Laloe F., 1, 116-121 (1977)
- De la Peña L., Introducción a la Mecánica Cuántica, 543-548 (1979)
- Fano U., Phys. Rev., 124, 1866 (1961)
- Fano U., Phys. Rev., 137, A1364 (1965)
- Feshbach H., Ann. Rev. Nuclear Sci., 8, 49 (1958)
- Feshbach H., Ann. Phys., 19, 237 (1962)
- Holbien E., Proc. Phys. Soc (London), A71, 357 (1958)
- Lipsky L., Russek A., Phys. Rev., 126, 147 (1962)
- Peterkop R., Veldre V., Advan. Atomic Mol. Phys. 2, 263-326 (1966)
- Rotberg L.S., Introduction to the Quantum Theory of Scattering, 163-186 (1967)
- Schulz G.J., Rev. Mod. Phys., 42, 4063 (1963)
- Taylor H., Williams J.K., Chem. Phys., 42, 4063 (1963)
- Taylor H., Nazarov V., Golebiewski A., J. Chem. Phys., 45, 2872 (1966)