



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

INTERACCION DE ELECTRONES
RAPIDOS CON ALEACIONES
(TEORIA Y APLICACIONES)

263553

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
GERMAN RIVERA VAZQUEZ

DIRECTOR DE TESIS:

DR. RAMIRO GARCIA GARCIA



MEXICO, D. F.

JUNIO 1998



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
P r e s e n t e

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:"INTERACCION DE ELECTRONES RAPIDOS CON ALEACIONES (TEORIA Y APLICACIONES)".

realizado por GERMAN RIVERA VAZQUEZ

con número de cuenta 7635529-7 , pasante de la carrera de FISICA.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

DR. RAMIRO GARCIA GARCIA

Propietario

DR. LUIS FELIPE DEL CASTILLO DAVILA

Propietario

M. EN C. AUGUSTO CABRERA MANUEL

Suptente

DR. JOSE REYES GASGA

Suptente

DR. ALFONSO HUANOSTA TERA

Consejo Departamental de Física

DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FISICA

*A la obrera...
quien con su ejemplo
me ha enseñado,
a no darme por
vencido.*

*A mis hermanos,
compañera e hija.*

AGRADECIMIENTOS.

Todo trabajo de tesis sólo puede obtenerse con la ayuda proporcionada por un gran número de personas; entre las principales están los miembros del jurado. De esta manera, estoy en deuda y agradecido con: el Dr. Luis Felipe del Castillo Davila, el M. en C. Augusto Cabrera Manuel, el Dr. José Reyes Gasga y el Dr. Alfonso Huanosta Tera por haber aceptado ser parte del jurado y por sus valiosas sugerencias, preguntas, observaciones y material proporcionado (las fotografías de la fig. 2 fueron donadas por el Dr. Reyes Gasga), los cuales enriquecieron el trabajo final de esta tesis y mejoró su presentación.

También, agradezco los conocimientos proporcionados por todos los profesores que formaron parte de mi educación, siendo esta tesis el fruto de todo ese trabajo; y que por miedo a omitir a alguno, no pongo sus nombres. Así también, le doy gracias a todos mis amigos, quienes de alguna u otra forma contribuyeron para que terminara la carrera; y por la misma razón anterior no escribo sus nombres.

Al Fis. Rene Ortega, quien además de ser un gran amigo, me ayudó durante todo el tiempo con la impresión desde borradores hasta el trabajo final de la tesis; le estoy muy agradecido.

Especialmente agradezco al Dr. Ramiro García García por haber sido mi director de tesis, así como por haber comprendido y respetado mi estilo de estudiar. Durante todo el tiempo confió en mí y no lo defraude, ya que, su intuición científica me condujo a encontrar los resultados obtenidos en esta tesis y por lo tanto, me permitirá publicar parte de ésta. Por su amistad brindada, por los conocimientos proporcionados y por todo el material otorgado, estaré siempre en deuda con él.

Finalmente, pido una disculpa a mi compañera Magui y a mi hija Estefanía, por tener que haber soportado mis repentinos cambios de estado de ánimo y el poco tiempo que les he dedicado durante los últimos años.

INDICE

	Página
INTRUDUCCION	3
CAPITULO 1. EL ELECTRON EN UN CAMPO EXTERIOR	6
1.1 Sección transversal diferencial	7
1.2 Electrones en presencia de un campo electromagnético	9
CAPITULO 2. DISPERSION DE ELECTRONES EN UN CAMPO COULOMBIANO	20
2.1 Expresión para el corrimiento de fase	21
2.2 Ecuación de dispersión relativista	39
2.3 Convergencia de la expansión de las ondas parciales	46
2.4 Obtención de $G(\theta)$ como una función de $F(\theta)$	55
CAPITULO 3. SECCION TRANSVERSAL DIFERENCIAL EN TERMINOS DE VARIABLES DINAMICAS Y SUS APLICACIONES ..	58
3.1 Variables dinámicas	59
3.2 Daño por radiación electrónica en $Al_{62}Cu_{20}Co_{15}Si_3$ y $YBa_2Cu_3O_7$	63
CONCLUSIONES	67
GRAFICAS	69
BIBLIOGRAFIA	74

**INTERACCION DE
ELECTRONES RAPIDOS CON
ALEACIONES (TEORIA Y
APLICACIONES).**

INTRODUCCION.

En el estudio de las propiedades de los materiales, como cerámicas (aislantes, eléctricas o superconductoras) y aleaciones, por medio de la microscopía electrónica convencional y de alta resolución (100 KeV a 400 KeV), se ha observado, que el haz de electrones rápidos (Hobs [9] define a los electrones rápidos, a aquellos cuyos voltajes de aceleración son arriba de 10 KeV , mientras que Mott [16] los menciona en todo momento, sin definirlos) causan daños en las muestras. El objetivo de esta tesis es describir y caracterizar el mecanismo del posible daño (el cual puede ser iónico o de choque directo) causado en una aleación (en particular en una cerámica y en un cuasicristal), por la interacción de electrones rápidos en el intervalo (0.1 MeV , 2 MeV) con ésta.

Debido a que la interacción del haz de electrones con los átomos de la muestra es del tipo coulombiano, entonces se trata de colisiones elásticas. Como las velocidades de los electrones (en el intervalo de energías mencionado) se encuentran entre (0.56 c , 0.98 c), donde c es la velocidad de la luz, entonces deben tratarse desde el punto de vista cuántico-relativista. Por lo que es necesario obtener la ecuación relativista de Mott [16] para dispersión de partículas. Para la obtención de ésta, se usará la ecuación de Dirac [5] para electrones en presencia de un campo electromagnético; para resolverla, este trabajo se basará en el método usado por Darwin [4], y de esta forma, obtener la función de dispersión del haz dispersado por medio del corrimiento de fase; obteniendo finalmente la sección eficaz de dispersión relativista de Mott [16]. Mott [16] por su parte usa los resultados de Dirac [5], Darwin [4] y Gordon [8], para obtener la sección eficaz de dispersión. En este trabajo se mostrará como llegar a dichos resultados y los errores que se encontraron en este artículo. También se mostrará que una de las componentes de la función de dispersión se puede poner en términos de la otra, lo cual permite obtener una evaluación más exacta de la ecuación de Mott, cuando ésta es requerida.

Por otra parte, la expresión obtenida (la ecuación de Mott) se puede escribir en función de la energía cinética del haz de electrones, por lo que ésta se puede usar para determinar la cantidad de energía que puede ser transferida al núcleo o electrones de la

muestra. Existen dos expresiones para la sección eficaz de dispersión en función de la energía cinética del haz de electrones: una es la de Lehmann [13] y la otra es la de Hobbs [9]. Debido a esto se mostrará como obtener una por medio de la otra.

Finalmente, se mostrará que la energía cinética del haz de electrones rápidos puede transferirse al núcleo o electrones de la muestra, y provocar cambios en ésta, por lo que es la causante principal del daño (principalmente el daño de choque directo). La forma de mostrarlo es por medio de una simulación con un programa de cómputo, escrito en lenguaje Turbo-Pascal o directamente en Excel para máquinas PC. El cálculo no pretende describir el proceso de como se lleva a cabo el daño en la aleación, sino que por medio de éste, se puede obtener información sobre la energía cinética que deben tener los electrones para poder desprender un determinado tipo de átomo en la aleación, y ya está operando para el caso de interacción entre un haz de electrones y una muestra de la aleación del $Al_{62}Cu_{20}Co_{15}Si_3$ y también con la de $YBa_2Cu_3O_7$.

Estos resultados son relevantes en la investigación que se lleva a cabo en la caracterización de aleaciones por medio de microscopía electrónica. Además se tiene en el intervalo de energía mencionado un continuo, y puede también aplicarse en los trabajos con radiación de electrones provenientes de un acelerador (trabajando en dicho intervalo de energías).

Por último se tiene que la mayoría de los libros de Mecánica Cuántica que hay en español, son traducciones realizadas en diferentes países, por lo que a la sección eficaz de dispersión también se le conoce como: sección diferencial de dispersión, sección transversal diferencial o simplemente sección eficaz. Debido a esto en lo sucesivo se usará **sección transversal diferencial**. A la función de dispersión se le encuentra como: amplitud de dispersión; por lo que se usará **función de dispersión**. Finalmente al desplazamiento de fase se le llama: corrimiento de fase; por lo que se usará el término **corrimiento de fase**.

El plan de la tesis es el siguiente:

En el capítulo 1 se presenta la sección transversal diferencial para una partícula desde el punto de vista de la mecánica cuántica y se muestra el porque es necesario el uso de la teoría relativista. Se obtiene la ecuación de onda fundamental para la teoría relativista del electrón en presencia de un campo electromagnético, así como la ecuación que Mott llama ecuación de Dirac de segundo grado.

En el capítulo 2 se resuelve la ecuación de onda fundamental para la teoría relativista del electrón, tomando como base el método usado por Darwin. Se determina el corrimiento de fase por medio de las soluciones obtenidas. Se determina la función de dispersión por medio de los corrimientos de fase. Se analiza la convergencia de las series infinitas de las ondas parciales, para asegurar su convergencia. Finalmente, se muestra como poder obtener una de las series de ondas parciales por medio de la otra.

En el capítulo 3 se clasifica el tipo de daño producido en una aleación (o muestra), debido a la interacción del haz de electrones con los átomos de ésta. Se pone la sección transversal diferencial en función de la energía cinética del haz de electrones. Se obtiene la sección transversal de dispersión. Se aplica la expresión teórica obtenida, en particular, en dos aleaciones (una es un cuasicristal y la otra una cerámica superconductora) y se comparan los resultados con los obtenidos experimentalmente.

Finalmente se muestran las conclusiones obtenidas en este trabajo.

Capítulo 1

EL ELECTRON EN UN CAMPO EXTERIOR.

La mayoría de los trabajos que tratan el tema de dispersión de partículas desde el punto de vista relativista, mencionan el artículo de Mott [16]. Al revisar este artículo, se observa que él se basa en expresiones obtenidas por Dirac [5], Darwin [4] y Gordon [8]. Pero al checar estos artículos, se observa que algunas de las expresiones (o afirmaciones que hace Mott) no son del todo iguales. Debido a esto, en este capítulo y en el siguiente se mostrará como llegar a las expresiones más importantes que usa Mott para obtener la sección transversal diferencial y mostrar los errores que se encontraron.

En el inciso 1.1 se muestra que la sección transversal diferencial se obtiene por medio de la función de dispersión y por que es necesario usar la teoría relativista. Para poder encontrar la función de dispersión es necesario resolver la ecuación de Dirac [5] (la ecuación de onda fundamental para la teoría relativista del electrón). En el inciso 1.2 se muestra que la ecuación de Dirac puede expresarse en forma lineal o por medio de una ecuación de segundo grado, la cual depende sólo del radio; en ambos casos no se obtienen las soluciones.

1.1 Sección transversal diferencial.

El choque de dos partículas, desde el punto de vista de la mecánica clásica, está determinado por sus momentos angulares y por el parámetro de impacto. Desde el punto de vista cuántico el planteamiento del problema es diferente, ya que, el movimiento con velocidades determinadas y el concepto de trayectoria, junto con el de parámetro de choque, deja de tener sentido. En mecánica cuántica solo podemos hablar de la probabilidad de que, como resultado de la colisión, las partículas se desvien formando tal o cual ángulo. Si en el proceso no se produce ninguna transformación de las partículas, ni varía su estado interno, entonces se dice que las colisiones son elásticas.

En el caso de colisiones elásticas, como todo problema de dos cuerpos, se reduce al análisis de la dispersión de una partícula, equivalente a la masa reducida, moviéndose en el potencial $V(r)$ de un centro de fuerza fijo. De este modo, la solución de la ecuación de Schrödinger que describe el proceso de dispersión en el potencial $V(r)$ debe tener a grandes distancias ($r \rightarrow \infty$) la forma asintótica

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

El primer término corresponde a una onda plana incidente, la cual representa el estado del sistema en ausencia del potencial dispersor y está determinado por las condiciones físicas del experimento; el segundo corresponde a una onda esférica divergente saliente. La función $f(\theta)$ se llama amplitud de dispersión (o función de dispersión) y representa la amplitud de probabilidad de que la partícula incidente emerja a lo largo de la dirección del ángulo de dispersión θ como resultado de la colisión.

Si un detector se encuentra en P (caracterizado por las coordenadas polares r, θ, φ), como muestra la fig. 1, subtendiendo un cono del ángulo sólido $d\Omega$ del origen, entonces a la densidad del flujo incidente (o flujo de probabilidad de la onda incidente) normalizada a la unidad es,

$$j_{inc} = \frac{\mathbf{p}}{m} |\psi_{inc}|^2 = \frac{\mathbf{p}}{m}.$$

Usando la misma normalización, el flujo de probabilidad de la onda dispersada en la dirección \hat{n} (correspondiente a la dirección del ángulo θ) es:

$$\mathbf{j}_{dis} \cdot \frac{\hat{n}p}{m} |\psi_{dis}|^2 = \frac{\hat{n}p}{m} \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}$$

Pero la probabilidad de que la partícula dispersada pase en la unidad de tiempo por el elemento de superficie $d\mathbf{S}$ después de la colisión es $\mathbf{j}_{dis} \cdot d\mathbf{S}$. Si $d\mathbf{S}$ se encuentra a una distancia r del origen, entonces

$$\mathbf{j}_{dis} \cdot d\mathbf{S} = \frac{p}{m} |f(\theta)|^2 \frac{\hat{n} \cdot d\mathbf{S}}{r^2} = \frac{p}{m} |f(\theta)|^2 d\Omega,$$

ya que $\hat{n} \cdot d\mathbf{S} = r^2 d\Omega$. Por lo tanto, se tiene que la razón de esta probabilidad a la densidad de flujo de la onda incidente es igual a:

$$d\sigma = \frac{\mathbf{j}_{dis} \cdot d\mathbf{S}}{|\mathbf{j}_{inc}|} = |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

Esta magnitud tiene dimensiones de área, se llama sección transversal diferencial, y representa el número de partículas dispersadas por unidad de flujo incidente dentro del ángulo sólido $d\Omega$.

Físicamente $d\sigma$ es el área efectiva transversal en la región de interacción que intercepta a la densidad de flujo incidente y la transfiere al ángulo sólido $d\Omega$. Por otra parte, en la práctica no se tiene una sola partícula incidente y una sola partícula dispersada (partícula blanco), sino un haz de partículas incidentes sobre un conjunto de partículas blanco. Entonces, si el flujo de partículas incidentes es J por cm^2 y por segundo y el número de partículas blanco es N , el número de partículas dN que emergen por segundo en $d\Omega$ es

$$dN = JN d\sigma = JN |f(\theta)|^2 d\Omega,$$

de aquí se observa que cada partícula blanco tiene un área efectiva $d\sigma$ para interceptar una partícula incidente y dispersarla en $d\Omega$. La cantidad dN es una cantidad que se

observa experimentalmente; y la observación de secciones y su dependencia de la energía y dirección es la principal fuente de información sobre las interacciones entre partículas. Debido a esto, la información que puede ser obtenida acerca de las interacciones se logra a partir de las secciones observadas. Por lo tanto, el problema de dispersión de partículas, se reduce a encontrar la función de dispersión $f(\theta)$, la cual a su vez puede ser expresada por medio del corrimiento de fase de las ondas parciales.

En nuestro caso, las partículas que están en movimiento son electrones, cuyos voltajes de aceleración se encuentran en el intervalo de $[0.1 \text{ MeV} , 2 \text{ MeV}]$; pero un electrón con una energía cinética de 0.1 MeV se mueve con una velocidad de $0.56c$ (donde c es la velocidad de la luz), por lo que se encuentra muy cerca del límite relativista (el límite relativista se considera a partir de $\frac{1}{2}c$, si $v \leq \frac{1}{2}c$ el tratamiento puede ser clásico; pero si $v > \frac{1}{2}c$ el tratamiento debe ser relativista); por otra parte, los electrones con energía cinética de 2 MeV se mueven con una velocidad de $0.98c$, lo cual ya es cercano a c , pero si la energía fuera mayor a 2 MeV , la velocidad se acercaría mucho a c . Debido a esto, el problema se debe tratar con la teoría relativista.

1.2 ELECTRONES EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELECTROMAGNETICO.

Desde el punto de vista de la teoría relativista la expresión de la energía de una partícula libre con masa en reposo m_0 y momentum \mathbf{p} es

$$E = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2c^2}$$

Remplazando el operador \mathbf{p} por sus componentes \hat{p}_i se obtiene que

$$E = c\sqrt{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2 + m_0^2c^2} \quad (1.1)$$

Aplicando la "función de estado" ψ al sistema (1.1), se obtiene la ecuación de onda:

$$\left[E - (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2 + m_0^2 c^2)^{1/2} \right] \psi = 0 \quad (1.2)$$

Pero esta ecuación no es invariante ante las transformaciones de Lorentz, debido a la asimetría entre E y los operadores \hat{p}_i .

Si la ecuación (1.2) se multiplica por la izquierda por el operador

$$\left[E + (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2 + m_0^2 c^2)^{1/2} \right],$$

se obtiene la siguiente ecuación

$$\left[E^2 - \hat{p}_1^2 - \hat{p}_2^2 - \hat{p}_3^2 - m_0^2 c^2 \right] \psi = 0 \quad (1.3)$$

la cual ya es invariante y, por lo tanto, puede ser tomada como la base de una teoría relativista. Claramente se observa que el sistema (1.3) es diferente al (1.2) ya que no todas las soluciones de (1.3) son de (1.2), pero el caso contrario sí es válido. De esta forma se tiene que solo las soluciones de (1.3) con valores positivos de E son soluciones de (1.2).

Por otra parte, la ecuación (1.3) no es de la forma requerida por las leyes de la mecánica cuántica debido a la existencia del cuadrado de E , lo cual lleva a ecuaciones no lineales. Para poder linealizar la expresión de la energía, Dirac [5] la expresa de la siguiente forma

$$\frac{E}{c} = \sqrt{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2 + m_0^2 c^2} = \alpha_1 \hat{p}_1 + \alpha_2 \hat{p}_2 + \alpha_3 \hat{p}_3 + \beta m_0 c^2 \quad (1.4)$$

donde $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ y β son matrices de 4×4 y corresponden a operadores no conmutativos

y cumplen con las siguientes reglas algebraicas

$$\begin{aligned} \alpha_r^2 = \beta^2 = 1, \quad \text{si } (r = s) \\ \alpha_r \alpha_s + \alpha_s \alpha_r = 0, \quad \alpha_r \beta + \beta \alpha_r = 0, \quad \text{si } (r \neq s) \end{aligned} \tag{1.5}$$

Las matrices que cumplen las reglas anteriores son de la forma

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \alpha_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \alpha_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \beta &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.6}$$

Obsérvese que

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \alpha_x, \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \alpha_y, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \alpha_z$$

corresponden a las matrices espinoriales de Pauli, cuya álgebra es idéntica a las de Dirac.

Por lo tanto, las matrices de (1.6) se pueden poner en la forma compacta

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \alpha_x, & \alpha_2 &= \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \alpha_y, \\ \alpha_3 &= \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \alpha_z, & \beta &= \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.7}$$

donde I es la matriz identidad. De esta forma se tiene que la ecuación de onda correcta

para una partícula en movimiento en ausencia de un campo está dada por

$$\left[E - \alpha_1 \hat{p}_1 - \alpha_2 \hat{p}_2 - \alpha_3 \hat{p}_3 - \beta m_0 c^2 \right] \psi = 0 \quad (1.8)$$

Substituyendo las matrices de (1.7) en (1.8), ésta puede quedar en notación de vectores tridimensionales como:

$$\left[E - \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} [\sigma, \mathbf{cp}] - \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} m c^2 \right] \psi = 0 \quad (1.9)$$

donde $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$.

Como las matrices de Pauli son de 2×2 y las de Dirac de 4×4 , para que no haya inconsistencia Dirac propone otras matrices, las cuales son

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \rho_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

éstas a su vez cumplen con las reglas de operación de (1.5) respectivamente y además que

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \rho_1 \sigma_1, & \alpha_2 &= \rho_1 \sigma_2 \\ \alpha_3 &= \rho_1 \sigma_3, & \beta &= \rho_3 \end{aligned}$$

por lo que la ecuación (1.9) queda finalmente como

$$\left[(E) - \rho_1 [\sigma, \mathbf{cp}] - \rho_3 m c^2 \right] \psi = 0 \quad (1.10)$$

Cuando la partícula es un electrón de masa m y se encuentra en presencia de un campo electromagnético de potenciales ϕ y \mathbf{A} , entonces sólo hay que substituir $p_0 = \frac{E}{c}$ por $p_0 + \frac{e}{c}\phi$ y \mathbf{p} por $\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$ en (1.10) obteniéndose

$$\left\{ \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right) - \rho_1 \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] - \rho_3 mc \right\} \psi = 0. \quad (1.11)$$

La cual es la ecuación de onda fundamental para la teoría relativista del electrón. Físicamente \mathbf{A} corresponde al potencial vectorial magnético, y para el caso nulo la ecuación (1.11) es la ecuación (2) de Mott [16].¹

Si se multiplica la ecuación de onda (1.11) (por la derecha) por el operador

$$\left[\left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right) + \rho_1 \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] + \rho_3 mc \right]$$

se obtiene que

$$\begin{aligned} & \left\{ - \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right)^2 + \left(\rho_1 \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \right)^2 + (\rho_1\rho_3 + \rho_3\rho_1) \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] + \right. \\ & \left. + \rho_3^2 m^2 c^2 + \rho_1 \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right) - \rho_1 \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right) \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \right\} \psi = 0 \end{aligned}$$

pero de (1.5) se tiene que

$$\rho_3^2 = 1, \quad \rho_1^2 = 1 \quad \text{y} \quad \rho_1\rho_3 + \rho_3\rho_1 = 0$$

por lo que se obtiene

$$\begin{aligned} & \left\{ - \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right)^2 + \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right]^2 + m^2 c^2 + \right. \\ & \left. + \rho_1 \left(\left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right) - \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right) \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \right) \right\} \psi = 0 \end{aligned} \quad (1.12)$$

¹Donde $p_0 = \frac{E}{c}$ y \mathbf{p} es el operador $-i\hbar\nabla$.

Por otra parte se tiene que si \mathbf{B} y \mathbf{C} son dos cualesquiera vectores tridimensionales que conmutan con σ , entonces la siguiente identidad se cumple para los productos de conmutadores:

$$[\sigma, \mathbf{B}][\sigma, \mathbf{C}] = (\sigma_1 B_1 + \sigma_2 B_2 + \sigma_3 B_3)(\sigma_1 C_1 + \sigma_2 C_2 + \sigma_3 C_3)$$

desarrollando el producto y tomando en cuenta que las σ_i anticonmutan, se obtiene

$$[\sigma, \mathbf{B}][\sigma, \mathbf{C}] = [\mathbf{B}, \mathbf{C}] + \sigma_1 \sigma_2 (B_1 C_2 - B_2 C_1) + \sigma_1 \sigma_3 (B_1 C_3 - B_3 C_1) + \sigma_2 \sigma_3 (B_2 C_3 - B_3 C_2)$$

pero

$$\sigma_1 \sigma_2 = i \sigma_3, \quad \sigma_1 \sigma_3 = -i \sigma_2 \quad \text{y} \quad \sigma_2 \sigma_3 = i \sigma_1$$

y para el producto vectorial

$$\mathbf{B} \times \mathbf{C} = (B_2 C_3 - B_3 C_2) \hat{i} - (B_1 C_3 - B_3 C_1) \hat{j} + (B_1 C_2 - B_2 C_1) \hat{k},$$

por lo que se obtiene que

$$[\sigma, \mathbf{B}][\sigma, \mathbf{C}] = [\mathbf{B}, \mathbf{C}] + i [\sigma, \mathbf{B} \times \mathbf{C}].$$

En nuestro caso $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$ por lo que

$$\begin{aligned} \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 &= \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + i \left[\sigma, \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] \\ &= \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + i \left[\sigma, -i \frac{\hbar e}{c} \nabla \times \mathbf{A} \right] \end{aligned}$$

ya que $\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) = -i \frac{\hbar e}{c} \nabla \times \mathbf{A}$ debido a que \mathbf{p} y \mathbf{A} no conmutan entre sí y

$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$. De esta forma se tiene

$$\left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right]^2 = \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + \frac{\hbar e}{c}[\sigma, \nabla \times \mathbf{A}] \quad (1.13)$$

Por otra parte, al distribuir el producto del último término de la ec. (1.12) se tiene

$$\begin{aligned} \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi\right) &= \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] p_0 + \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] \frac{e}{c}\phi \\ - \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi\right) \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] &= -p_0 \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] - \frac{e}{c}\phi \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] \end{aligned}$$

sumando miembro a miembro estas dos últimas expresiones se obtiene

$$\left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi\right) - \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi\right) \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] = \frac{e}{c}[\sigma, \mathbf{p}\phi] - \frac{e}{c}[\sigma, p_0\mathbf{A}]$$

ya que \mathbf{p} y \mathbf{A} no conmutan con σ , tomando en cuenta que

$$p_0 = \frac{\hbar}{c} \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{y} \quad \mathbf{p} = -i\hbar\nabla$$

tenemos que

$$\begin{aligned} \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi\right) - \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi\right) \left[\sigma, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right] &= -\frac{i\hbar e}{c}[\sigma, \nabla\phi] - \frac{i\hbar e}{c} \left[\sigma, \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right] \\ &= -\frac{i\hbar e}{c} \left[\sigma, \nabla\phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right] \end{aligned} \quad (1.14)$$

Substituyendo (1.13) y (1.14) en (1.12) se obtiene

$$\begin{aligned} \left\{ - \left(p_0 + \frac{e}{c}\phi\right)^2 + m^2 c^2 + \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + \frac{\hbar e}{c}[\sigma, \text{rot}\mathbf{A}] - \right. \\ \left. - \frac{i\hbar e}{c} \rho_1 \left[\sigma, \nabla\phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right] \right\} \psi = 0 \end{aligned}$$

como \mathbf{A} es el potencial vectorial magnético y ϕ es el potencial eléctrico, entonces

$$\text{rot}\mathbf{A} = \mathcal{H} \quad \text{y} \quad -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{E}$$

por lo que finalmente se tiene que

$$\left[-\left(p_0 + \frac{e}{c}\phi \right)^2 + \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + m^2c^2 + \frac{e\hbar}{c} [\sigma, \mathcal{H}] + i \frac{e\hbar}{c\rho_1} [\sigma, \mathbf{E}] \right] \psi = 0 \quad (1.15)$$

Los tres primeros términos corresponden a los términos de la ecuación de Klein-Gordon. La aparición de los dos últimos son debido a que el electrón posee un espín. Al primero de los dos términos extras se le puede considerar como energía potencial adicional, que poseen los electrones lentos en la teoría cuántica; es decir, su forma es la de la energía potencial de un dipolo magnético en un campo exterior. De esta manera, en primera aproximación (respecto de $\frac{1}{c}$) el electrón se comporta como una partícula que posee, además de una carga, un momento magnético

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc} \sigma = \frac{e}{mc} \hbar s$$

Este momento magnético se observa en el efecto Zeeman y está de acuerdo con los experimentos. Además, la razón giromagnética (e/mc) es el doble de la que sería para un momento magnético asociado con el movimiento orbital. El segundo término extra no presenta una interpretación física directa; pero al no tener parte real, puede poseer algún efecto físico nuevo².

También se tiene que entre las soluciones estacionarias de la ecuación (1.15) se obtienen soluciones para energías tanto positivas como negativas, ya que, los valores propios del hamiltoniano de un electrón libre son iguales a $\pm c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2}$. Debido a esto se pueden tener estados tanto del espectro continuo como del discreto. El espectro continuo de valores propios de la energía se encuentra para $E \geq mc^2$ y para $E \leq -mc^2$,

²Mott lo relaciona con el espín del electrón y como uno de los causantes de la dispersión.

lo cual corresponde (al igual que la teoría no-relativista) a un movimiento infinito en el que el electrón puede encontrarse a distancia infinita. región considerada como libre. Pero si $-mc^2 < E < mc^2$, el electrón no puede encontrarse en el infinito, por lo que el movimiento es finito y el estado pertenece al espectro discreto.

Regresando a la ecuación (1.15). Si solo hay interacción debido a un campo eléctrico, en ausencia del campo magnético $\mathbf{A} = 0$ y $\mathcal{H} = 0$, dicha ecuación queda

$$\left[- \left(p_0 + \frac{e}{c} \phi \right)^2 + \mathbf{p}^2 + m^2 c^2 + i \frac{\hbar e}{c} \rho_1 [\sigma, \mathbf{E}] \right] \psi = 0. \quad (1.16)$$

Como el potencial eléctrico es debido a un campo coulombiano, éste tiene simetría esférica y por lo cual $\phi = \frac{Zc}{r}$ y $\mathbf{E} = \frac{Zc}{r^2} \mathbf{r}$; substituyendo en (1.16) y tomando en cuenta que $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ se obtiene

$$\left[- \left(p_0 + \frac{e}{c} \phi \right)^2 - \hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^2 + i \frac{\hbar Z e^2}{c r^3} \rho_1 [\sigma, \mathbf{r}] \right] \psi = 0$$

como $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, entonces

$$\left[\nabla^2 + \frac{4\pi}{h^2} (p_0^2 - m^2 c^2) + 2 \left(\frac{2\pi Z e^2}{hc} \right) \left(\frac{2\pi p_0}{h} \right) \frac{1}{r} + \left(\frac{2\pi Z e^2}{hc} \right)^2 \frac{1}{r^2} - i \left(\frac{2\pi Z e^2}{hc} \right) \frac{1}{r^3} \rho_1 [\sigma, \mathbf{r}] \right] \psi = 0$$

sea $\alpha = \frac{2\pi Z e^2}{hc} = \frac{Z}{137}$

$$\left[\nabla^2 + \frac{4\pi^2}{h^2} (p_0^2 - m^2 c^2) + \left(\frac{2\pi p_0}{h} \right) \frac{2\alpha}{r} + \frac{\alpha^2}{r^2} - i \frac{\alpha}{r^3} \rho_1 [\sigma, \mathbf{r}] \right] \psi = 0 \quad (1.17)$$

Pero se tiene que $\mathbf{p}^2 = p_0^2 - m^2 c^2$; tomando la razón $\frac{2\alpha}{p} = \mu$ y substituyendo en (1.17)

$$\left[\nabla^2 + \left(\frac{2\pi p}{h} \right)^2 + \left(\frac{2\pi p}{h} \right) \frac{2\alpha\mu}{r} + \frac{\alpha^2}{r^2} - i \frac{\alpha}{r^3} \rho_1 [\sigma, \mathbf{r}] \right] \psi = 0$$

Como $\lambda = \frac{\hbar}{2\pi p}$ se puede tomar como unidad de longitud, finalmente

$$\left[\nabla^2 + 1 + \frac{2\alpha\mu}{r} + \frac{\alpha^2}{r^2} - i\frac{\alpha}{r^3}\rho_1[\sigma, \mathbf{r}] \right] \psi = 0, \quad (1.18)$$

y corresponde a la ecuación (17) de Mott [16], la cual llama ecuación de onda de segundo grado para los electrones de Dirac. En el artículo de Dirac [5] no aparece de esta forma, sino como se obtuvo en (1.15).

∇^2 en coordenadas polares esféricas está dada por

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (1.19)$$

y

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (1.20)$$

substituyendo (1.20) en (1.19)

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

substituyendo ∇^2 en (1.18)

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} + 1 + \frac{2\alpha\mu}{r} + \frac{\alpha^2}{r^2} - i\frac{\alpha}{r^3}\rho_1[\sigma, \mathbf{r}] \right] \psi = 0$$

lo cual implica que

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2 - \hbar^2 \alpha^2}{\hbar^2 r^2} + 1 + \frac{2\alpha\mu}{r} \right] \psi = 0$$

$$- i\frac{\alpha}{r^3}\rho_1[\sigma, \mathbf{r}] \psi = 0 \quad (1.21)$$

De esta manera se tiene que la parte real de (1.21) es una ecuación diferencial de segundo orden, que solo depende de r , la cual se puede resolver por el método de ondas

parciales para un potencial coulombiano modificado. Además, no todas las soluciones de ésta son soluciones de (1.11) ya que , como se mencionó anteriormente hay soluciones, tanto para energías positivas como negativas. Por lo tanto, solo las correspondientes a energías positivas son soluciones de (1.11). Como el caso que se está tratando es el del electrón, éste corresponde a energías positivas (el caso de energías negativas es el del positrón), entonces da lo mismo resolver la ecuación (1.21) o la (1.11) para encontrar la ecuación de onda de interés, o mejor dicho, para encontrar la función de dispersión que se busca.

Capítulo 2

DISPERSION DE ELECTRONES EN UN CAMPO COULOMBIANO.

En el capítulo anterior se vio que la sección transversal diferencial se obtiene por medio de la función de dispersión; pero ésta puede calcularse por medio de los corrimientos de fase. Por otra parte, uno de los términos que aparece en las soluciones de la ecuación de onda para la teoría relativista del electrón, es el corrimiento de fase. Debido a esto en el inciso 2.1 se resolverá la ecuación (1.11) basandonos en el método de Darwin [4], el cual consiste en ponerla como un sistema de ecuaciones diferenciales lineales. Pero Darwin usó este método para el caso discreto de energías, por lo que las soluciones se dejarán en términos de la función hipergeométrica degenerada; para el caso continuo de energías (que es el correspondiente a la dispersión de partículas) se usarán estas soluciones tan solo haciendo unos cambios, por lo tanto, se resolverán las funciones hipergeométricas y se dejarán en términos del radio y funciones Gama, obteniéndose finalmente el corrimiento de fase.

En el inciso 2.2 se encontrará la función de dispersión, la cual está compuesta por dos componentes y éstos a su vez están expresados como una serie infinita que depende

de los corrimientos de fase y de los polinomios de Legendre (a este método se le llama de ondas parciales); pero como son series infinitas que convergen condicionalmente en el inciso 2.3 se mostrará como asegurar la convergencia para cualquier ángulo de dispersión.

Como las soluciones quedan en términos de un coeficiente que Mott denota por R , se mostrará como obtenerlo, ya que difiere al expresado en Mott y Massey [17]. Finalmente se calculará la sección transversal diferencial. En Berestetskii y Lifshitz [2] se menciona que las componentes de la función de dispersión pueden expresarse mediante una misma función $F(\theta)$; en el inciso 2.4 se mostrará cual es y como obtenerla.

2.1 EXPRESION PARA EL CORRIMIENTO DE FASE.

En el capítulo anterior se encontró la ecuación de onda fundamental para la teoría relativista del electrón, la ecuación (1.11), pero su expresión en forma compacta está dada por

$$\left[(cp_0 + e\phi) + \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} [\sigma, \mathbf{c}\mathbf{p} + e\mathbf{A}] + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} mc^2 \right] \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0$$

donde $\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$; aplicando a la función de onda el operador y efectuando las operaciones con las matrices se obtiene

$$(cp_0 + e\phi) \psi_A + [\sigma, \mathbf{c}\mathbf{p} + e\mathbf{A}] \psi_B + mc^2 \psi_B = 0$$

$$(cp_0 + e\phi) \psi_B + [\sigma, \mathbf{c}\mathbf{p} + e\mathbf{A}] \psi_A + mc^2 \psi_A = 0$$

Pero, como ya se dijo en el capítulo anterior, $\mathbf{A} = 0$ para el caso puramente coulombiano y las componentes de σ son las matrices de Pauli, efectuando el producto punto se obtiene el sistema

$$(cp_0 + e\phi) \psi_A + c(\sigma_x \hat{p}_x + \sigma_y \hat{p}_y + \sigma_z \hat{p}_z) \psi_B + mc^2 \psi_B = 0$$

$$(cp_0 + e\phi)\psi_B + c(\sigma_x\hat{p}_x + \sigma_y\hat{p}_y + \sigma_z\hat{p}_z)\psi_A + mc^2 = 0 \quad (2.1)$$

Como ψ es una función biespinorial, es decir, es un 4-vector, entonces

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \Rightarrow \psi_A = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \psi_B = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Substituyendo ψ_A y ψ_B en (2.1) obtenemos el sistema

$$\begin{aligned} (cp_0 + e\phi)\psi_1 + c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_4 + c\hat{p}_z\psi_3 + mc^2\psi_1 &= 0 \\ (cp_0 + e\phi)\psi_2 + c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_3 - c\hat{p}_z\psi_4 + mc^2\psi_2 &= 0 \\ (cp_0 + e\phi)\psi_3 + c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_2 + c\hat{p}_z\psi_1 - mc^2\psi_3 &= 0 \\ (cp_0 + e\phi)\psi_4 + c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_1 - c\hat{p}_z\psi_2 - mc^2\psi_4 &= 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

El sistema anterior tiene solución no trivial si su determinante es cero, obteniéndose

$$\begin{aligned} \Delta &= \left[p_0^2 - (mc^2)^2 - c^2(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \right]^2 = 0 \\ \Rightarrow & \quad \frac{E^2}{c^2} - m^2c^2 - \mathbf{p}^2 = 0 \end{aligned}$$

donde $p_0 = \frac{E}{c}$

$$E = \pm \sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + (mc^2)^2}$$

Obsérvese como esto es congruente con la teoría relativista: la energía puede tomar valores positivos y negativos, lo cual ya se había dicho en el capítulo anterior. Por lo tanto, solo los positivos se considerarán por corresponder al caso del electrón.

Para encontrar la solución del sistema (2.2) es necesario poner las componentes de \mathbf{p}

en notación de operadores

$$\begin{aligned}
 \frac{i}{\hbar} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) \psi_1 + \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_4 + \frac{\partial}{\partial z} \psi_3 &= 0 \\
 \frac{i}{\hbar} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) \psi_2 + \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_3 - \frac{\partial}{\partial z} \psi_4 &= 0 \\
 \frac{i}{\hbar} \left(\frac{E + e\phi}{c} - mc \right) \psi_3 + \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_2 + \frac{\partial}{\partial z} \psi_1 &= 0 \\
 \frac{i}{\hbar} \left(\frac{E + e\phi}{c} - mc \right) \psi_4 + \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_1 - \frac{\partial}{\partial z} \psi_2 &= 0
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

De la ecuación (1.21) se tiene que las soluciones solo dependen del radio; además, que las soluciones para energías positivas de ésta, también deben ser del sistema (2.3), y por otra parte ϕ depende solo del radio. Entonces se pueden expresar las cuatro funciones con ayuda de los armónicos esféricos multiplicados por una función radial. Para esto, se usará la siguiente fórmula para los armónicos esféricos, dada por Darwin [4]

$$P_k^u = (k-u)! \operatorname{sen}^u \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{k+u} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^k}{2^k \cdot k!} e^{iu\phi}$$

la cual está definida para cualquier valor entero positivo k y para cualquier valor de u entre $\pm k$ inclusive.

Si f es una función radial, entonces se cumple que (Darwin [4])

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) f P_k^u &= \frac{1}{2k+1} \left[\left(\frac{df}{dr} - \frac{k}{r} f \right) P_{k+1}^{u+1} - (k-u)(k-u-1) \left(\frac{df}{dr} + \frac{k+1}{r} f \right) P_{k-1}^{u+1} \right] \\
 \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) f P_k^u &= \frac{1}{2k+1} \left[- \left(\frac{df}{dr} - \frac{k}{r} f \right) P_{k+1}^{u-1} + (k+u)(k+u-1) \left(\frac{df}{dr} + \frac{k+1}{r} f \right) P_{k-1}^{u-1} \right] \\
 \frac{\partial}{\partial z} f P_k^u &= \frac{1}{2k+1} \left[\left(\frac{df}{dr} - \frac{k}{r} f \right) P_{k+1}^u + (k+u)(k-u) \left(\frac{df}{dr} + \frac{k+1}{r} f \right) P_{k-1}^u \right]
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Obsérvese que si $k = u$, entonces los factores $(k-u)$ en los segundos términos se anulan.

De esta forma podemos ver que el sistema (2.3) tiene relaciones que se anularían, depen-

diendo de la forma de los armónicos. Entonces se pueden usar soluciones de prueba, por ejemplo:

$$\psi_1 = -ia_1 F(r) P_{k+1}^u, \quad \psi_2 = -ia_2 F(r) P_{k+1}^{u+1}$$

$$\psi_3 = a_3 G(r) P_k^u, \quad \psi_4 = a_4 G(r) P_k^{u+1}$$

el factor $-i$ se introduce en ψ_1 y ψ_2 para que $F(r)$ sea real. Entonces se encuentra que los coeficientes a_i se pueden arreglar de tal forma que las cuatro ecuaciones los satisfagan. Substituyendo las ψ_i en el sistema (2.3) tenemos que la primera ecuación es:

$$\frac{a_1}{\hbar} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) F(r) P_{k+1}^u + \frac{a_3 - a_4}{2k+1} \left(\frac{dG(r)}{dr} - \frac{k}{r} G(r) \right) P_{k+1}^u +$$

$$+ \frac{k+u}{2k+1} [a_4(k+u+1) + a_3(k-u)] \left(\frac{dG(r)}{dr} + \frac{k+1}{r} G(r) \right) P_{k-1}^u = 0$$

Obsérvese que si $a_4(k+u+1) + a_3(k-u) = 0$, entonces el término P_{k-1}^u se anula¹ y

$$\frac{a_1}{\hbar} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) F + \frac{a_3 - a_4}{2k+1} \left(\frac{dG}{dr} - \frac{k}{r} G \right) = 0 \quad (2.5)$$

En la segunda ecuación se obtiene

$$\frac{a_1}{\hbar} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) F P_{k+1}^{u+1} + \frac{a_3 - a_4}{2k+1} \left(\frac{dG}{dr} - \frac{k}{r} G \right) P_{k+1}^{u+1} -$$

$$- (k-u-1) [a_3(k-u) + a_4(k+u+1)] \left(\frac{dG}{dr} + \frac{k+1}{r} G \right) P_{k-1}^{u+1} = 0$$

aquí el término P_{k-1}^{u+1} se anula y la ecuación queda

$$\frac{a_2}{\hbar} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) F + \frac{a_3 - a_4}{2k+1} \left(\frac{dG}{dr} - \frac{k}{r} G \right) = 0 \quad (2.6)$$

¹En lo sucesivo en las funciones $F(r)$ y $G(r)$ se omitirá la variable r .

En la tercera ecuación se tiene que

$$\begin{aligned} & \frac{a_3}{h} \left(\frac{E + e\phi}{c} - mc \right) G P_k^u - \frac{a_1 - a_2}{2k + 3} \left(\frac{dF}{dr} - \frac{k + 1}{r} F \right) P_{k+2}^{u+1} - \\ & - \frac{k + u + 1}{2k + 3} [a_2 (k + u + 2) + a_1 (k - u + 1)] \left(\frac{dF}{dr} + \frac{k + 2}{r} F \right) P_k^u = 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

y en la cuarta ecuación

$$\begin{aligned} & \frac{a_4}{h} \left(\frac{E + e\phi}{c} - mc \right) G P_k^{u+1} - \frac{a_1 - a_2}{3k + 3} \left(\frac{dF}{dr} - \frac{k + 1}{r} F \right) P_{k+2}^{u+1} + \\ & + \frac{k - u}{2k + 3} [a_1 (k - u + 1) + a_2 (k + u + 2)] \left(\frac{dF}{dr} + \frac{k + 2}{r} F \right) P_k^{u+1} = 0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

si $a_1 = a_2$ entonces el término P_{k+2}^u en (2.7) se anula y el término P_{k+2}^{u+1} en (2.8) también.

Por lo que

$$\frac{a_3}{h} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) G - (k + u + 1) \left(\frac{dF}{dr} + \frac{k + 2}{r} F \right) = 0 \quad (2.9)$$

y

$$\frac{a_4}{h} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) G + (k - u) \left(\frac{dF}{dr} + \frac{k + 2}{r} F \right) = 0 \quad (2.10)$$

Por otra parte, de las ecuaciones (2.5), (2.6) y (2.9) se tiene que si

$$a_3 - a_4 = 2k + 1 \quad y \quad a_3 = k + u + 1$$

entonces

$$a_4 = -k + u$$

Sustituyendo a_3, a_4 y $a_1 - a_2 = 1$ en (2.5), (2.6), (2.9) y (2.10) respectivamente se obtienen las soluciones que forman un conjunto completo

$$\psi_1 = -iF P_{k+1}^u, \quad \psi_2 = -iF P_{k+1}^{u+1}$$

$$\psi_3 = (k + u + 1)GP_k^u, \quad \psi_4 = (-k + u)GP_k^{u+1} \quad (2.11)$$

donde F y G satisfacen las relaciones:

$$\begin{aligned} \frac{1}{h} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) F + \frac{dG}{dr} - \frac{k}{r} G &= 0 \\ -\frac{1}{h} \left(\frac{E + e\phi}{c} - mc \right) G + \frac{dF}{dr} + \frac{k+2}{r} F &= 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Este es el sistema (7.5) de Darwin [4], que corresponde al (13) de Mott [16].

Pero si $a_1 = a_2 = 1$ y $a_4 = k - u$, entonces debe cumplirse que

$$a_3 - a_4 = -(2k + 1) \Rightarrow a_3 = -(k + u + 1)$$

Por lo que se obtendría otro conjunto de soluciones completas

$$\begin{aligned} \psi_1 &= -iF P_{k+1}^u, & \psi_2 &= -iF P_{k+1}^{u+1} \\ \psi_3 &= -(k + u + 1)GP_k^u, & \psi_4 &= (k - u)GP_k^{u+1} \end{aligned} \quad (2.13)$$

cuyas funciones F y G satisfacerían las relaciones

$$\begin{aligned} -\frac{1}{h} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) F + \frac{dG}{dr} - \frac{k}{r} G &= 0 \\ \frac{1}{h} \left(\frac{E + e\phi}{c} + mc \right) G + \frac{dF}{dr} + \frac{k+2}{r} F &= 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Obsérvese que existe una diferencia de signo entre el sistema (2.12) y el (2.14), el cual no se hubiese podido obtener por medio de una factorización. Además, si $k = j - 1$ en (2.14), el sistema corresponde al de la pag. 622 de Dirac [5] y que es el que usa Gordon [8].

Pero si

$$\psi_1 = -iG P_{k+1}^u, \quad \psi_2 = -iG P_{k+1}^{u+1}$$

$$\psi_3 = a_3 F P_k^u, \quad \psi_4 = a_4 F P_k^{u+1}$$

procediendo de manera análoga a la anterior y tomando en cuenta que si

$$a_1 = a_2 = 1, \quad a_3 = a_4 = -(2k + 1) \quad \text{y} \quad a_4 = k - u$$

entonces

$$a_3 = -(k + u + 1)$$

y se obtendría el siguiente sistema²

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dr} - \frac{k}{r} F - \frac{2\pi}{hc} (E + mc^2) G - \frac{\alpha}{r} G &= 0 \\ \frac{dG}{dr} + \frac{k+2}{r} G + \frac{2\pi}{hc} (E - mc^2) F + \frac{\alpha}{r} F &= 0 \end{aligned}$$

De nuevo este sistema difiere del (2.14) en su forma y también es diferente al (2.12). Esta expresión o las anteriores con sus variantes ($k - j - i$) aparecen en los libros de texto que tratan el tema de la teoría de Dirac y son usadas para encontrar los niveles de energía del electrón en el átomo de hidrógeno, como por ejemplo: en el de Dirac [6] o en el Schiff [22], así como en varios que no se mencionan en la bibliografía. Por otra parte, substituyendo $k = -\chi - 1$ el sistema anterior toma la forma

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dr} + \frac{\chi+1}{r} F - \frac{2\pi}{hc} (E + mc^2) G - \frac{\alpha}{r} G &= 0 \\ \frac{dG}{dr} - \frac{\chi-1}{r} G + \frac{2\pi}{hc} (E - mc^2) F + \frac{\alpha}{r} F &= 0 \end{aligned} \quad (2.15)$$

Observando que

$$F'r + (\chi + 1) F - \frac{2\pi}{hc} (E + mc^2) (Gr) - \alpha G = 0$$

²Si $k = j - 1$ nuestro sistema corresponde al de Dirac [6], donde $\psi_a = F$ y $\psi_b = G$.

$$G'r = (\chi - 1)G + \frac{2\pi}{hc} (E - mc^2) (Fr) + \alpha F = 0$$

entonces el sistema (2.15) se puede escribir como

$$\begin{aligned} (Fr)' + \frac{\lambda}{r} (Fr) - \frac{2\pi}{hc} (E + mc^2) (Gr) - \frac{\alpha}{r} (Gr) &= 0 \\ (Gr)' - \frac{\lambda}{r} (Gr) + \frac{2\pi}{hc} (E - mc^2) (Fr) + \frac{\alpha}{r} (Fr) &= 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

De esta manera se tiene que para valores pequeños de r los términos $E \pm mc^2$ en el sistema (2.16) se pueden despreciar, ya que, tienden a cero cuando $r \rightarrow 0$, por lo que³

$$\begin{aligned} (Fr)' + \frac{\lambda}{r} (Fr) \mp \frac{\alpha}{r} (Gr) &= 0 \\ (Gr)' - \frac{\lambda}{r} (Gr) \pm \frac{\alpha}{r} (Fr) &= 0 \end{aligned} \quad (2.17)$$

Se puede observar que de esta manera las funciones Fr y Gr intervienen en cada una de las ecuaciones (2.16) de la misma forma. Por lo cual si se busca para ellas expresiones con potencias iguales de r se obtendría que

$$Fr = ar^\gamma \quad \text{y} \quad Gr = br^\gamma$$

Substituyendo estas en (2.17) y derivando nos da

$$a\gamma r^{\gamma-1} + \chi ar^{\gamma-1} \mp abr^{\gamma-1} = 0$$

$$b\gamma r^{\gamma-1} - \chi br^{\gamma-1} \pm \alpha ar^{\gamma-1} = 0$$

³El signo \pm se usará debido a que el potencial puede ser atractivo o repulsivo sin afectar los cálculos posteriores.

Por lo que se obtiene el siguiente sistema

$$a(\gamma + \chi) \mp b\alpha = 0$$

$$b(\gamma - \chi) \pm a\alpha = 0$$

el cual tiene solución diferente de cero si su determinante es cero: es decir, si

$$\gamma^2 = \chi^2 - \alpha^2$$

Debido a esto, hay dos casos: si $\alpha^2 < \chi^2$ entonces $\gamma^2 > 0$, lo cual implica que γ es real. Si $\gamma < 0$ entonces F y G divergen, ya que, r es pequeño; pero esto no es posible debido a que F y G deben tener una forma asintótica cuando $r \rightarrow 0$, o si diverge una de ellas lo tiene que hacer más lentamente, porque se tiene que

$$F = \frac{\alpha}{\gamma + \chi} G \approx \text{const} \cdot r^{\gamma-1}$$

Así pues

$$\gamma = \sqrt{\chi^2 - \alpha^2} = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2} \quad (2.18)$$

ya que

$$\chi = \begin{cases} -\left(j + \frac{1}{2}\right) = -\left(\ell + \frac{1}{2}\right) & \text{para } j = \ell + \frac{1}{2} \\ +\left(j + \frac{1}{2}\right) = \ell & \text{para } j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Aunque la función de onda también puede tender a infinito en $r \rightarrow 0$ (si $\gamma < 1$). Sin embargo, la integral de $|\psi|^2$ se conserva, desde luego convergente.

Si $\alpha^2 > \chi^2$, entonces $\gamma^2 < 0$, lo cual implica que γ es imaginario. Las correspondientes soluciones oscilan cuando $r \rightarrow 0$ (como $r^{-1} \cos |\gamma| \ln r$), lo que corresponde a una situación inadmisibles en la teoría relativista de "caída hacia el centro"; es decir, debido a que la partícula no puede escapar al infinito, escapa hacia el origen de coordenadas. Como $\chi^2 \geq 1$, un campo puramente coulombiano se puede estudiar mediante la teoría de Dirac, si y solo si $\alpha < 1$, es decir, si $Z < 137$.

En el artículo de Mott [16] se menciona que Darwin [4] y Gordon [8] encontraron soluciones exactas del sistema (2.12); pero, por todo lo visto anteriormente, el sistema de Darwin y el de Gordon difieren principalmente en un signo menos, el cual no se puede obtener por medio de una factorización sino de la manera de como se escojan las soluciones que forman el conjunto completo. También cabe aclarar que las soluciones de Darwin así como las de Dirac (recuérdese que Gordon usa el sistema de Dirac) son para encontrar los niveles de energía para el electrón en el átomo de hidrógeno y no son para encontrar la función de dispersión, que es el trabajo que él hizo y que se está estudiando. Por otra parte, si se hubiese tomado el sistema (2.12) tal y como lo menciona Mott, entonces se hubiese obtenido que

$$\gamma^2 \cdot (\chi + 1)^2 - \alpha^2,$$

y se tendría que $\chi + 1$ no podría ser siempre mayor o igual a uno, incluso, Darwin menciona que su ecuación para los niveles de energía del hidrógeno difiere de la expresión original de Sommerfeld exactamente en este término, y para poder coincidir con la de Sommerfeld es necesario substituir k en su ec. (7.5) por $-k - 1$.

Por lo tanto, se seguirá usando la ec. (2.15) en este análisis. Debido a lo anterior el problema se divide en dos partes: el espectro discreto ($E < mc^2$) y el espectro continuo ($E > mc^2$). Para el espectro discreto se debe cumplir que $\alpha^2 < \chi^2$ y que γ sea real y positivo para asegurar el comportamiento asintótico cuando $r \rightarrow 0$, además se tiene que en la teoría de Dirac no sólo debe cumplirse que $Z < 137$, sino que también se tiene que el potencial del campo que se este estudiando no puede crecer más rápido que $\frac{1}{r}$ cuando $r \rightarrow 0$, debido a esto las funciones F y G que satisfasen el sistema (2.15) deben ser similares a las del sistema (1.17), por lo que las expresiones que se proponen son de la forma

$$\begin{aligned} F_\chi &= \sqrt{mc^2 + E} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} (Q_1 + Q_2) \\ G_\chi &= -\sqrt{mc^2 - E} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} (Q_1 - Q_2) \end{aligned} \quad (2.19)$$

donde se usan las siguientes substitutiones

$$\rho = 2\lambda r \quad , \quad \lambda = \sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \quad , \quad \gamma = \sqrt{\chi^2 - \alpha^2}$$

Como puede verse, estas ecuaciones cumplen con la condición (2.18) cuando $\rho \rightarrow 0$. Además, como F_χ y G_χ deben comportarse asintóticamente convergente cuando $\rho \rightarrow 0$ esto se asegura con el término $\rho^{\gamma-1}$, el término $e^{-\rho/2}$ es para asegurar la disminución exponencial cuando $\rho \rightarrow \infty$, y por otra parte, se tienen las funciones Q_1 y Q_2 para la normalización de coordenadas las cuales cumplen que $Q_1 \gg Q_2$ cuando $\rho \rightarrow \infty$ y de esta manera se asegura el comportamiento asintótico de la misma manera para las funciones F_χ y G_χ . Colocando (2.19) en la primera ecuación de (2.15) y simplificando se obtiene

$$\begin{aligned} \rho(Q_1 + Q_2)' + (\gamma + \chi)(Q_1 + Q_2) + \frac{\rho Q_1}{2} \left(\frac{2\pi}{hc} - 1 \right) - \\ - \frac{\rho Q_2}{2} \left(\frac{2\pi}{hc} + 1 \right) + \alpha \sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} (Q_1 - Q_2) = 0 \end{aligned} \quad (2.20)$$

Análogamente, substituyendo (2.19) en la segunda ecuación de (2.15)

$$\begin{aligned} \rho(Q_1 - Q_2)' + (\gamma - \chi)(Q_1 - Q_2) - \frac{\rho Q_1}{2} \left(1 - \frac{2\pi}{hc} \right) + \\ + \frac{\rho Q_2}{2} \left(1 + \frac{2\pi}{hc} \right) - \alpha \sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} (Q_1 + Q_2) = 0 \end{aligned} \quad (2.21)$$

En los problemas relacionados con el campo coulombiano es más comodo trabajar con unidades atómicas, teniendo que: para la masa, la longitud y el tiempo sus unidades respectivamente son

$$m = 9.11 \times 10^{-28} g \quad , \quad \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-8} cm \quad y \quad \frac{\hbar^3}{me^4} = 2.42 \times 10^{-17} s$$

Por lo que la unidad de energía queda como

$$\frac{mc^4}{h^2} = 4.36 \times 10^{-11} \text{ erg} \therefore 27.21 \text{ eV}$$

Por ésto, el paso a las unidades atómicas en las fórmulas se puede efectuar (para el electrón) suponiendo que

$$e = \hbar = c \therefore m \equiv 1$$

De esta forma, las ecuaciones (2.20) y (2.21) quedan expresadas como

$$\rho(Q_1 + Q_2)' + (\gamma + \chi)(Q_1 + Q_2) - \rho Q_2 + \alpha \sqrt{\frac{m - E}{m + E}}(Q_1 - Q_2) = 0$$

$$\rho(Q_1 - Q_2)' + (\gamma - \chi)(Q_1 - Q_2) + \rho Q_2 - \alpha \sqrt{\frac{m + E}{m - E}}(Q_1 + Q_2) = 0$$

Cuya suma da

$$\rho Q_1' + \left(\gamma - \frac{E\alpha}{\lambda}\right) Q_1 + \left(\chi - \frac{\alpha m}{\lambda}\right) Q_2 = 0 \quad (2.22)$$

ya que $\lambda = \sqrt{m^2 - E^2}$. Restándolas se obtiene

$$\rho Q_2' + \left(\chi + \frac{\alpha m}{\lambda}\right) Q_1 + \left(\gamma - \rho + \frac{\alpha E}{\lambda}\right) Q_2 = 0 \quad (2.23)$$

Despejando Q_2 de (2.22) y substituyendo en (2.23) se tiene que

$$\rho Q_1'' + (2\gamma + 1 - \rho) Q_1' - \left(\gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}\right) Q_1 = 0 \quad (2.24)$$

Despejando Q_1 de (2.23) y substituyendo en (2.22) se obtiene

$$\rho Q_2'' + (2\gamma + 1 - \rho) Q_2' - \left(\gamma + 1 - \frac{\alpha E}{\lambda}\right) Q_2 = 0 \quad (2.25)$$

Obsérvese que las ecuaciones (2.24) y (2.25) son de la forma

$$(c - z) \Phi'' - a\Phi' - a\Phi = 0$$

cuyas soluciones se obtienen con ayuda de la función hipergeométrica degenerada $F(a, c, z)$

De esta forma se tiene que

$$\begin{aligned} Q_1 &= AF\left(\gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right) \\ Q_2 &= BF\left(\gamma + 1 - \frac{\alpha E}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Pero para cualesquiera valores finitos de z y a , y para valores enteros negativos o cero de c , la función hipergeométrica se determina por la serie

$$F(a, c, z) = 1 + \frac{a z}{c 1!} + \frac{a(a+1) z^2}{c(c+1) 2!} + \dots$$

Si en cualquiera de las ecuaciones (2.22) o (2.23) $\rho \rightarrow 0$, entonces

$$F(a, c, z) \rightarrow 1, \quad Q_1 = A \quad \text{y} \quad Q_2 = B$$

por lo que la relación entre A y B es

$$B = -\frac{\gamma - \frac{E\alpha}{\lambda}}{\chi - \frac{\alpha m}{\lambda}} A \quad \text{o} \quad B = -\frac{\chi + \frac{\alpha m}{\lambda}}{\gamma + \frac{\alpha E}{\lambda}} A \quad (2.27)$$

Es necesario que las dos ecuaciones de (2.26) se reduzcan a polinomios, ya que, de lo contrario crecerían como e^ρ cuando $\rho \rightarrow \infty$, y a su vez crecería como $e^{\rho/2}$ la función de onda total. Pero si a es un entero negativo o cero, entonces la función $F(a, c, z)$ se reduce a un polinomio, sea

$$-n_r = \gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}$$

donde $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$, son los números cuánticos radiales. Observese que si $n_r = 0$ se reduce a cero tan solo una de ellas. Pero esto implica que $\gamma = \frac{\alpha E}{\lambda}$, por lo que

$$\gamma^2 = \left(\frac{\alpha E}{\lambda}\right)^2$$

y como

$$\chi^2 - \left(\frac{\alpha m}{\lambda}\right)^2 = \gamma^2 - \left(\frac{\alpha E}{\lambda}\right)^2 \Rightarrow |\chi| = \frac{\alpha m}{\lambda}$$

Si $\chi < 0$ el coeficiente B en (2.27) se anula, de tal forma que $Q_2 = 0$ y no se viola la condición impuesta. Pero si $\chi > 0$ se tiene que $B = -A$ y por lo tanto Q_2 diverge para $n_r = 0$. Por lo que son admisibles los siguientes valores de n_r

$$n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, 3, \dots, & \text{si } \chi < 0 \\ 1, 2, 3, 4, \dots, & \text{si } \chi > 0 \end{cases}$$

Por otra parte, falta encontrar el coeficiente de normalización A . Para esto es necesario normalizar la función de onda ψ del espectro discreto, lo cual se cumple si $\int |\psi|^2 dV = 1$. Como en este trabajo solo interesa el espectro continuo no es necesario encontrar A , entonces las ecuaciones de (2.19) quedan de la forma

$$\begin{aligned} F_\chi &= A\sqrt{m+E} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left[F\left(\gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}}{\chi - \frac{\alpha m}{\lambda}}\right) F\left(\gamma + 1 - \frac{\alpha E}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right) \right] \\ G_\chi &= -A\sqrt{m-E} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left[F\left(\gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}}{\chi - \frac{\alpha m}{\lambda}}\right) F\left(\gamma + 1 - \frac{\alpha E}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right) \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

Resumiendo todo lo anterior, tenemos que cuando $\chi^2 > \alpha^2$ entonces γ es real, pero esto implica que χ^2 es real, ya que, α es real; esto a su vez quiere decir que λ es real. Por lo tanto, $mc^2 > E$ lo cual corresponde al espectro discreto. Por lo tanto, todo lo

anterior efectivamente corresponde al espectro discreto.

También se tiene que si $\chi^2 < \alpha^2$ entonces γ es imaginario, por lo que λ tiene que ser imaginario. Debido a esto $mc^2 < E$ ya que, $\lambda = \sqrt{(mc^2)^2 - E^2}$, lo cual corresponde al espectro continuo (que es el que interesa estudiar para el fenómeno de dispersión).

Para el estudio del espectro continuo debe cumplirse que $\chi^2 < \alpha^2$ y $E > mc^2$, por lo que no es necesario hacer los cálculos anteriores, sino que solo basta con los cambios siguientes (donde $p = |\mathbf{p}|$ y usando unidades atómicas):

$$\sqrt{m - E} \rightarrow -i\sqrt{E - m}, \quad \lambda \rightarrow -i\sqrt{E^2 - m^2} = -ip \quad (2.29)$$

$$\frac{\alpha E}{\sqrt{E^2 - m^2}} = q = \frac{2\pi e^2}{h\nu}$$

por lo que

$$\frac{\gamma - \frac{\alpha E}{\lambda}}{\chi - \frac{\alpha m}{\lambda}} \rightarrow \frac{\gamma - \frac{q}{-i}}{\chi - \frac{q'}{-i}} = \frac{\gamma - iq}{\chi - iq'} \cdot e^{-2i\xi} \quad (2.30)$$

donde

$$q' = \frac{\alpha m}{\sqrt{E^2 - m^2}} = \frac{2\pi e^2}{h\nu} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2} \quad (2.31)$$

teniendo que v es la velocidad de la partícula definida por $E = mc^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}$. Substituyendo los nuevos términos en G_χ y F_χ de (2.28) se obtiene que

$$F_\chi = \frac{\mathcal{A}'}{e^{i\xi}} \sqrt{m + E} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left[e^{i\xi} F(\gamma - iq, 2\gamma + 1, \rho) - e^{-i\xi} F(\gamma + 1 - iq, 2\gamma + 1, \rho) \right]$$

$$G_\chi = i \frac{\mathcal{A}'}{e^{i\xi}} \sqrt{E - m} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left[e^{i\xi} F(\gamma - iq, 2\gamma + 1, \rho) + e^{-i\xi} F(\gamma + 1 - iq, 2\gamma + 1, \rho) \right]$$

pero como $\rho = 2\lambda r$, entonces $\rho = -i2pr$, donde $p = \sqrt{E^2 - m^2}$. Substituyendo de nuevo en F_χ y G_χ

$$\left. \begin{array}{l} F_\chi \\ G_\chi \end{array} \right\} \left. \begin{array}{l} \sqrt{m + E} \\ i\sqrt{E - m} \end{array} \right\} \mathcal{A}' e^{i\xi} (-i2pr)^{\gamma-1} \left[e^{i\xi} F(\gamma - iq, 2\gamma + 1, -i2pr) \mp \right]$$

$$\mp e^{-i\xi} F(\gamma + 1 - iq, 2\gamma + 1, -i2pr)]$$

Usando la propiedad de $F(a, c, z)$ como

$$F(a, c, z) = e^z F(c - a, c, -z)$$

entonces

$$\begin{aligned} F(\gamma + 1 - iq, 2\gamma + 1, -i2pr) &= e^{-i2pr} F(\gamma + iq, 2\gamma + 1, i2pr) \\ &= e^{-i2pr} F^*(\gamma - iq, 2\gamma + 1, -i2pr) \end{aligned}$$

Por lo que

$$\left. \begin{array}{l} F \\ G \end{array} \right\} = \left. \begin{array}{l} \sqrt{E+m} \\ -i\sqrt{E-m} \end{array} \right\} \mathcal{A}'(2pr)^{\gamma-1} \left[e^{i(pr+\xi)} F(\gamma - iq, 2\gamma + 1, -i2pr) \mp \right. \\ \left. \mp e^{-i(pr+\xi)} F^*(\gamma - iq, 2\gamma + 1, -i2pr) \right]$$

por lo tanto,

$$\left. \begin{array}{l} F_x \\ G_x \end{array} \right\} = i2\mathcal{A}'\sqrt{E \pm m} (2pr)^{\gamma-1} \left. \begin{array}{l} Im \\ Re \end{array} \right\} \left\{ e^{i(pr+\xi)} F(\gamma - iq, 2\gamma + 1, -i2pr) \right\} \quad (2.32)$$

Pero cuando $z \rightarrow \infty$, la forma asintótica de la función hipergeométrica está dada por

$$F(a, c, z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} G(a, a-c+1, -z) + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-c} G(c-a, 1-a, z)$$

donde

$$G(a, c, z) = 1 + \frac{ac}{1!z} + \frac{a(a+1)c(c+1)}{2!z^2} + \dots$$

Por lo tanto,

$$F(a, c, z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} \left[1 + \frac{a(a-c+1)}{1!(-z)} + \frac{a(a+1)(a-c+1)(a-c+2)}{2!z^2} + \dots \right] + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-c} \left[1 + \frac{(c-a)(1-a)}{1!z} + \frac{(c-a)(c-a+1)(1-a)(1-a+1)}{2!z^2} + \dots \right]$$

Usando la fórmula anterior tenemos que

$$F(\gamma - iq, 2\gamma + 1, -i2pr) = \Gamma(2\gamma + 1) \left\{ \frac{(i2pr)^{-\gamma+iq}}{\Gamma(\gamma + 1 + iq)} \left[1 + \frac{(\gamma - iq)(-\gamma - iq)}{2i2pr} \right] + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right\} + \frac{e^{-i2pr} z^{-(\gamma+1+iq)}}{\Gamma(\gamma - iq)} \left[1 + \frac{(\gamma + 1 + iq)(1 - \gamma + iq)}{i2pr} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right]$$

De esta forma, si $r \rightarrow \infty$, entonces se obtiene

$$F(\gamma - iq, 2\gamma + 1, -i2pr) \simeq \frac{\Gamma(2\gamma + 1)}{\Gamma(\gamma + 1 + iq)} (i2pr)^{-\gamma+iq}$$

Substituyendo en (2.32)

$$\left. \begin{array}{l} F_X \\ G_X \end{array} \right\} = i2A'\sqrt{E \pm m} (i2pr)^{\gamma-1} \frac{Im}{Re} \left\{ e^{i(pr+\xi)} \frac{\Gamma(2\gamma + 1)}{\Gamma(\gamma + 1 + iq)} (i2pr)^{-\gamma+iq} \right\} \\ = \frac{iA'\sqrt{E \pm m}}{pr} \Gamma(2\gamma + 1) (2pr)^\gamma \frac{Im}{Re} \left\{ \frac{\exp[i(pr + \xi) + iq \ln i + iq \ln 2pr]}{\Gamma(\gamma + 1 + iq)} (i2pr)^{-\gamma} \right\}$$

pero

$$(i2pr)^{-\gamma} = (2pr)^{-\gamma} e^{-i\pi\gamma/2}$$

substituyendo ésto en la ecuación anterior, se obtiene

$$\left. \begin{array}{l} F_X \\ G_X \end{array} \right\} = \frac{iA'\sqrt{E \pm m}}{pr} \Gamma(2\gamma + 1) e^{-\frac{\pi}{2}\gamma} \frac{Im}{Re} \left\{ \frac{e^{i(pr+\xi-\frac{\pi}{2}\gamma+iq \ln 2pr)}}{\Gamma(\gamma + 1 + iq)} \right\}$$

pero

$$\frac{e^{iy}}{a + ib} = \frac{\cos(y - \arg(a + ib)) + i \operatorname{sen}(y - \arg(a + ib))}{|a + ib|}$$

Por lo que

$$\left. \begin{matrix} F_\chi \\ G_\chi \end{matrix} \right\} \cdot \frac{iA' \sqrt{E \pm m}}{pr} \frac{\Gamma(2\gamma + 1)}{|\Gamma(\gamma + 1 + iq)|} e^{-\pi q/2} \left\{ \begin{matrix} \operatorname{sen} \\ \cos \end{matrix} \right\} \left(pr + \xi + q \ln 2pr - \frac{\pi}{2}\gamma - \right. \\ \left. - \arg(\gamma + 1 + iq) \right) \\ \frac{iA' \sqrt{E \pm m}}{pr} \frac{\Gamma(2\gamma + 1)}{|\Gamma(\gamma + 1 + iq)|} e^{-\pi q/2} \left\{ \begin{matrix} \operatorname{sen} \\ \cos \end{matrix} \right\} \left(pr + \delta_\chi + q \ln 2pr - \frac{\pi}{2}l \right) \quad (2.33)$$

donde

$$\delta_\chi = \xi - \arg(\gamma + 1 + iq) - \frac{\pi}{2}\gamma + \frac{\pi}{2}l \quad (2.34)$$

y $l = 2j - l'$ es el momento angular orbital. De (2.34) se tiene que

$$e^{i2\delta_\chi} = e^{i(2\xi - \pi\gamma + \pi l - 2 \arg \Gamma(\gamma + 1 + iq))} \\ \frac{\Gamma(\gamma + 1 - iq)}{\Gamma(\gamma + 1 + iq)} e^{i\pi(l - \gamma)} e^{i2\xi}$$

pero de (2.30) se tiene que

$$e^{-i2\xi} = \frac{\gamma - iq}{\chi - iq'}$$

por lo tanto,

$$e^{i2\delta_\chi} = \frac{\chi - iq' \Gamma(\gamma + 1 - iq)}{\gamma - iq \Gamma(\gamma + 1 + iq)} e^{i\pi(l - \gamma)} \quad (2.35)$$

que es el corrimiento de fase de la χ -ésima onda parcial que tanto se ha estado buscando, ya que, es más fácil calcular la función de dispersión por medio de éste.

2.2 ECUACION DE DISPERSION RELATIVISTA

En mecánica cuántica no-relativista, se ha resuelto el problema de expresar la función de dispersión en función del corrimiento de fase. La expresión asintótica de la función de onda que representa la dispersión de partículas en un campo de fuerzas centrales fijo es de la forma

$$\psi = \mathcal{U}_{E\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}z} + \mathcal{U}'_{E'\mathbf{p}'} \frac{e^{i\mathbf{p}'r}}{r}$$

donde $\mathcal{U}_{E\mathbf{p}}$ es la amplitud de la función de espín de la onda incidente y $\mathcal{U}'_{E'\mathbf{p}'}$ es la función de espín de dispersión, la cual depende del ángulo de dispersión, es decir, del ángulo correspondiente a la dirección de dispersión \mathbf{n}' .

La función de dispersión de la función de onda queda determinada por completo dando una magnitud de dos componentes; una de ellas es el espinor tridimensional ω , que representa la función de onda no-relativista en el sistema de reposo de la partícula. También se puede expresar en función de este espinor la densidad de corriente: ésta es proporcional a $\omega^* \omega$. Por lo tanto, la sección transversal diferencial de dispersión está determinada por

$$d\sigma = \frac{\omega'^* \omega'}{\omega^* \omega} d\Omega$$

pero normalizando la onda incidente mediante la condición $\omega^* \omega = 1$, entonces

$$d\sigma = \omega'^* \omega' d\Omega$$

Por lo que se puede introducir un operador de dispersión \hat{f} mediante la definición

$$\omega' = \hat{f} \omega$$

Debido a que ω y ω' tienen dos componentes, el operador definido es por completo análogo al operador amplitud de dispersión que hay en la teoría no-relativista de la

dispersión cuando se tiene en cuenta el espín. Dicho operador es de la forma

$$\hat{f} = \hat{a} + \hat{b} \hat{\ell} \cdot \hat{s} \quad (2.36)$$

donde \hat{a}, \hat{b} son operadores orbitales que dependen unicamente de ℓ^2 . Por lo tanto, se puede expresar el operador como función de los corrimientos de fase de las funciones de onda en el campo dispersor. Para esto es necesario determinar los elementos de la matriz diagonales de los operadores \hat{a} y \hat{b} (se expresarán como a_ℓ y b_ℓ), los cuales cumplen con la relaciones (Landau [12]),

$$a_\ell + \frac{1}{2} \ell b_\ell = \frac{1}{i2p} \left(e^{2i\delta_\ell^+} - 1 \right)$$

$$a_\ell - \frac{1}{2} (\ell + 1) b_\ell = \frac{1}{i2p} \left(e^{2i\delta_\ell^-} - 1 \right)$$

resolviendo el sistema se obtiene

$$b_\ell = \frac{1}{(2\ell + 1) ip} \left(e^{2i\delta_\ell^+} - e^{2i\delta_\ell^-} \right) \quad (2.37)$$

$$a_\ell = \frac{1}{2(2\ell + 1) ip} \left[(\ell + 1) \left(e^{2i\delta_\ell^+} - 1 \right) + \ell \left(e^{2i\delta_\ell^-} - 1 \right) \right] \quad (2.38)$$

Por otra parte, el desarrollo de la función δ en polinomios de Legendre está definida como (Landau [12]),

$$\mathcal{F} = 4\delta(1 - \cos \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta)$$

aplicando el operador (2.36) en esta función, se obtiene la función de onda plana incidente (a lo largo del eje Z)

$$\mathcal{F} \hat{f} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \hat{f}_\ell P_\ell(\cos \theta)$$

$$: \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (a_{\ell} + b_{\ell} \hat{\ell} \cdot \hat{s}) P_{\ell}(\cos \theta) \quad (2.39)$$

La aplicación del operador $\hat{\ell} \cdot \hat{s}$ a la función $P_{\ell}(\cos \theta)$ está dada por

$$\hat{\ell} \cdot \hat{s} P_{\ell}(\cos \theta) = i\nu \cdot \hat{s} P'_{\ell}(\cos \theta) \quad (2.40)$$

donde P'_{ℓ} es un polinomio asociado de Legendre y ν el vector unitario correspondiente a $\mathbf{n} \times \mathbf{n}'$ perpendicular al plano de dispersión. Por lo tanto, substituyendo (2.37), (2.38) y (2.40) en (2.39) se tiene

$$\begin{aligned} \hat{f} &= \frac{1}{2ip} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ \left[(\ell + 1) (e^{2i\delta_{\ell}^{+}} - 1) + \ell (e^{2i\delta_{\ell}^{-}} - 1) \right] P_{\ell}(\cos \theta) + \right. \\ &\quad \left. + 2i (e^{2i\delta_{\ell}^{+}} - e^{2i\delta_{\ell}^{-}}) \nu \cdot \hat{s} P'_{\ell}(\cos \theta) \right\}. \end{aligned}$$

De esta manera \hat{f} toma la forma

$$\hat{f} = f(\theta) + 2g(\theta) \nu \cdot \hat{s} = f(\theta) + g(\theta) \nu \cdot \sigma$$

donde

$$f(\theta) = \frac{1}{2ip} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[(\ell + 1) (e^{2i\delta_{\ell}^{+}} - 1) + \ell (e^{2i\delta_{\ell}^{-}} - 1) \right] P_{\ell}(\cos \theta) \quad (2.41)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2p} \sum_{\ell=1}^{\infty} (e^{2i\delta_{\ell}^{+}} - e^{2i\delta_{\ell}^{-}}) P_{\ell}(\cos \theta) \quad (2.42)$$

Cambiando los corrimientos de fase δ_{ℓ}^{+} y δ_{ℓ}^{-} , por los corrimientos de fase δ_{χ} relativistas. Tomando en cuenta que las δ_{ℓ}^{+} y δ_{ℓ}^{-} se refieren a estados cuyo momento angular orbital es ℓ (en lo sucesivo $\ell - 1$) y con momento angular total $j = \ell + \frac{1}{2}$ y $j = \ell - \frac{1}{2}$, respectivamente. Se debe cumplir que $\chi = -\ell - 1$ para $j = \ell + \frac{1}{2}$ y $\chi = \ell$ para $j = \ell - \frac{1}{2}$; por lo tanto, quedarían como

$$\delta_{\ell}^{+} \rightarrow \delta_{-(\ell+1)} \quad , \quad \delta_{\ell}^{-} \rightarrow \delta_{\ell}$$

Por lo que, (2.41) y (2.42) quedan como

$$f(\theta) = \frac{1}{2ip} \sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1) \left(e^{2i\delta_{-(l+1)}} - 1 \right) + l \left(e^{2i\delta_l} - 1 \right) \right] P_l(\cos\theta) \quad (2.43)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\left(e^{2i\delta_{-(l+1)}} - 1 \right) - \left(e^{2i\delta_l} - 1 \right) \right] P'_l(\cos\theta) \quad (2.44)$$

La ecuación (2.43) se puede descomponer como

$$f(\theta) = \frac{-i}{2p} \sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1) \left(e^{2i\delta_{-(l+1)}} + l e^{2i\delta_l} \right) P_l(\cos\theta) + \frac{i}{2p} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \right]$$

Esta expresión y la (2.44) son las que muestran el enlace esencial entre el potencial $V(r)$ y la sección transversal observada, demostrando claramente la naturaleza ondulatoria de la descripción de la mecánica cuántica. La dependencia angular debido a cualquier onda parcial dada está determinada por $P_l(\cos\theta)$, el cual oscila debido a θ pero no muestra una preferencia estricta por alguna dirección en particular, como puede verse por la aproximación asintótica de

$$P_l(\cos\theta) \simeq \left[\frac{2}{\pi l \sin\theta} \right]^{1/2} \text{sen} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4} \right], \quad l\theta \gg 1$$

La que determina la variación angular del patrón de dispersión es la interferencia entre las ondas vecinas. También se tiene que el primer término de (2.43) (así como los de (2.44)) son los que contienen los corrimientos de fase debido al potencial $V(r)$; el segundo es requerido para remover cualquier contribución por la onda plana no-dispersada, el cual puede ser omitido para $\theta \neq 0$, ya que, por definición la onda plana se mueve sólo en dirección hacia adelante; matemáticamente

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) = 0 \quad \text{para } \theta \neq 0 \quad (2.45)$$

Por otra parte, el ángulo $\theta = 0$ corresponde a las partículas no dispersadas; por lo tanto, el segundo término de (2.43) se puede despreciar para cualquier θ . De esta manera

las ecuaciones (2.43) y (2.44) pueden escribirse como

$$f(\theta) = \frac{-i}{2p} \sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1) e^{2i\delta_{-(l+1)}} + l e^{2i\delta_l} \right] P_l(\cos \theta) \quad (2.46)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} \left[e^{2i\delta_{-(l+1)}} - e^{2i\delta_l} \right] P'_l(\cos \theta) \quad (2.47)$$

Usando (2.35) se tiene⁴:

$$e^{2i\delta_{-(l+1)}} = \left(\frac{-l-1-iq'}{\gamma_{-l-1}-iq} \right) \frac{\Gamma(\gamma_{-l-1}+1-iq)}{\Gamma(\gamma_{-l-1}+1+iq)} e^{i\pi(\gamma_{-l-1})}$$

de (2.22) se puede ver que

$$\gamma_{-l-1} = \sqrt{(-l-1)^2 - \alpha^2} = \sqrt{(l+1)^2 - \alpha^2} = \gamma_{l+1}$$

por lo que

$$e^{2i\delta_{-(l+1)}} = \frac{-(l+1+iq')}{\gamma_{l+1}-iq} \frac{\Gamma(\gamma_{l+1}+1-iq)}{\Gamma(\gamma_{l+1}+1+iq)} (-1)^l e^{-i\pi\gamma_{l+1}},$$

ya que, $e^{i\pi l} = (-1)^l$; sea

$$T_{l+1} = \frac{-1}{\gamma_{l+1}-iq} \frac{\Gamma(\gamma_{l+1}+1-iq)}{\Gamma(\gamma_{l+1}+1+iq)} e^{-i\pi\gamma_{l+1}},$$

debido a esto, se obtiene que

$$e^{2i\delta_{-(l+1)}} = (l+1+iq') (-1)^l T_{l+1} \quad (2.48)$$

y

$$e^{2i\delta_l} = -(l-iq') (-1)^l T_l \quad (2.49)$$

⁴Se usará γ_l , ya que, γ depende de l , es decir de χ .

Substituyendo (2.48) y (2.49) en (2.46) y (2.47) respectivamente

$$f(\theta) = \frac{i}{2p} \sum_{l=0}^{\infty} [-(l+1)(l+1+iq')T_{l+1} + l(l-iq')T_l] (-1)^l P_l(\cos\theta) \quad (2.50)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} [(l-iq')T_l + (l+1+iq')T_{l+1}] (-1)^l P'_l(\cos\theta) \quad (2.51)$$

Estas ecuaciones son idénticas a las del sistema (22) de Mott [16] salvo por un factor de i en $g(\theta)$. De (2.50) y (2.51) se tiene

$$f(\theta) = \frac{i}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ -(l+1)^2 T_{l+1} + l^2 T_l - iq'[(l+1)T_{l+1} + lT_l] \right\} (-1)^l P_l(\cos\theta)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} [lT_l + (l+1)T_{l+1} + iq'(T_{l+1} - T_l)] (-1)^l P'_l(\cos\theta) \quad .$$

Desarrollando las series y agrupando términos⁵

$$f(\theta) = \frac{i}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} \left[l^2 T_l (P_l + P_{l-1}) - iq' l T_l (P_l - P_{l-1}) \right] (-1)^l \quad (2.52)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} \left[l T_l (P'_l - P'_{l-1}) - iq' T_l (P'_l + P'_{l-1}) \right] (-1)^l \quad (2.53)$$

Tomando en cuenta que los polinomios de Legendre cumplen con las siguientes relaciones de recurrencia

$$(P'_l - P'_{l-1}) = l(P_l + P_{l-1})(1 - \cos\theta) / \sin\theta$$

$$(P'_l + P'_{l-1}) = -l(P_l - P_{l-1})(1 + \cos\theta) / \sin\theta$$

Entonces en (2.53) se obtiene que:

$$f(\theta) = G(\theta) - iq' F(\theta)$$

⁵Se usará P_l en lugar de $P_l(\cos\theta)$.

$$g(\theta) = q' \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} F(\theta) - i \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} G(\theta) \quad (2.54)$$

donde

$$F(\theta) = \frac{i}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} l T_l (P_l - P_{l-1}) (-1)^l$$

$$G(\theta) = \frac{i}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} l^2 T_l (P_l + P_{l-1}) (-1)^l$$

Usando las identidades trigonométricas

$$\frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} = \cot \frac{\theta}{2} \quad \text{y} \quad \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} = \tan \frac{\theta}{2}$$

se obtiene finalmente

$$f(\theta) - G(\theta) = i q' F(\theta) \quad (2.55)$$

$$g(\theta) = q' \cot \frac{\theta}{2} \cdot F(\theta) - i \tan \frac{\theta}{2} \cdot G(\theta) \quad (2.56)$$

Estas ecuaciones corresponden al sistema (23) de Mott, salvo el factor i , que ya se había mencionado con anterioridad.

Obsérvese que si en (2.42) en lugar de $\frac{1}{2p}$ se usa $\frac{-1}{2ip}$, entonces las ecuaciones (2.50) y (2.51) corresponden a las del sistema (22) de Mott [16] y las (2.55) y (2.56) serían las del (23). Cabe mencionar que en el corrimiento de fase de Mott [16], pag. 435, no aparece el término $(-1)^l$ sino que el $(-)^k$ del sistema (21) es debido al sistema (16), pag. 432. Pero aquí también hay otro problema, ya que, el corrimiento de fase $e^{2i\eta_k + ik\pi}$ corresponde a nuestro $e^{2i\delta - (l+1)\pi}$. Esto se puede comprobar viendo Mott y Massey [17], pag. 79. Aquí la ecuación (37) corresponde claramente a nuestro $e^{2i\delta_l}$, y en la nota de pie de página explica que su e^{2im_n} se obtiene de (37) remplazando n por $-n - 1$; excepto en el último término, el cual se convierte en $e^{-\pi i(\rho_{n+1} - n)}$. En ésta el término $e^{\pi i n}$ es debido a que en (36) se suma y se resta $\frac{1}{2}n\pi$ (como puede apreciarse en nuestra ecuación (2.33)), y es independiente de ρ_{n+1} (en nuestro caso γ_{n+1}). Estas diferencias en la notación pueden ser porque Mott usa los resultados de Gordon [8]. Comparando la ecuación (10), pag. 13, vemos que: nuestra Q_1 está relacionada con la σ_2 de Gordon y Q_2 con σ_1 ; siempre

y cuando se cumpla que: $-n' = \gamma - q$, ya que, $\rho = \gamma$, $j' = l$ y que $k_0 = -ip$. Pero si lo anterior se cumple, entonces la k_0 y la ρ de Gordon no podrían ser reales y él las está tomando reales, ya que está analizando el espectro discreto ($E < mc^2$). Por lo tanto las soluciones de Gordon no pueden tomarse tal y como están para el espectro continuo y Mott así lo hizo. En la nota de pie de página de Mott [16], pag. 435 se afirma que si la j' de Gordon es igual a la k de Mott, entonces la ψ_2 de Gordon (usando la ecuación 10 de Gordon) es igual a la τG_{-k-1} de Mott, lo cual es falso, la variable z de la función hipergeométrica de Mott es $2ir$ mientras que la de Gordon es $2k_0r$, por lo tanto, no pueden ser iguales.

También se tiene que en $f(\theta)$ de (16) en [16] los corrimientos de fase están con $+1$, y por otra parte en $g(\theta)$ con -1 ; por lo tanto, la expresión para $f(\theta)$ no corresponde a la obtenida en mecánica cuántica no relativista (en ésta siempre se obtiene $e^{2i\delta} - 1$, con espín o sin éste) ya que se podría pensar que el $+1$ es debido a la teoría relativista. Pero esto no ocurre así: debido a que en [17], pag. 76, corrige el error y su sistema (26) corresponde a nuestras ecuaciones (2.43) y (2.44) respectivamente. Por todo lo anterior seguiremos usando nuestra notación.

2.3 CONVERGENCIA DE LA EXPANSION DE LAS ONDAS PARCIALES.

Las series tal y como se encuentran en el sistema (2.54) no convergen para todo θ ya que para l grandes, Gluckstern y Lin [7],

$$T_l \sim l^{-1-2iq}$$

y para $\theta \neq 0$, como ya se mencionó antes, $P_l(\cos \theta) \sim l^{-1/2}$. Por lo tanto, en forma estricta, $F(\theta)$ es condicionalmente convergente y $G(\theta)$ es divergente. Sin embargo, la expresión para $G(\theta)$ en (2.54) está de tal forma que es sobreentendida como el límite de

una suma dada, la cual incluye un factor convergente compatible.

El análisis de las series en (2.54) se facilita si en las sumas se considera $\alpha = 0$. Obteniendo la aproximación de Born ($F_0(\theta)$ y $G_0(\theta)$) que consiste en expandir la diferencia entre $F(\theta)$, $G(\theta)$ y $F_0(\theta)$, $G_0(\theta)$ en series de ondas parciales, las cuales convergen estrictamente. Para ésto Mott [16] propone que se tome $q = q'$, lo cual implica que $c \gg v$ por lo que se trata de la teoría clásica. Teniendo para los corrimientos de fase que:

$$e^{2i\delta_{-(l+1)}} = \frac{-l-1-iq \Gamma(-l-1+1-iq)}{-l-1-iq \Gamma(-l-1+1+iq)} e^{i\pi(l-(-l-1))}$$

$$e^{2i\delta_l} = \frac{l-iq \Gamma(l+1-iq)}{l-iq \Gamma(l+1+iq)} e^{i\pi(l-l)}$$

ya que si $\alpha = 0$, entonces $\gamma = \chi$ (y χ depende de l).

Usando la relación de recurrencia para la función gama

$$\Gamma(z) \Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\operatorname{sen} \pi z}$$

se tiene que

$$\frac{\Gamma(-l-1+1-iq)}{\Gamma(-l-1+1+iq)} = -\frac{\Gamma(l+1-iq)}{\Gamma(l+1+iq)}$$

Por lo tanto, los corrimientos de fase quedan como

$$e^{2i\delta_{-(l+1)}} = \frac{\Gamma(l+1-iq)}{\Gamma(l+1+iq)} \quad \text{y} \quad e^{2i\delta_l} = \frac{\Gamma(l+1-iq)}{\Gamma(l+1+iq)}$$

Substituyéndolos en (2.46) y (2.47) respectivamente se obtiene

$$f_c(\theta) = \frac{-i}{2p} \sum_{l=0}^{\infty} \left[(2l+1) \frac{\Gamma(l+1-iq)}{\Gamma(l+1+iq)} \right] P_l(\cos \theta) \quad (2.57)$$

$$g_c(\theta) = 0$$

Por definición la integral de Euler de primer grado (función beta) está dada por

$$B(a, b) = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} = \int_0^1 t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt.$$

Tomando a $l+1-iq = a$ y $2iq = b$, se obtiene

$$\frac{\Gamma(l+1-iq)}{\Gamma(l+1+iq)} = \frac{1}{\Gamma(2iq)} \int_0^1 t^{l-iq} (1-t)^{2iq-1} dt. \quad (2.58)$$

Si $|X| \leq 1 - \delta$, entonces

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) = \lim_{X \rightarrow 1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) X^l P_l(\cos \theta) = F(X) \quad (2.59)$$

Substituyendo (2.58) y (2.59) en $f_c(\theta)$ de (2.57) se tiene que

$$f_c(\theta) = \frac{-i}{2p\Gamma(2iq)} \int_0^1 F(tX) t^{-iq} (1-t)^{2iq-1} dt$$

donde $F(tX) = F(X) \cdot t^l$ y como $X \rightarrow 1$, entonces

$$\begin{aligned} F(t) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) t^l P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{1-t^2}{(1-2t \cos \theta + t^2)^{3/2}} \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$f_c = \frac{-i}{2p\Gamma(2iq)} \int_0^1 \frac{(1-t^2)(1-t)^{2iq-1} dt}{t^{iq+3/2} \left(2 \sin \frac{\theta}{2}\right)^{3/2} \left[1 + \frac{\frac{1}{2}(t+t^{-1})-1}{2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}\right]^{3/2}}$$

tomando el cambio de variable

$$y^2 = \frac{\frac{1}{2}(t+t^{-1})-1}{2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

y tomando en cuenta que

$$\frac{(1-t)^2}{t} = 4y^2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2}.$$

Entonces los límites cambian desde $y = 0$ hasta $y = \infty$ por lo que

$$f_c = \frac{-i}{2p\Gamma(2iq)} \left(\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}\right)^{2iq-2} \int_0^\infty \frac{(2y)^{2iq-1} y \, dy}{(1+y^2)^{3/2}}.$$

Haciendo nuevamente un cambio de variable de

$$1 + y^2 = \frac{1}{z}$$

entonces, cuando $y \rightarrow 0$, $z \rightarrow 1$; y cuando $y \rightarrow \infty$, $z \rightarrow 0$. De esta forma

$$\begin{aligned} f_c &= \frac{-i}{2p\Gamma(2iq)} \left(\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}\right)^{2iq-2} \int_0^1 \frac{(2\sqrt{1-z})^{2iq-1} z^{3/2} dz}{(\sqrt{z})^{2iq-1} 2z^2} dz \\ &= \frac{-i}{2p\Gamma(2iq)} \left(\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}\right)^{2iq-2} 2^{2iq-2} \int_0^1 (1-z)^{iq-1/2} z^{-iq} dz. \end{aligned}$$

Usando nuevamente la integral de Euler de primer grado, se obtiene que

$$\int_0^1 (1-z)^{iq-1/2} z^{-iq} dz = \frac{\Gamma\left(iq + \frac{1}{2}\right) \Gamma(1-iq)}{\Gamma(3/2)}.$$

Por lo tanto,

$$f_c = \frac{-i}{2p\Gamma(2iq)} \left(\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}\right)^{2iq-2} 2^{2iq-2} \frac{\Gamma\left(iq + \frac{1}{2}\right) \Gamma(1-iq)}{\Gamma(3/2)}, \quad (2.60)$$

pero

$$\Gamma\left(u + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(2u)}{2^{2u-1} \Gamma(u)} \quad \text{y} \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Debido a esto,

$$2^{2iq-2} \frac{\Gamma\left(iq + \frac{1}{2}\right) \Gamma(1-iq)}{\Gamma(3/2)} = \frac{\Gamma(2iq) \Gamma(1-iq)}{\Gamma(iq)}.$$

Substituyendo la relación anterior en (2.60), se obtiene

$$f_c(\theta) = \frac{-i}{2p} \left(\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}\right)^{2iq-2} \frac{\Gamma(1-iq)}{\Gamma(iq)} \quad (2.61)$$

pero $z\Gamma(z) = \Gamma(1+z)$, por lo que se obtiene finalmente

$$\begin{aligned} f_c(\theta) &= \frac{q}{2p} \left(\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}\right)^{2iq-2} \frac{\Gamma(1-iq)}{\Gamma(1+iq)} \\ &= \frac{q}{2p} \left(e^{2iq \ln \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}}\right) \frac{\Gamma(1-iq)}{\Gamma(1+iq)} \operatorname{sen}^{-2\frac{\theta}{2}} \end{aligned}$$

Sea

$$R = \frac{q}{2p} \left(e^{2iq \ln \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}}\right) \frac{\Gamma(1-iq)}{\Gamma(1+iq)},$$

este término corresponde a la R de Mott [16], pag. 437. Obsérvese como de nuevo hay un error, y éste es corregido en [17]. Por lo tanto,

$$f_c(\theta) = R \operatorname{csc}^2 \frac{\theta}{2}. \quad (2.62)$$

De esta forma, tenemos el siguiente sistema

$$\begin{aligned} -iqF_0 + G_0 &= R \operatorname{csc}^2 \frac{\theta}{2} \\ q \cot \frac{\theta}{2} F_0 - i \tan \frac{\theta}{2} G_0 &= 0 \end{aligned}$$

Resolviendo para F_0 y G_0 , se obtiene que

$$F_0 = \frac{i}{q} R \quad \text{y} \quad G_0 = R \cot^2 \frac{\theta}{2}. \quad (2.63)$$

Substituyendo en (2.55) y (2.56) respectivamente, se obtiene

$$f_0(\theta) = \left(\frac{q'}{q} - 1 + \operatorname{csc}^2 \frac{\theta}{2}\right) R \quad (2.64)$$

$$g_0(\theta) = i \left(\frac{q'}{q} - 1 \right) \cot \frac{\theta}{2} R . \quad (2.65)$$

Por lo tanto, las expresiones para las ondas parciales son

$$F_1(\theta) = F(\theta) - F_0(\theta) \quad \text{y} \quad G_1(\theta) = G(\theta) - G_0(\theta) ,$$

las cuales están dadas como

$$F_1(\theta) = \frac{i}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} l D_l [P_l(\cos \theta) - P_{l-1}(\cos \theta)] (-1)^l$$

$$G_1(\theta) = \frac{i}{2p} \sum_{l=1}^{\infty} l^2 D_l [P_l(\cos \theta) + P_{l-1}(\cos \theta)] (-1)^l \quad (2.66)$$

donde $D_l = T_l - T_l(\alpha \rightarrow 0)$. Por lo que la convergencia de las series en (2.66) está asegurada, ya que, $l^2 D_l$ está acotada cuando $l \rightarrow \infty$. El sistema (2.66) no aparece de esta forma en Mott [16] (y su uso es por medio de indicaciones verbales), pero sí en Mott y Massey [17] y sirve como punta de partida para varios artículos sobre el tema, como por ejemplo: el de McKinley y Feshbach [14] y el de Gluckstern y Lin [7].

Como una primera aproximación de la sección transversal de dispersión tenemos que

$$\hat{f}_0 = f_0 + g_0(\nu \cdot \sigma)$$

por lo que

$$\begin{aligned} |\hat{f}_0|^2 &= f_0 f_0^* + g_0 g_0^* + f_0 g_0^* + g_0 f_0^* \\ &= |f_0|^2 + |g_0|^2 + f_0 g_0^* + g_0 f_0^* \end{aligned}$$

donde $|f_0|^2 + |g_0|^2$ corresponde a la dispersión total del haz dispersado, y $f_0 g_0^* + g_0 f_0^*$ corresponde a alguna polarización en la colisión del haz dispersado. De esta forma, usando (2.64) y (2.65) se obtiene que

$$|f_0|^2 + |g_0|^2 = \left(\frac{q' - q}{q} + \csc^2 \frac{\theta}{2} \right)^2 |R|^2 + \left(\frac{q' - q}{q} \right)^2 \left(\cot^2 \frac{\theta}{2} \right) |R|^2 .$$

Pero R se puede expresar como

$$R = \frac{q}{2p} \left(e^{2iq \ln \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}} \right) e^{-2i \operatorname{arg} \Gamma(1+iq)}$$

ya que

$$\frac{\Gamma(1-iq)}{\Gamma(1+iq)} = e^{-2i \operatorname{arg} \Gamma(1+iq)}$$

por lo tanto,

$$|R|^2 = R \cdot R^* = \frac{q^2}{4p^2} \quad (2.67)$$

Usando (2.67) se tiene que,

$$|f_0|^2 + |g_0|^2 = \left[\left(\frac{q' - q}{q} \right)^2 \left(1 + \cot^2 \frac{\theta}{2} \right) + 2 \frac{q' - q}{q} \operatorname{csc}^2 \frac{\theta}{2} + \operatorname{csc}^4 \frac{\theta}{2} \right] \frac{q^2}{4p^2}$$

$$= \left[\frac{q' - q}{q} \operatorname{csc}^2 \frac{\theta}{2} + \operatorname{csc}^4 \frac{\theta}{2} \right] \frac{q^2}{4p^2},$$

pero de (2.29) y (2.31) tenemos que

$$q = \frac{Ze^2}{\hbar v}, \quad q' = \frac{Ze^2}{\hbar v} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{1/2} \quad \text{y} \quad p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Substituyéndolas en la relación anterior, y tomando en cuenta que se habían usado unidades atómicas, se obtiene finalmente

$$|f_0|^2 + |g_0|^2 = \frac{Z^2 e^4}{4mv^4} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \left[\operatorname{csc}^4 \frac{\theta}{2} - \frac{v^2}{c^2} \operatorname{csc}^2 \frac{\theta}{2} \right]. \quad (2.68)$$

Esta ecuación se encuentra en algunos libros de texto, como por ejemplo: en Berestetskii y Lifshitz [2] y en Holstein [10]; pero es obtenida por medio de la matriz de dispersión y teoría de tensores.

Para una mejor aproximación de (2.68) es necesario expandir el término D_l de (2.66)

en potencias de α , por lo que

$$D_l = T_l(\alpha = 0) - T_l(\alpha = 0) + \frac{\alpha}{1!} T_l'(\alpha = 0) + \frac{\alpha^2}{2!} T_l''(\alpha = 0) + O(\alpha^4)$$

pero

$$T_l'(\alpha = 0) = 0$$

y

$$T_l''(\alpha = 0) = -\frac{T_l(\alpha = 0)}{l} [\psi(l - iq) - \psi(l + 1 + iq) - i\pi]$$

donde

$$\psi(l - iq) = \frac{\Gamma'(l - iq)}{\Gamma(l - iq)} \quad \text{y} \quad \psi(l + 1 + iq) = \frac{\Gamma'(l + 1 + iq)}{\Gamma(l + 1 + iq)},$$

entonces

$$D_l = -\frac{\alpha^2}{2} T_l(\alpha = 0) [\psi(l - iq) - \psi(l + 1 + iq) - i\pi] + O(\alpha^4).$$

Pero $T_l(\alpha = 0)$, $\psi(l - iq)$ y $\psi(l + 1 + iq)$ en potencias de q están dadas por:

$$\begin{aligned} T_l(\alpha = 0) &= -\left\{ \frac{\Gamma(l)}{\Gamma(l+1)} (-1)^l - iq \frac{\Gamma(l)}{\Gamma(l+1)} \left[\frac{\Gamma'(l)}{\Gamma(l)} + \frac{\Gamma'(l+1)}{\Gamma(l+1)} \right] + \text{terms. } q^2, \text{ etc.} \right\} \\ \psi(l - iq) &= \psi(l) - iq \frac{\Gamma'(l)}{\Gamma(l)} \left[\frac{\Gamma''(l)}{\Gamma'(l)} - \frac{\Gamma'(l+1)}{\Gamma(l+1)} \right] + \text{terms. } q^2, \text{ etc.} \\ \psi(l + 1 + iq) &= \psi(l + 1) - iq \frac{\Gamma'(l+1)}{\Gamma(l+1)} \left[\frac{\Gamma''(l+1)}{\Gamma'(l+1)} - \frac{\Gamma'(l+1)}{\Gamma(l+1)} \right] + \text{terms. } q^2, \text{ etc.} \end{aligned} \quad (2.69)$$

Como $\frac{\Gamma(l)}{\Gamma(l+1)} = \frac{1}{l}$ y $\psi(l + 1) = \psi(l) + \frac{1}{l}$, substituyéndolas en (2.69) se obtiene que

$$D_l = \frac{\alpha^2}{2l^2} \left(i\pi + \frac{1}{l} \right) (-1)^{l+1} + \text{terms, } \alpha^2 q, \text{ etc.} \quad (2.70)$$

Colocando (2.70) en (2.66) y despreciando los términos $\alpha^2 q$ se obtiene

$$F(\theta) = F_0 - \frac{i\alpha^2}{4p} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l} \left(i\pi + \frac{1}{l} \right) (P_l - P_{l-1})$$

$$G(\theta) - G_0 - \frac{i\alpha^2}{4p} \sum_{l=1}^{\infty} \left(i\pi + \frac{1}{l} \right) (P_l + P_{l-1})$$

Pero

$$\sum_{l=1}^{\infty} i\pi (P_l + P_{l-1}) = i\pi \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) \quad \text{y} \quad \sum_{l=1}^{\infty} \frac{P_l + P_{l-1}}{l} = \ln \csc^2 \frac{\theta}{2}$$

por lo que,

$$F(\theta) = F_0 + O(\alpha^2)$$

$$G(\theta) = G_0 + \frac{i\alpha^2}{4p} \left[\pi \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) - i \ln \csc^2 \frac{\theta}{2} \right] + O(\alpha^2)$$

Usando (2.63) en la relación anterior se tiene que

$$F(\theta) = \frac{1}{q} R + O(\alpha^2)$$

$$G(\theta) = \cot^2 \frac{\theta}{2} R + \frac{\alpha^2}{4p} \left[\pi \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) - i \ln \csc^2 \frac{\theta}{2} + O(\alpha^2) \right]$$

Substituyéndolas en (2.55) y (2.56) respectivamente se obtiene

$$f(\theta) = \cot^2 \frac{\theta}{2} R + \frac{\alpha^2}{4p} \left[\pi \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) - i \ln \csc^2 \frac{\theta}{2} \right] - \frac{i^2 q'}{q} R$$

$$g(\theta) = \frac{iq'}{q} \cot \frac{\theta}{2} R - i \tan \frac{\theta}{2} \left\{ \cot^2 \frac{\theta}{2} R + \frac{\alpha^2}{4p} \left[\pi \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) - i \ln \csc^2 \frac{\theta}{2} \right] \right\}$$

lo cual implica que

$$f(\theta) = \left(\frac{q'-q}{q} + \csc^2 \frac{\theta}{2} \right) R + \frac{\alpha^2}{4p} \left[\pi \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) - i \ln \csc^2 \frac{\theta}{2} \right]$$

$$g(\theta) = -\frac{\alpha^2}{4p} \ln \csc^2 \frac{\theta}{2} + i \left[\left(\frac{q'-q}{q} \right) \cot \frac{\theta}{2} R - \frac{\pi \alpha^2}{4p} \tan \frac{\theta}{2} \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) \right]$$

Elevando al cuadrado, sumando miembro a miembro y usando nuevamente (2.67), entonces la dispersión total del haz dispersado es:

$$\begin{aligned} |f|^2 + |g|^2 &= \left\{ \frac{(q'-q)^2}{q} \left(1 + \cot^2 \frac{\theta}{2} \right) + 2 \frac{q'-q}{q} \csc^2 \frac{\theta}{2} + \csc^4 \frac{\theta}{2} + \right. \\ &+ \frac{\pi \alpha^2}{q} \left(\csc^2 \frac{\theta}{2} \right) \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) + \frac{\pi^2 \alpha^4}{2q^2} \left[\left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right)^2 + \ln^2 \csc^2 \frac{\theta}{2} \right] \left. \right\} \frac{q^2}{4p^2} \\ &= \frac{q^2}{4p^2} \left[\frac{q'^2 - q^2}{q^2} \csc^2 \frac{\theta}{2} + \csc^4 \frac{\theta}{2} + \frac{\pi \alpha^2}{q} \left(\csc^2 \frac{\theta}{2} \right) \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) + O(\alpha^4 q^2) \right] \end{aligned}$$

Usando los valores de q , q' , α y p en unidades ordinarias, la fórmula anterior puede expresarse en términos de la velocidad v del electrón, la cual queda como:

$$|f|^2 + |g|^2 = \frac{Z^2 e^4}{4m^2 v^4} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \left[\csc^4 \frac{\theta}{2} - \frac{v^2}{c^2} \csc^2 \frac{\theta}{2} + \frac{v \pi Z e^2}{c \hbar c} \left(\frac{1 - \sin \frac{\theta}{2}}{\sin^3 \frac{\theta}{2}} \right) + \text{terms. de orden } \alpha^2 q \right] \quad (2.71)$$

Obsérvese, como nuestra ecuación (2.71) corresponde a la (25) de Mott [16], salvo por un término, él tiene $\cos^2 \frac{\theta}{2}$ y nosotros obtuvimos $1 - \sin \frac{\theta}{2}$. Se puede ver claramente que las expresiones anteriores no corresponden a alguna identidad trigonométrica y sólo son iguales para $\theta = 0$ y $\theta = \pi$ (en general para $\theta = 4n\pi$ o $\theta = (4n + 1)\pi$, donde $n \in \mathcal{Z}$). El error está en el término G de Mott, ya que, él obtiene $\pi \csc^2 \frac{\theta}{2}$ y nosotros $\pi \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right)$, el cual también es obtenido por McKinley y Feshbach [14]. Por otra parte, nuestra ecuación (2.71) es idéntica a la (2.9) de Lehmann [13]. Por lo tanto, hay otro error en el artículo de Mott [16].

2.4 OBTENCION DE $G(\theta)$ COMO UNA FUNCION DE $F(\theta)$.

Es importante señalar que hay una relación entre las funciones de ondas parciales $F(\theta)$ y $G(\theta)$. Esta se obtiene derivando $F_1(\theta)$ con respecto a $\cos \theta$, por lo que se tiene

$$\frac{dF_1(\theta)}{d \cos \theta} = \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} l D_l \left[\frac{dP_l(\cos \theta)}{d \cos \theta} - \frac{dP_{l-1}(\cos \theta)}{d \cos \theta} \right] \quad (2.72)$$

pero los polinomios de Legendre cumplen con la siguiente relación de recurrencia

$$(1 + \cos \theta) \frac{d}{d \cos \theta} [P_l(\cos \theta) - P_{l-1}(\cos \theta)] = l \{P_l(\cos \theta) + P_{l-1}(\cos \theta)\}$$

substituyendola en (2.72) se obtiene

$$\frac{dF_1(\theta)}{d \cos \theta} = \frac{i}{2(1 + \cos \theta)} \sum_{l=1}^{\infty} l^2 D_l [P_l(\cos \theta) + P_{l-1}(\cos \theta)]$$

de (2.66) se tiene:

$$\frac{dF_1(\theta)}{d \cos \theta} = \frac{G_1(\theta)}{1 + \cos \theta},$$

lo cual implica que

$$G_1(\theta) = (1 + \cos \theta) \frac{dF_1(\theta)}{d \cos \theta},$$

por lo tanto,

$$G_1(\theta) = -\cot \frac{\theta}{2} \frac{dF_1(\theta)}{d \theta} \tag{2.73}$$

Por otra parte, usando $F_0(\theta)$ de (2.63) se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{dF_0(\theta)}{d \cos \theta} &= \frac{-i^2 q \cos \frac{\theta}{2}}{2 \operatorname{sen} \theta \left(\operatorname{sen} \frac{\theta}{2}\right)} \left[\frac{\Gamma(1 - iq)}{\Gamma(1 + iq)} \right] e^{2iq \ln \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}} \\ &= \frac{-iq}{1 + \cos \theta} \cot^2 \frac{\theta}{2} F_0(\theta) \end{aligned}$$

pero de (2.63) se obtiene que:

$$\frac{dF_0(\theta)}{d \cos \theta} = \frac{G_0(\theta)}{1 + \cos \theta},$$

lo cual implica que

$$G_0(\theta) = (1 + \cos \theta) \frac{dF_0(\theta)}{d \cos \theta},$$

por lo que

$$G_0(\theta) = -\cot \frac{\theta}{2} \frac{dF_0(\theta)}{d \theta} \tag{2.74}$$

De (2.73) y (2.74) se concluye que $F(\theta)$ y $G(\theta)$ satisfacen la misma relación

$$G(\theta) = -\cot \frac{\theta}{2} \frac{dF(\theta)}{d \theta} \tag{2.75}$$

El hecho de poder obtener un amplitud por medio de la derivación de la otra es muy importante, ya que, facilita la evaluación de la amplitud de dispersión total. Pero además, por la misma naturaleza de $F_1(\theta)$, esta serie converge más rápido que la de $G_1(\theta)$; por lo tanto, si se usa la relación (2.73) para obtener $G_1(\theta)$, entonces las componentes de la función de dispersión pueden expresarse mediante una misma función $F(\theta)$ y se obtendrían resultados numéricos más exactos, que los obtenidos con la relación (2.66). Debido a esto, la importancia de la relación (2.75) es doble y permite obtener una mejor aproximación de la dispersión total cuando ésta es requerida.

Capítulo 3

SECCION TRANSVERSAL DIFERENCIAL EN TERMINOS DE VARIABLES DINAMICAS Y SUS APLICACIONES.

En la sección 3.1 se caracterizará el tipo de daño producido por la interacción del haz de electrones con los átomos de la muestra. Después se pondrá la sección transversal diferencial en términos de la energía transferida (energía de desplazamiento) a los átomos por el haz de electrones debido a la colisión. Como existe un intervalo de energías de desplazamiento, entonces se promediará la sección transversal diferencial y a dicho promedio se le llama sección transversal de dispersión. En la sección 3.2 se aplicará la teoría obtenida para los átomos del cuasicristal $Al_{62}Cu_{20}Co_{15}Si_3$ y para los de la cerámica superconductora $YBa_2Cu_3O_7$ y de esta forma se obtiene información (por medio de las gráficas obtenidas) sobre la mínima energía que deben poseer los electrones para poder dispersar a los átomos correspondientes. Se compararán los resultados obtenidos teóricamente con los experimentales.

3.1 VARIABLES DINAMICAS.

Dentro de las aplicaciones de interes es importante tomar en cuenta la interacción de los electrones con muestras orgánicas o inorgánicas. Ahora bien, se sabe que desde el punto de vista químico sus estructuras son diferentes, por lo cual se pensaría que el resultado de la interacción del haz de electrones con las muestras también lo es. Es interesante ver que cuando el material inorgánico tiene una estructura atómica cristalina o cuasicristalina, los átomos tienen una posición permanente y ordenada (o casi ordenada); por lo que cualquier perturbación en uno de ellos tendrá efectos que pueden ser experimentados por los átomos vecinos. En los materiales orgánicos esto no ocurre algunas veces debido a su arreglo molecular. Pero a pesar de todo, tienen algo en común: ambos sufren daños, en menor o mayor grado, cuando interactúan con electrones rápidos. Los choques pueden ser elásticos, los cuales permiten obtener información posicional, o inelásticos, que proporcionan, información química.

Por otra parte, los electrones, debido a su carga eléctrica, interactúan en forma coulombiana tanto con el núcleo atómico como con los electrones de la muestra. Ambas clases de interacción pueden provocar un desplazamiento atómico irreversible. Al desplazamiento atómico resultante de la interacción electrón rápido con núcleo atómico, se le llama daño "knock-on" o choque directo, porque envuelve una transferencia directa del momentum y energía al átomo desplazado durante la colisión. Al desplazamiento atómico originado por la interacción electrón rápido con electrón atómico se le llama daño iónico (o radiolítico). Estos últimos son menos directos y requieren un mecanismo para convertir la energía potencial de la excitación electrónica en momentum nuclear y ocurren a bajas energías. En el daño de choque directo en ocasiones se tiene que la energía transferida al átomo desplazado es suficiente para que éste desplace a otro átomo y así sucesivamente, a esto se le llama desplazamiento de cascada. También se tiene que el daño de choque directo se da (Hobbs [9]) cuando los electrones son acelerados con voltajes mayores a 100 KeV , mientras que el iónico para menores a 100 KeV y cada uno predomina en su región.

Ahora bien, ya se ha visto que durante la interacción hay desplazamiento atómico, ¿pero cuántos son desplazados debido a la energía transferida por el haz de electrones? Para esto se puede hacer uso de la ecuación (2.71) la cual proporciona la sección transversal diferencial no sólo dependiendo del ángulo de dispersión θ , sino también de la velocidad v del electrón. Entonces se puede poner en términos de la energía cinética, por lo que la sección transversal diferencial depende de la energía cinética del haz de electrones.

Para hacer el cambio de variable es necesario usar la siguiente transformación (Lehmann [13])

$$\sigma(T; E) dT = \sigma(\theta) d\Omega \quad (3.1)$$

donde T es la energía cinética transferida a la partícula blanco (es decir, a una partícula de la muestra), $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ y E es la energía cinética del electrón. Pero en la teoría de colisiones existe la siguiente relación cinemática (Lehmann [13]), que se cumple tanto para la teoría no-relativista como para la relativista:

$$\frac{T}{T_{\max}} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (3.2)$$

donde T_{\max} en la teoría relativista es

$$T_{\max} = \frac{2ME(E + 2m_0c^2)}{(m_0 + M)^2 c^2 + 2ME} \quad (3.3)$$

y corresponde a la máxima energía transferida a la muestra de masa M por la partícula de masa m y energía E , la cual se obtiene cuando $\theta = \pi$; $E = m_0c^2$ es la energía en reposo del electrón (o proyectil).

De esta forma, diferenciando (3.2) con respecto a θ y substituyendo en (3.1) se obtiene:

$$\begin{aligned} \sigma(T; E) &= \frac{\sigma(\theta) 2\pi \sin\theta d\theta}{T_{\max} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta} \\ &= \sigma(\theta) \frac{4\pi}{T_{\max}} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Usando nuevamente (3.2) en (2.71) y substituyendo en (3.4), se tiene que

$$\begin{aligned} \sigma(T; E) &= \frac{Z^2 e^4}{4m^2 v^4} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) \left[\frac{T_{\max}^2}{T^2} - \frac{v^2 T_{\max}}{c^2 T} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{v \pi Z e^2}{c \hbar c} \left(\frac{1 - \sqrt{T/T_{\max}}}{(T/T_{\max})^{3/2}} \right) + O(\alpha^2 q) \right] \frac{4\pi}{T_{\max}} \\ &= 4\pi \left(\frac{Z e^2}{2mv^2} \right)^2 (1 - \beta^2) \left[\frac{T_{\max}}{T^2} - \frac{\beta^2}{T} - \frac{\pi\beta\alpha}{T} + \frac{\pi\alpha\beta\sqrt{T_{\max}}}{T^{3/2}} \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde $\beta = \frac{v}{c}$ y $\alpha = \frac{Ze^2}{\hbar c}$. La relación anterior se conoce como expresión de McKinley-Feshbach para la ecuación de Mott, la cual se usa en el trabajo de Lemann [13]. Esta ecuación es válida para $Z \leq 30$; para $Z > 30$ es necesario usar más términos (los de α^4 o α^6 según se requiera) en el cálculo de la ecuación (2.66).

Dado que siempre se puede encontrar una energía umbral de desplazamiento, entonces existe un intervalo de energías, el cual está asociado a un intervalo de secciones transversales $\sigma(T; E)$. Esto quiere decir que no todas las colisiones pueden producir un desplazamiento y por lo tanto, existe un intervalo de energías transferidas T que tienen la probabilidad de poder desplazar a las partículas blanco. Debido a esto se puede obtener el promedio de las secciones transversales $\sigma(T; E)$ para las energías transferidas T por los electrones de energía E , en el intervalo de energías $T_{\min} < T < T_{\max}$ por medio de la relación

$$\sigma_d(E) = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} P_d(T) \sigma(T; E) dT \quad (3.6)$$

donde T_{\min} es la mínima energía transferida al núcleo de masa M necesaria para poder desprender al átomo del enlace molecular y del medio, es decir, dejarlo en libertad; la función de peso P_d es la probabilidad de que la energía transferida T produzca un desplazamiento y $\sigma_d(E)$ es la sección transversal de desplazamiento.

La función P_d es tomada de Rickards et al.[20], y está dada por razones físicas como

$$P_d(T) = \begin{cases} 0 & , \text{ si } T < T_{\min} \\ 1 & , \text{ si } T_{\min} < T < 2.5T_{\min} \\ QT & , \text{ si } T > 2.5T_{\min} \end{cases} \quad (3.7)$$

Cabe mencionar que cuando $T > 2.5T_{\min}$, el desplazamiento de cascada es tomado en cuenta por la angostura $Q = (0.812T_{\min}) R$, donde R es la fracción de energía necesaria para el desplazamiento en cascada. El valor de R es variable y depende de los elementos y energía consideradas.

Tomando de (3.7) $P_d = 1$ y substituyéndola en (3.6) se obtiene:

$$\begin{aligned} \sigma_d(E) &= 4\pi \left(\frac{Z e^2}{2mv^2} \right)^2 (1 - \beta^2) \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \left[\frac{T_{\max}}{T^2} - (\beta^2 + \pi\alpha\beta) \frac{1}{T} + \pi\alpha\beta \frac{T_{\max}}{T^{3/2}} \right] dT \\ &= 4\pi \left(\frac{Z e^2}{2mv^2} \right)^2 (1 - \beta^2) \left[\frac{T_{\max}}{T_{\min}} - 1 - (\beta^2 + \pi\alpha\beta) \ln \frac{T_{\max}}{T_{\min}} - 2\pi\alpha\beta \left(1 - \sqrt{\frac{T_{\max}}{T_{\min}}} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.8)$$

Pero de (3.8) se tiene que

$$\begin{aligned} \left(\frac{Z e^2}{2mv^2} \right)^2 (1 - \beta^2) &= \left(\frac{Z e^2}{2mc^2} \right)^2 \frac{1 - \beta^2}{\beta^4} \\ &= Z^2 \left(\frac{m e^4}{2\hbar^2} \right)^2 \left(\frac{\hbar^2}{m e^2} \right)^2 \left(\frac{1 - \beta^2}{m^2 c^4 \beta^4} \right) \end{aligned}$$

Como $\frac{m e^4}{2\hbar^2} = U_R$ es la energía de Rydberg (13.6 eV) para $Z = 1$ y $\frac{\hbar^2}{m e^2} = a_0$ (53 pm) es el radio de Bohr; entonces se obtiene finalmente que

$$\begin{aligned} \sigma_d(E) &= 4\pi Z^2 a_0^2 U_R^2 \left(\frac{1 - \beta^2}{m^2 c^4 \beta^4} \right) \left[\frac{T_{\max}}{T_{\min}} + 2\pi\alpha\beta \sqrt{\frac{T_{\max}}{T_{\min}}} - \right. \\ &\quad \left. - (\beta^2 + \pi\alpha\beta) \ln \frac{T_{\max}}{T_{\min}} - (1 + 2\pi\alpha\beta) \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

Esta es la expresión de Hobbs [9]. Tomando en cuenta que como la masa del electrón es

despreciable con respecto a la masa M del núcleo atómico y como la energía cinética E puede ser muy pequeña comparada a la energía en reposo Mc^2 del núcleo, entonces la máxima energía transferida en (3.3) se transforma en este caso a

$$T_{\max} = \frac{2E(E + 2mc^2)}{Mc^2} \quad (3.10)$$

Sin embargo se tiene que sólo una fracción de la energía transferida total es disponible para el desplazamiento atómico. Por lo que, la ecuación (3.9) únicamente es válida para elementos ligeros;¹ para elementos pesados es necesario usar la expresión completa de Mott. Por lo tanto, el uso de la relación (2.75) es el más recomendable (por su doble importancia) para obtener (2.71) por medio de una evaluación numérica.

3.2 DAÑO POR RADIACION ELECTRONICA EN $YBa_2Cu_3O_7$ y $Al_62Cu_{20}Co_{15}Si_3$.

Uno de los campos donde la teoría descrita anteriormente se puede aplicar completamente es en la Microscopía Electrónica de Transmisión (MET) y en particular en su área de Alta Resolución (METAR). En este campo la muestra bajo observación es expuesta a un haz de electrones generados con voltajes cuyos valores típicos se encuentran en el intervalo de (1 KeV , 2 MeV) Reyes y Yacaman [18]. Las muestras observadas son principalmente de materiales inorgánicos y cubren la totalidad de materiales estudiados en las Ciencias de Materiales. Las muestras de materiales orgánicos, generalmente aquellos estudiados en las Ciencias Biológicas, también pueden ser analizadas por MET, pero en este caso la preparación de la muestra es bastante laboriosa en comparación con los materiales inorgánicos Reyes y Yacaman [18].

Dentro de las aplicaciones de la teoría anterior están los daños causados en una aleación, por la interacción con electrones rápidos. Para esto se han tomado como ejemplo

¹Hobbs [9] define a los átomos ligeros, a aquellos que cumplen que $Z \leq 40$ y los pesados para $Z > 40$.

dos muestras: una de ellas es la aleación cuasicristalina el $Al_{62}Cu_{20}Co_{15}Si_3$ y la otra es la cerámica superconductora $YBa_2Cu_3O_7$.

El proceso de daño por radiación que sufre una muestra durante su observación en el MET, puede ser seguido tanto en el modo imagen como en el modo patrón de difracción fig. 2. En ambos casos se ven los cambios producidos en la muestra y pueden ser estudiados en forma detallada.

En la figura 3 se muestra la gráfica² de la ec. (3.10) en el rango de energías de $0.05 MeV$ hasta $2 MeV$ y los elementos corresponden a los de una cerámica. En la gráfica se puede observar claramente como entre más ligeros son los elementos, mayor es la energía transferida, lo cual es de esperarse, ya que, T_{max} depende del inverso de la masa del átomo. Además, por medio de la intersección de las gráficas con la energía de transferencia de $20 eV$, se puede obtener información sobre la mínima energía con la que deben ser acelerados los electrones para producir el desplazamiento atómico. Obsérvese, como para el Ba se requieren energías mayores a $2 MeV$ para poder transferirle una energía de $20 eV$, pero esto no quiere decir, que el Ba no puede ser desplazado con una energía menor a $2 MeV$, lo que significa es que el bario necesita menos de $20 eV$ para poder ser desplazado, como se mostrará posteriormente.

Por otra parte, la fig. 4 representa la gráfica de la ec. (3.9) con ayuda de (3.10), tomando $T_{min} = 20 eV$ la cual corresponde al promedio de las T_{min} (en la mayoría de los metales T_{min} se encuentra entre $10 - 30 eV$). Los elementos corresponden a los de la aleación cuasicristalina del $Al_{62}Cu_{20}Co_{15}Si_3$. Aquí se puede ver el caso contrario: entre más ligero es el átomo menor es su sección transversal de dispersión. Por la forma de como fue obtenida la sección de dispersión se tiene que para $\sigma_d(E) > 0$ hay producción de huecos. Por lo tanto, la gráfica nos proporciona información, sobre la mínima energía $E_{min} = E_d$ con la cual deben ser acelerados los electrones para producir desplazamiento de átomos de la aleación, es decir, producir huecos en la aleación. De esta forma, tenemos que

²Esta gráfica y las subsiguientes fueron realizadas con el programa de computo escrito en Turbo-Pascal, el cual es un algoritmo muy simple para la ecuación (3.9) y no requiere demasiado detalle en su evaluación.

dos muestras: una de ellas es la aleación cuasicristalina el $Al_{62}Cu_{20}Co_{15}Si_3$ y la otra es la cerámica superconductora $YBa_2Cu_3O_7$.

El proceso de daño por radiación que sufre una muestra durante su observación en el MET, puede ser seguido tanto en el modo imagen como en el modo patrón de difracción fig. 2. En ambos casos se ven los cambios producidos en la muestra y pueden ser estudiados en forma detallada.

En la figura 3 se muestra la gráfica² de la ec. (3.10) en el rango de energías de $0.05 MeV$ hasta $2 MeV$ y los elementos corresponden a los de una cerámica. En la gráfica se puede observar claramente como entre más ligeros son los elementos, mayor es la energía transferida, lo cual es de esperarse, ya que, T_{max} depende del inverso de la masa del átomo. Además, por medio de la intersección de las gráficas con la energía de transferencia de $20 eV$, se puede obtener información sobre la mínima energía con la que deben ser acelerados los electrones para producir el desplazamiento atómico. Obsérvese, como para el Ba se requieren energías mayores a $2 MeV$ para poder transferirle una energía de $20 eV$, pero esto no quiere decir, que el Ba no puede ser desplazado con una energía menor a $2 MeV$, lo que significa es que el bario necesita menos de $20 eV$ para poder ser desplazado, como se mostrará posteriormente.

Por otra parte, la fig. 4 representa la gráfica de la ec. (3.9) con ayuda de (3.10), tomando $T_{min} = 20 eV$ la cual corresponde al promedio de las T_{min} (en la mayoría de los metales T_{min} se encuentra entre $10 - 30 eV$). Los elementos corresponden a los de la aleación cuasicristalina del $Al_{62}Cu_{20}Co_{15}Si_3$. Aquí se puede ver el caso contrario: entre más ligero es el átomo menor es su sección transversal de dispersión. Por la forma de como fue obtenida la sección de dispersión se tiene que para $\sigma_d(E) > 0$ hay producción de huecos. Por lo tanto, la gráfica nos proporciona información, sobre la mínima energía $E_{min} = E_d$ con la cual deben ser acelerados los electrones para producir desplazamiento de átomos de la aleación, es decir, producir huecos en la aleación. De esta forma, tenemos que

²Esta gráfica y las subsiguientes fueron realizadas con el programa de computo escrito en Turbo-Pascal, el cual es un algoritmo muy simple para la ecuación (3.9) y no requiere demasiado detalle en su evaluación.

la mínima energía E_d para el Al y Si es a 200 KeV y para el Co y Cu es aproximadamente a 400 KeV . En la fig. 5 también se ha graficado la ec. (3.9), pero en este caso los elementos corresponden a los de la cerámica superconductora y la mínima energía de los electrones E_d son: para el O de 100 KeV , para el Cu de 400 KeV y para el Y y el Ba arriba de 500 KeV . Por lo tanto, la ec. (3.9) proporciona un método para obtener información sobre la mínima energía de desplazamiento de los elementos de una muestra antes de ser analizada experimentalmente. También permite elegir un intervalo en el cual existe la seguridad de que se produzcan huecos de un determinado átomo y de los otros no. Por ejemplo: en el intervalo de $100 - 400\text{ KeV}$ se producen huecos de O , Al y Si , mientras que de los otros no. Finalmente, obsérvese que a 2 MeV todos los elementos pueden ser desplazados.

Ahora bien, debido a que el proceso anterior es irreversible, entonces se tiene que una vez sufrido el daño en la muestra, ésta permanece estable, lo cual puede ser benéfico o perjudicial a ésta. Experimentalmente han sido observados algunos daños por Reyes-Gasga et al. [19], al analizar la transición de fase cuasicristalina a cristalina del $Al_{62}Cu_{20}Co_{15}Si_3$ con ayuda del microscopio electrónico de alta resolución MET. En el intervalo de voltajes de aceleración entre $100 - 400\text{ KeV}$ la muestra sufrió una serie de cambios los cuales fueron analizados en el modo imagen y en los patrones de difracción (fig. 2a), hasta llegar al estado ordenado de vacancias; la transición fue producto del desplazamiento atómico y los resultados teóricos corresponden a los observados experimentalmente. En Hobbs [9] se menciona que cuando el cristal α -quartz es analizado con el microscopio electrónico a 150 KeV el cristal sufre una amorfización, usando la información de la fig. 4 y de la fig. 5 se puede concluir que la transición fue producto del desplazamiento de átomos de oxígeno, ya que, no se tiene la energía suficiente para desplazar los del silicio

Es bien sabido que en algunos materiales superconductores la cantidad de huecos de O son importantes para disminuir la resistividad y por lo tanto, aumentar la conductividad. De esta manera, tenemos que si la muestra de $YBa_2Cu_3O_7$ es bombardeada con voltajes de aceleración entre $100 - 400\text{ KeV}$, entonces se tiene la seguridad de que sólo habrá

huecos de oxígeno y la muestra podría ser enriquecida (fig. 2b). Por lo tanto, se tiene un método para seleccionar el elemento que se quiere dispersar.

Anteriormente se había mencionado que la ec. (3.9) sólo era válida para elementos ligeros, ya que, sólo una fracción de la energía total transferida al átomo es usada para producir el desplazamiento; la otra fracción termina como calor. Si el contacto térmico de la muestra es pobre, como a menudo ocurre en muestras analizadas con el MET, entonces una exposición prolongada puede elevar la temperatura excesivamente y en el menor de los casos logra ablandarla; pero en algunas ocasiones podría fundirla, tal y como lo señala Hobbs [9]. También se tiene que una exposición prolongada puede producir desplazamiento atómico pero desordenado, es decir, se obtiene un estado desordenado de vacancias. Por lo tanto, se debe tener control sobre el tiempo de exposición con el MET, porque la elevación de la temperatura, las vacancias desordenadas, junto con el daño de cascada pueden causar degradaciones estructurales irreparables de la muestra, tal y como fueron observadas en Acosta et al. [1].

En el artículo anterior se menciona que las zeolitas se caracterizan porque su estructura forma una serie de tuneles de varios diámetros y que al analizar la zeolita $Ca - A$ con el MET (a 100 KeV) se modificaron las dimensiones de los tuneles, en poco tiempo había una clara pérdida en la cristalidad, junto con un incremento en la densidad de imperfecciones circulares de un material vitrio; se produjeron variaciones en los grosores promedio de ésta y mayor daño en los bordes, además la zeolita se amorfizó. También se señala que hay evidencias de que el Al y el Si sufren desplazamiento directo arriba de 200 KeV , pero no se menciona nada sobre el O . De esta forma, si se usa la información obtenida por las gráficas 4 y 5, entonces a 100 KeV hay desplazamiento de átomos de O y por lo tanto, el daño es de choque directo y no iónico como se pensaba.

Finalmente se tiene que, debido a que la ec. (3.9) se obtuvo, tomando en cuenta que la interacción del haz de electrones con el núcleo atómico es del tipo coulombiano, ésta también puede ser usada para cualquier otro tipo de partícula incidente, como por ejemplo, cuando se usa el acelerador de partículas alfa.

CONCLUSIONES.

En el presente trabajo se encontró que hay una serie de errores en algunas expresiones que usó Mott [16] para llegar a la ecuación de dispersión relativista (tal y como se muestra en el capítulo 2, secciones 2.2 y 2.3). Es importante señalarlos, ya que, la mayor parte de la literatura que trata el tema menciona como referencia dicho artículo. Algunos errores son corregidos en trabajos posteriores de él mismo; pero de otros no se encontró que se haya hecho. Por lo tanto, para cualquier trabajo posterior a este artículo, ya sea para llegar a la ecuación de Mott o para alguna investigación en particular, deberá tomarse en cuenta que las expresiones correctas son: para la función de dispersión en términos de los corrimientos de fase es

$$f(\theta) = \frac{i\hbar}{2\pi p} \cdot \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ (k+1) \left(e^{2i\eta_k + 1k\pi} - 1 \right) + k \left(e^{2i\eta_{-k-1} + ik\pi} - 1 \right) \right\} P_k(\cos \theta);$$

para el término R de Mott es

$$R = \frac{1}{2} q \left(\frac{\Gamma(1-iq)}{\Gamma(1+iq)} \right) \exp \left(2iq \ln \frac{\theta}{2} + i\pi \right);$$

para la onda parcial $G(\theta)$ es

$$G = G_0 + \frac{\alpha^2}{4} \left[\pi \left(\csc \frac{\theta}{2} - 1 \right) - i \ln \csc^2 \frac{\theta}{2} \right]$$

y para la dispersión total del haz dispersado es

$$|f|^2 + |g|^2 = \frac{Z^2 \epsilon^4}{4m^2 v^4} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \left[\csc^4 \frac{\theta}{2} - \frac{v^2}{c^2} \csc^2 \frac{\theta}{2} + \frac{v}{c} \frac{2\pi Z \epsilon^2}{\hbar c} \left(\frac{1 - \sin \frac{\theta}{2}}{\sin^3 \frac{\theta}{2}} \right) + \text{terms. de orden } \alpha^2 \right]$$

Por otra parte, al poner la ecuación de Mott en términos de la energía cinética del haz de electrones rápidos se puede contar con una expresión teórica, la sección transversal

de dispersión, la cual proporciona información para caracterizar los intervalos de energía en los cuales se tenga plena seguridad de que ahí la muestra sufrirá un daño de choque directo, es decir, se puede seleccionar (antes del experimento o aplicación tecnológica) el elemento que se desea desplazar (o desprender) de la muestra, y de esta forma, tener control sobre los huecos producidos por la dispersión.

El tener control del elemento dispersado y con ello el número de vacancias, permiten tener un control sobre otros parámetros físicos debido a los defectos, como pueden ser: ópticos, cambios en el índice de refracción; electromagnéticos, variando la resistividad o conductividad de una aleación y mecánicos, variando la estructura cristalina. También permite diseñar métodos de protección y evitar daños irreparables en la muestra. Por lo tanto, se puede contar con una gran gama de aplicaciones tecnológicas por el conocimiento del número y tipos de defectos creados durante la interacción electrón-átomo, especialmente en la producción de cerámicas, polímeros, semiconductores y superconductores.

Finalmente se tiene que no hay una expresión para la sección transversal de dispersión en función del tiempo, lo cual permitiría tener un mayor control sobre los daños producidos en las aleaciones en el intervalo de energías usado en esta tesis.

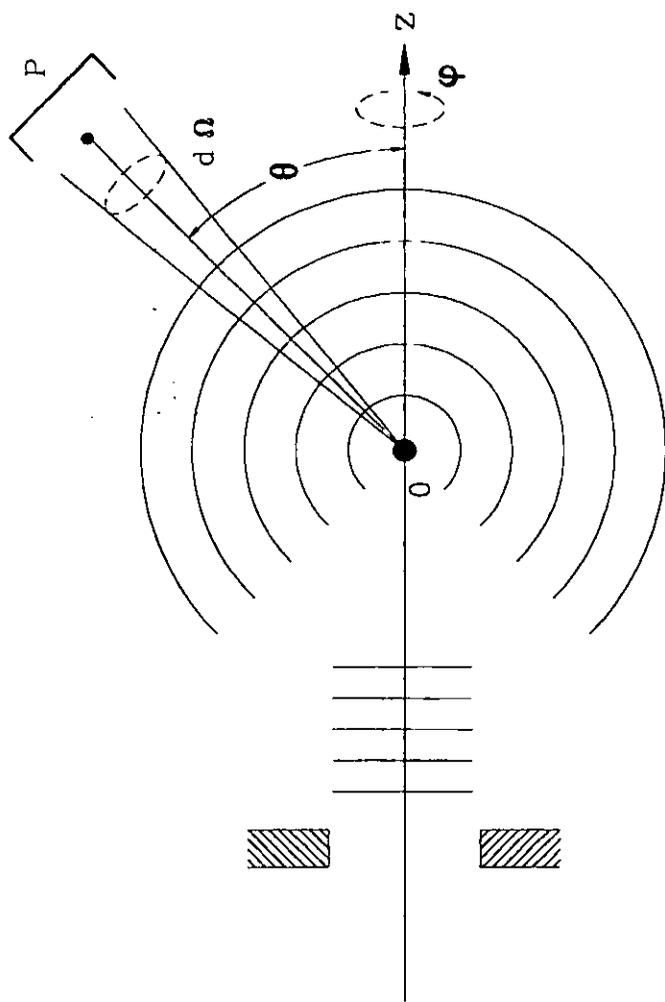


Fig.1 Dispersión de Partículas.

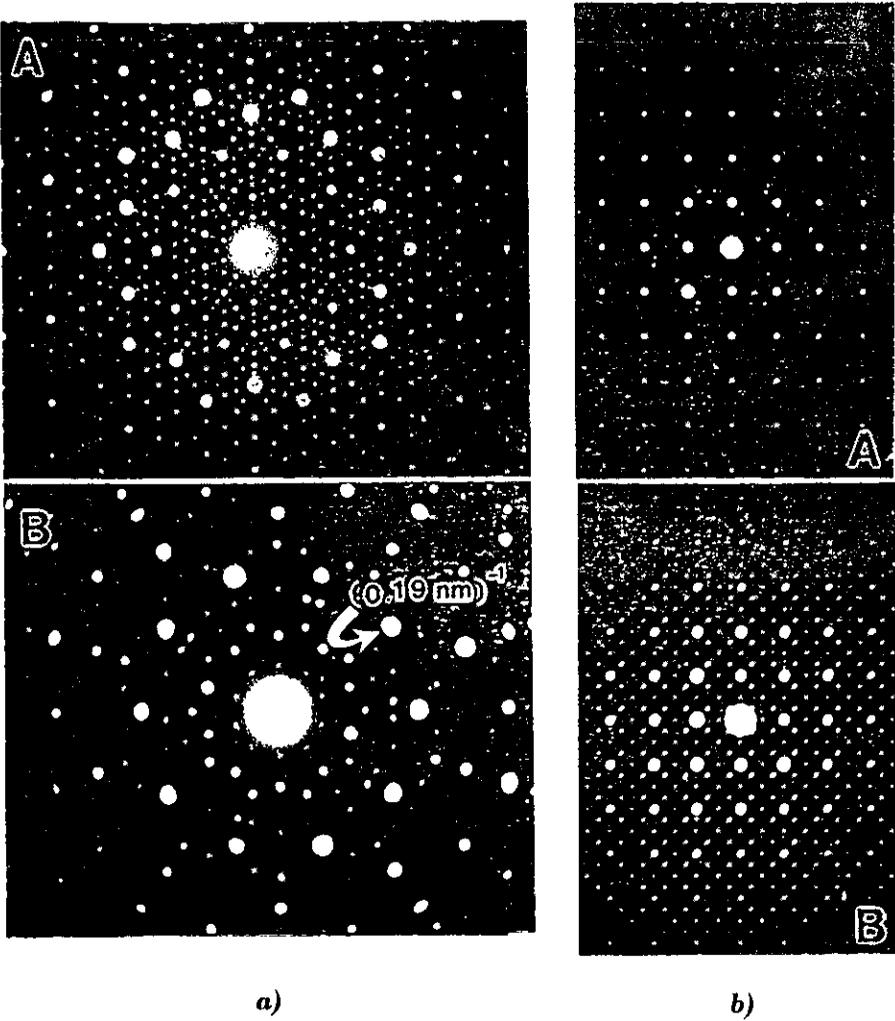


Fig. 2 Patrones de difracción antes y después de ser analizadas las aleaciones para: **a)** cuasicristal; **b)** cerámica superconductora.

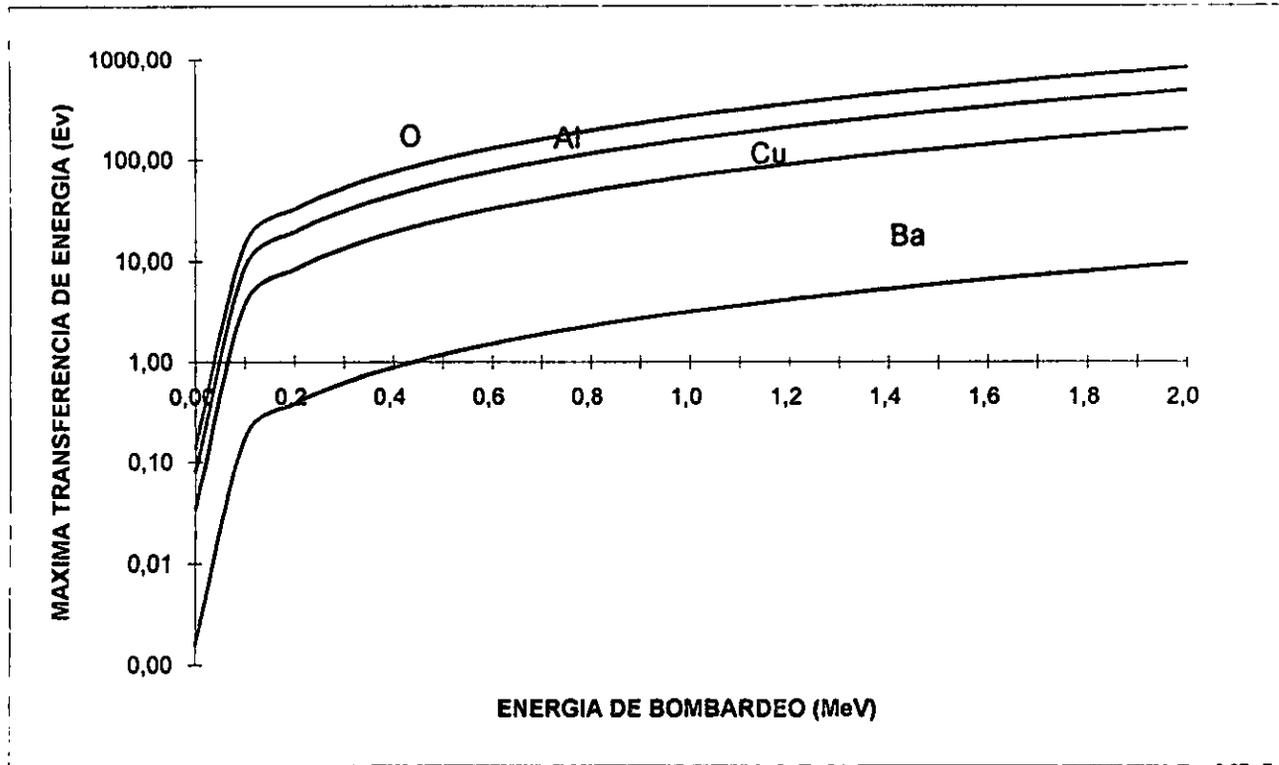


Fig. 3 Máxima transferencia de energia para una cerámica.

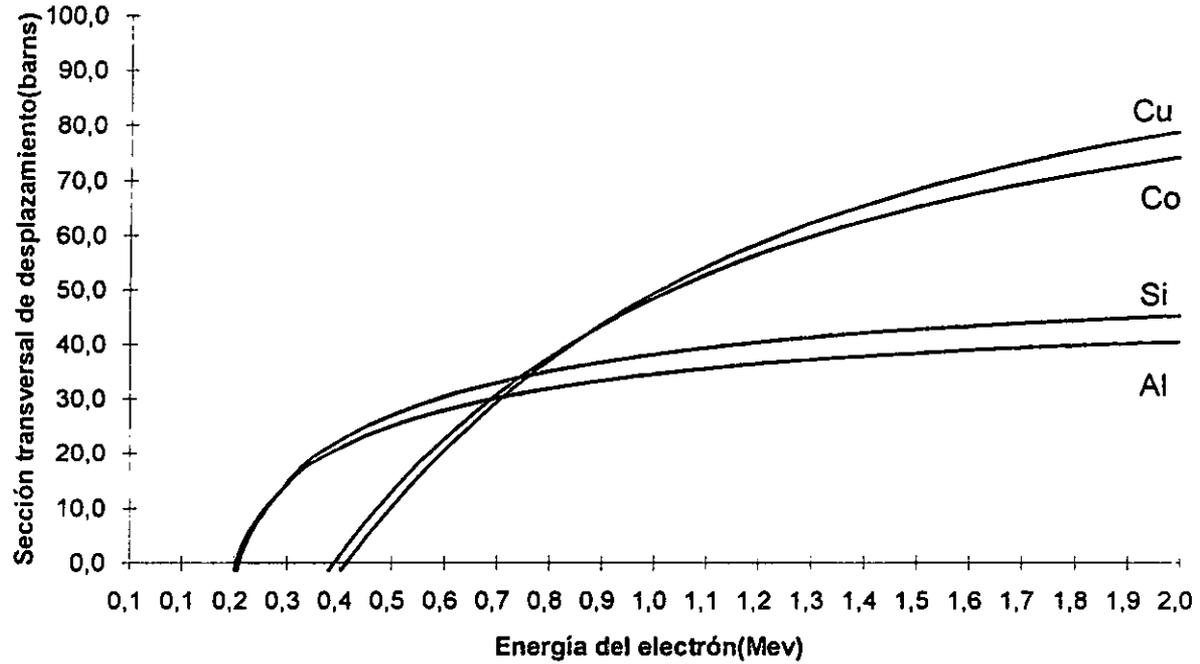


Fig. 4 Sección transversal de desplazamiento para la aleación cuasicristalina.

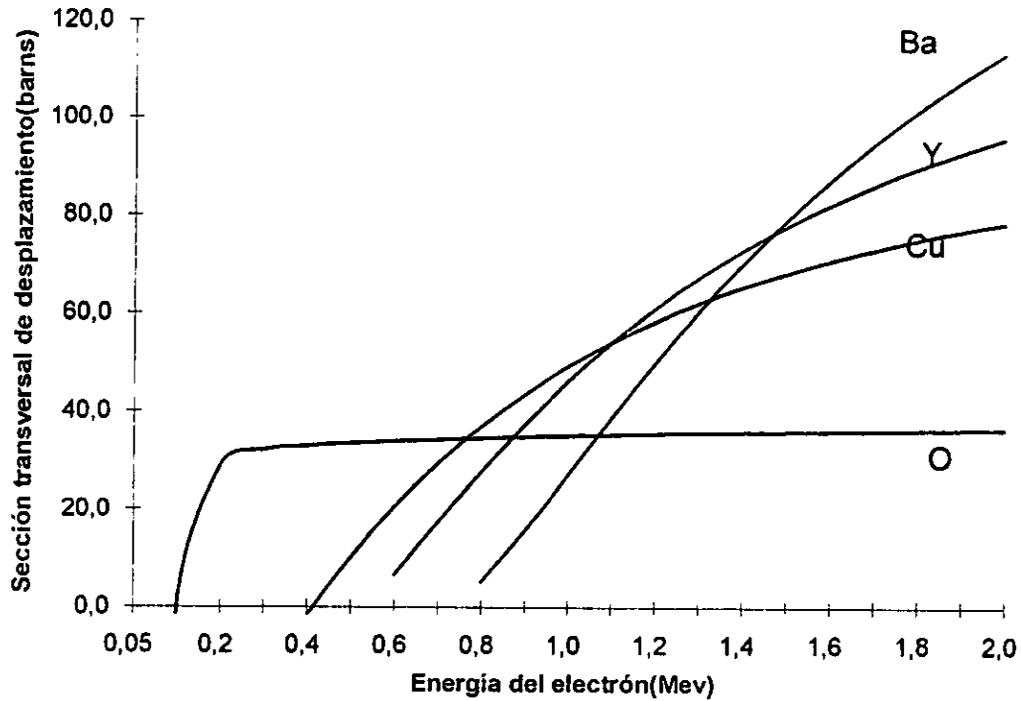


Fig. 5 Sección transversal de desplazamiento para la cerámica superconductora.

Bibliografía

- [1] D. R. Acosta, G. P. Vázquez, R. García and V. M. Castaño, *Radiation Effects and Defects in Solids*, 1993, vol. 127, pp. 37-43.
- [2] Berestetskii V. B., Lifshitz B. M., *Teoría Cuántica Relativista vol. 4* (Ed. REVERTE, Barcelona 1971).
- [3] Child M. S., *Molecular Collision Theory*, (Academic Press, London, 1974).
- [4] Darwin, 'Proc. Roy. Soc.', vol. 118 p. 654 (1928).
- [5] Dirac, 'Proc. Roy. Soc.', vol. 117, p. 610 (1928).
- [6] Dirac P. A. M., *The Principles of Quantum Mechanics*. (Oxford University Press, London, 1974).
- [7] R. L. Gluckstern and S. R. Lin, *J. Math. Phys.*, vol. 5, p. 1594 (1964).
- [8] Gordon, 'Z. Physik', vol. 48, p. 11 (1928).
- [9] Hobbs L. W. *Intruduction to analytical electron microscopy* (Edited by Hren J.J., Goldstein J.I. and Joy D.C.), Plenum Pres, New York, 1979.
- [10] Holstein R. B., *Topics in Advanced Quantum Mechanics*, (Addison Wesley Publishing Company, 1992).
- [11] Joachain J. Ch., *Quantum Collision Theory*, (North-Holland Publishing Company, 1975).

- [12] Landau L. D., Lifshitz E. M., *Mecánica Cuántica No-Relativista*, vol. 3, (Ed. REVERTE, Barcelona, 1983).
- [13] Lehmann S.C., *Interaction of Radiation with Solids and Elementary Defect Production* (North-Holland, Amsterdam, 1977).
- [14] McKinley W.A.:J. and Feshbach M., 1948, *Phys. Rev.* 74 1759.
- [15] Mott, 'Proc. Roy. Soc.', vol. 118, p. 542 (1928).
- [16] Mott, 'Proc. Roy. Soc.', vol. 124, p. 425 (1929).
- [17] Mott N. F., Massey H.S.W., *The theory of Atomic Collision*, (Oxford University Press, Oxford, 1952).
- [18] J. Reyes-gasga y M. José-Yacamán, *Microscopía Electrónica, una visión del microcosmos*. (Fondo de Cultura Económica 1996).
- [19] Reyes-Gasga, R. García G. and M. José-Yacamán, *Radiat. Phys. Chem.* Vol. 45, No. 2, pp. 283-291, 1995.
- [20] J. Rickards, A. Olivera and José-Yacamán, *Ultramicroscopy* 30 (1989) pp. 425-428.
- [21] Rodberg S.L., Thaler M.R., *Introduction to the Quantum Theory of Scattering*, (academic Press, New York, 1967).
- [22] Schiff I.L., *Quantum Mechanics*, (McGraw-Hill Kogakusha, Tokyo 1968).
- [23] Sitenko G.A. *Scattering Theory*, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1991).
- [24] Urban P., *Zeits. f. Physik*, 119, 67 (1942).
- [25] Whittaker E.T., Watson G.N., *A Course of Modern Analysis*, (Cambridge University Press, 1990).