

Una ecuación diferencial para el cálculo de las funciones de Jost para potenciales regulares

Aplicación al sistema $e^- + H(1s)$

Uma equação diferencial para o cálculo das funções de jost para potenciales regular

Aplicação ao sistema $e^- + H(1s)$

A differential equation for the calculation of the functions de jost for regular potentials

Application to the system $e^- + H(1s)$

Luis Alcalá Varilla¹ y Héctor Maya Taboada²

Recepción: 01-feb-2011/Modificación: 10-may-2011/Aceptación: 18-may-2011

Se aceptan comentarios y/o discusiones al artículo

Resumen

La función de Jost F_l es el concepto teórico que permite estudiar de una manera unificada los estados ligados, virtuales, dispersados y resonantes que pueden originarse en las interacciones entre dos sistemas cuánticos. En teoría de colisiones la función de Jost F_l juega un papel muy importante, puesto que se relaciona de forma directa con la matriz de dispersión \mathbf{S} . En la mayoría de los métodos existentes en teoría de colisiones para el cálculo de la función F_l , primero es necesario conocer la solución regular del sistema tratado, la cual se obtiene via solución de la ecuación radial de Schrödinger, para poder hallar

¹ Magíster en Ciencias Físicas, luisalcalavarilla@yahoo.es, profesor, Grupo de Física Teórica y Aplicada, Universidad de Córdoba (Unicor), Montería-Colombia.

² Estudiante de Doctorado, hectorrogermaya@yahoo.es, profesor, Grupo de Física Teórica y Aplicada, Universidad de Córdoba (Unicor), Montería-Colombia.

después la función F_l . Con la metodología propuesta en este trabajo se obtiene una ecuación diferencial lineal ordinaria de segundo orden cuya solución en los límites asintóticos coincide con la función F_l . La ventaja del trabajo presente es que al solucionar la ecuación diferencial, mencionada antes, se puede obtener de manera directa la función F_l , sin tener que hallar la solución regular del problema. Otra ventaja es que no importando las condiciones iniciales (reales) que se escojan para la solución de la ecuación diferencial, siempre se obtienen los mismos elementos de la matriz \mathbf{S} . Como un ejemplo y prueba de la metodología, se resuelve dicha ecuación diferencial numéricamente, para la dispersión elástica de electrones por átomos de hidrogeno en el estado base a bajas energías ($e^- + H(1s)$), obteniendo para este sistema la función F_l , los elementos de la matriz \mathbf{S} y los corrimientos de fase, estos últimos se comparan con los calculados por Klaus Bartschat [1].

Palabras claves: función de Jost, ecuación diferencial, matriz de dispersión, corrimientos de fase.

Resumo

A função de Jost F_l é o conceito teórico que permite um estudo unificado de estados ligados, virtual, dispersos e de ressonância que podem surgir nas interações entre dois sistemas quânticos. Em teoria de colisões o função de Jost F_l desempenha um papel muito importante, pois se relaciona diretamente com a matriz de dispersão \mathbf{S} . Em a maioria dos métodos existentes em teoria de colisões para calcular a função F_l , primeiro é necessário conhecer a solução regular do sistema tratado, que é obtida através da solução de a equação radial de Schrödinger, para encontrar depois a função F_l . Com a metodologia proposta neste trabalho obtemos uma equação diferencial ordinária lineal de segundo ordem cuja solução nos limites assintóticos coincide com a função F_l . A vantagem deste trabalho é que a partir da solução da equação diferencial, acima mencionado, a função F_l pode ser obtida diretamente, sem ter que encontrar a solução regular do problema. Outra vantagem é que não importa as condições iniciais (real), que são escolhidos para a solução da equação diferencial, sempre se produzem os mesmos elementos da matriz \mathbf{S} . Como um exemplo e testar de a metodologia, a equação diferencial é resolvido numericamente, para a colisão elástica de elétrons com átomos de hidrogênio no estado fundamental a baixas energias ($e^- + H(1s)$), para este sistema é calculado F_l , os elementos da matriz \mathbf{S} e deslocamentos de fase, estes são comparados com aqueles calculados por Klaus Bartschat [1].

Palavras chaves: função de Jost, equação diferencial, matriz de espalhamento, deslocamentos de fase.

Abstract

The function of Jost F_l is the theoretical concept that allows to study in an unified way the bound, virtual, scattered and resonant states that can originate

in the interactions between two quantum systems. In theory of collisions the function of Jost F_l plays a very important role, since it is related in a direct way with the scattering matrix \mathbf{S} . In most of the existent methods in theory of collisions for the calculation of the function F_l first is necessary to know the regular solution of the treated system, which is obtained of the solution of the radial equation of Schrödinger, to be able to find the function F_l later. With the methodology proposed in this work an ordinary lineal differential equation of second order it is obtained whose solution in the asymptotic boundary coincides with the function F_l . The advantage of the present work is that solving the differential equation mentioned before one can obtain in a direct way the function F_l without having to find the regular solution of the problem. Another advantage is that not caring the initial conditions (real) that are chosen for the solution of the differential equation, the same elements of the matrix \mathbf{S} , are always obtained. As an example and test of the methodology, it is solved this differential equation numerically for the elastic scattering of electrons by hydrogen atoms in the ground state to low energy ($e^- + H(1s)$), obtaining for this system the function F_l , the elements of the matrix \mathbf{S} and the phase shifts. The data obtained for the phase shifts are compared with the calculated by Klaus Bartschat [1].

Key words: Jost function, differential equation, scattering matrix, phase shifts.

1 Introducción

La función de Jost $F_l(k)$ es de especial importancia en teoría de colisiones cuánticas; en la bibliografía se encuentran muchos trabajos referidos a la función $F_l(k)$. En 1998 [2] presentaron un método exacto para el cálculo directo de las funciones de Jost y las soluciones de Jost para potenciales no centrales. En 1999 [3] usaron un método de comparación para dispersión por un potencial complejo, en el cual la función $F_l(k)$ es obtenida después de hallar la solución regular del problema. En 1999 [4] propusieron un método para el cálculo directo de la función $F_l(k)$ para un potencial singular repulsivo, en el cual la ecuación de Schrödinger es reemplazada por un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden. En 2006 [5] propusieron un método numérico para el estudio de colisiones inelásticas mediante las soluciones de Jost. En 2006 [6] rederivaron la representación integral para la función de Jost. En 2009 [7] estudiaron las ecuaciones integrales de Volterra para la solución regular y la solución de Jost, también en 2009 [8] desarrollaron un procedimiento

sistemático y exacto para calcular los coeficientes de la expansión en serie de la función $F_l(k)$. En éste trabajo se encuentra una ecuación diferencial de segundo orden cuya solución en el límite asintótico coincide con la función de Jost.

El proceso de dispersión de una partícula de masa m y número de onda k por un potencial $V(r)$, local y esféricamente simétrico, queda completamente descrito cuando se conoce la solución regular $\psi_l(k, r)$ de la ecuación radial de Schrödinger [9],

$$\frac{d^2\psi_l(k, r)}{dr^2} + [k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r)]\psi_l(k, r) = 0, \quad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2}V(r) \quad (1)$$

donde l es el momento angular orbital y $U(r)$ es el potencial reducido. La solución regular de la ecuación (1), para potenciales de corto rango (que decaen más rápido que r^{-3} en el infinito) y menos singulares que r^{-2} en el origen $r = 0$, satisface las siguientes condiciones de frontera [10],

$$\begin{aligned} \psi_l(k, r) &\rightarrow \frac{i}{2}[F_l(k)h_l^-(kr) - F_l(-k)h_l^+(kr)], \quad \text{si } r \rightarrow \infty \\ \psi_l(k, r) &\rightarrow j_l(kr), \quad \text{si } r \rightarrow 0, \end{aligned}$$

en las cuales la cantidad $F_l(k)$ es la función de Jost, y $j_l(kr)$, $h_l^\pm(kr)$ son las funciones de Riccati-Bessel y Riccati-Hankel respectivamente. La función de Jost está relacionada con la matriz de dispersión \mathbf{S} por medio de la siguiente expresión [11],

$$S_l(k) = \frac{F_l(-k)}{F_l(k)}.$$

2 Ecuación diferencial para la función de Jost

Siguiendo a S. A. Sofianos [4], el método para la solución de la ecuación (1), consiste en proponer un ansatz para la solución regular $\psi_l(k, r)$, a saber

$$\psi_l(k, r) = \frac{i}{2}[f_l(k, r)h_l^-(kr) - f_l(-k, r)h_l^+(kr)], \quad (2)$$

donde las dos nuevas funciones $f_l(\pm k, r)$ son las soluciones de Jost y satisfacen la siguiente expresión

$$h_l^-(kr) \frac{df_l(k, r)}{dr} - h_l^+(kr) \frac{df_l(-k, r)}{dr} = 0, \quad (3)$$

y coinciden con la función de Jost para grandes valores de r , esto es,

$$f_l(\pm k, r) \rightarrow F_l(\pm k), \quad \text{si } r \rightarrow \infty.$$

Reemplazando (2) en (1), y usando la condición (3) se llega a la siguiente expresión,

$$h_l^- f_l'(k, r) - h_l^+ f_l'(-k, r) = U(r)[f_l(k, r)h_l^- - f_l(-k, r)h_l^+], \quad (4)$$

donde por simplicidad se han omitido los argumentos de las funciones de Riccati-Hankel y el supraíndice primado indica primera derivada con respecto a r , y además se tuvo en cuenta que las funciones de Hankel son solución de la ecuación (1) cuando $U(r) = 0$. Usando (3) en (4) para eliminar la primera derivada de $f_l(-k, r)$, y derivando nuevamente con respecto a r a la expresión resultante y usando (3) una vez más, se llega a la siguiente ecuación para la función $f_l(k, r)$,

$$f_l''(k, r) - \left[\frac{U'(r)}{U(r)} + 2 \frac{h_l^{+'}(kr)}{h_l^+(kr)} \right] f_l'(k, r) - U(r) f_l(k, r) = 0, \quad (5)$$

en la cual se tuvo en cuenta el siguiente wronskiano para las funciones de Riccati-Hankel

$$W[h_l^+(kr), h_l^-(kr)] = -2ik.$$

La ecuación (5), obtenida por primera vez en éste artículo, es la que utilizaremos para calcular la función de Jost $F_l(k)$. Se puede probar con un proceso similar al utilizado para obtener (5) (eliminando a $f_l(k, r)$ en vez de $f_l(-k, r)$), que la función $f_l(-k, r)$ satisface una expresión similar a (5), solo que en vez del término $h_l^{+'}(kr)/h_l^+(kr)$ aparecería el término $h_l^{-'}(kr)/h_l^-(kr)$. Cabe mencionar que la ecuación para la función $f_l(-k, r)$ solo se debe solucionar para los procesos en los que sea necesario conocer la función $F_l(-k)$, tal es el caso de los procesos de colisiones inelásticas. Mientras que si el interés es estudiar

procesos de colisiones elásticas (en donde $F_l(-k)$ es la compleja conjugada de $F_l(k)$ [10]), estados ligados, virtuales y resonantes, los cuales están relacionados con los ceros de la función $F_l(k)$ en el plano complejo k , basta con resolver (5) para $f_l(k, r)$.

Por otra parte la solución de la ecuación (5) $f_l(k, r)$ converge a $F_l(k)$, cuando r tiende a infinito, para cualquier valor inicial de $f_l(k, 0)$ que sea real, cuando el potencial es regular en el origen, esto es, para cualquier valor inicial que sea real se obtiene el mismo valor $S_l(k)$ del elemento de la matriz de dispersión \mathbf{S} . Con el fin de ilustrar lo anterior en un problema específico resolveremos la ecuación (5) numéricamente, usando para esto el comando NDSolve del software *MATHEMATICA* 5.1. Debido a que el potencial que usaremos presenta singularidades en el origen, impondremos las condiciones iniciales de la ecuación (5) en el punto $r = 10^{-6}$ (que es una buena aproximación de $r = 0$), para asegurar el buen funcionamiento del software.

3 Aplicación al sistema $e^- + H(1s)$

Se sabe que el potencial estático (sin incluir efectos de polarización, ni de intercambio) que modela la interacción en (a.u) es de la forma [12].

$$V(r) = -\left(1 + \frac{1}{r}\right)\exp(-2r). \quad (6)$$

La función $f_1(k, r)$ obtenida para este potencial a una energía de colisión de $10eV$ y condición inicial $f_1(k, 0) = 1$, es mostrada en la figura 1. En esta figura se observa la convergencia de la función $f_l(k, r)$ a la función de Jost cuando r crece, tal como se esperaba.

En la tabla 1, se muestran los datos calculados para $F_0(k)$ y $S_0(k)$, para diferentes valores de la condición inicial $f_0(k, 0)$, momento angular $l = 0$ y a una energía de $10eV$. En esta tabla se observa que no importando la condición inicial (real), para la solución de la ecuación (5), siempre se obtiene el mismo valor para el elemento de la matriz de dispersión $S_0(k)$. Lo mismo ocurre si se calculan los siguientes elementos matriciales. Lo anterior es de gran importancia, ya que la metodología no esta sujeta al valor de las condiciones iniciales siempre y cuando éstas sean reales y el potencial sea regular en el origen.

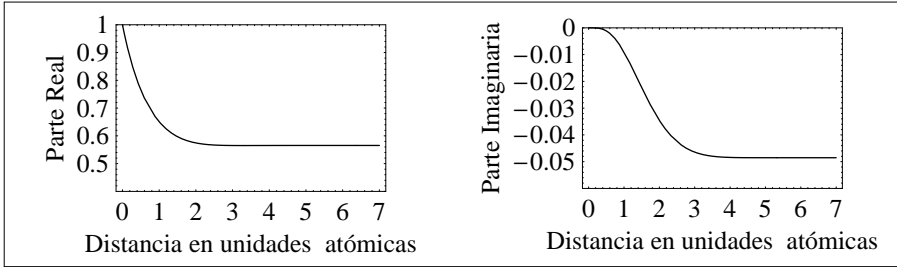


Figura 1: Parte real e imaginaria de la función $f_1(k, r)$, para una energía de $10eV$ y momento angular $l = 1$.

Tabla 1: Función de Jost y elementos de la matriz de dispersión para $l = 0$ y $E = 10eV$

$f_0(k, 0)$	$F_0(k)$	$S_0(k)$
1	$0,202949 - 0,281599i$	$-0,316299 + 0,94866i$
10	$2,02947 - 2,81597i$	$-0,316304 + 0,948658i$
200	$40,5893 - 56,3194i$	$-0,316305 + 0,948658i$
-3	$-0,608836 + 0,844789i$	$-0,316307 + 0,948657i$

Los corrimientos de fase $\delta_l(k)$, que son las cantidades de interés físico, ya que con ellos se calculan teóricamente los observables experimentales (secciones eficaces), están relacionados con los elementos $S_l(k)$ por medio de,

$$S_l(k) = \exp[2i\delta_l(k)],$$

y se relacionan con la función $F_l(k)$ mediante la siguiente expresión [10],

$$F_l(k) = |F_l(k)|\exp[-i\delta_l(k)],$$

es decir, el corrimiento de fase es el negativo de la fase de la función $F_l(k)$.

En la tabla 2, se muestran los corrimientos de fase calculados con el método desarrollado en este artículo y los calculados por Klaus Bartschat [1], para una energía de $10eV$. Los datos de ésta tabla se obtuvieron sumando al potencial estático (6) el potencial de polarización usado por [1], a saber,

$$V_{pol}(r) = -\frac{4,5}{2r^4}(1 - \exp[-(r/2)^6]).$$

En la tabla 2 se observa que los cálculos obtenidos con la metodología propuesta son muy buenos y están acordes con los calculados por [1].

Tabla 2: Corrimientos de fase δ_l para dispersión electrón-hidrogeno a $10eV$

l	$\delta_l(\text{artículo})$	$\delta_l(\text{Klaus})$
0	1,08865	1,0887879
1	0,321697	0,3216620
2	0,100707	0,1006706
3	0,0348903	0,0348725
5	0,00813678	0,0081298
15	0,00034633	0,0003485

4 Conclusiones

Se logro desarrollar un método sencillo que permite calcular la función de Jost para colisiones elásticas por un potencial regular y esféricamente simétrico. El método tiene como ventaja que no es necesario conocer la solución de la ecuación (1) (solución regular) para determinar la función de Jost y que para cualquier valor real que se escoja como condición inicial para la integración de la ecuación (5), los elementos de la matriz de dispersión siempre dan el mismo valor. Los resultados obtenidos con la presente metodología son muy buenos y están acorde con los hallados por otros autores. Por otra parte queda como tema para futuras investigaciones el extender la metodología para el caso en que los potenciales no son regulares en el origen, ya que en estos casos las condiciones iniciales para resolver la ecuación (5) no pueden ser arbitrarias. También queda pendiente verificar si la metodología funciona para el caso de colisiones inelásticas que puedan ser modeladas con potenciales complejos. Por ultimo podemos decir que el método fue aplicado con mucho éxito a la dispersión electrón-hidrogeno.

Referencias

- [1] Klaus Bartschat. *Computational Atomic Physics: Electron and Positron Collisions with Atoms and Ions*, ISBN 978-3540601791. Springer, 1996. Referenciado en 152, 153, 157
- [2] S A Rakityansky and S A Sofianos. *Jost function for coupled partial waves*. J. Phys. A: Math. Gen, ISSN 0305-4470, **31**(22), 5149-5176 (1998). Referenciado en 153

- [3] J Zapata, D Campos and H Estrada. *Comparison Method for Scattering of Complex Centra Potentials*. J. Phys. B: At Mol. Opt. Phys, ISSN 0953-4075, **32**, 161-169 (1999). Referenciado en 153
- [4] S. A. Sofianos, S. A. Rakityansky and S. E. Massen. *Jost function for singular potentials*. Phys. Rev. A, ISSN 1050-2947, **60**, 337-343 (1999). Referenciado en 153, 154
- [5] Luis Alcalá, Héctor R. Maya y Rosbel Jiménez. *Estudio de Dispersión Inelástica Mediante las Soluciones de Jost*. Revista Colombiana de Física, ISSN 0120-2650, **38**(4), 1347-1350 (2006). Referenciado en 153
- [6] U LAHA. *On the integral representations of the Jost function and Coulomb off-shell Jost solution*. Pramana-J. Phys, ISSN 0304-4289, **67**(2), 357-362 (2006). Referenciado en 153
- [7] Valery Kapshai, Ksenia Shilgueva and Nils Elander. *Integral equations for different wave functions and their use in finding resonances*. J. Phys. B: At Mol. Opt. Phys, ISSN 0953-4075, **42**(4), 1-8 (2009). Referenciado en 153
- [8] S. A. Rakityansky and N Elander. *Generalized effective-range expansion*. J. Phys. A: Math. Theor, ISSN 1751-8113, **42**(22), 1-18 (2009). Referenciado en 153
- [9] M. S. Child. *Molecular Collision Theory*, ISBN 0121726509. Academic Press, 1974. Referenciado en 154
- [10] J. R. Taylor. *The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions*, ISBN 0-471-84900-6. Jhon Wiley, 1972. Referenciado en 154, 156, 157
- [11] A. G. Sitenko. *Lectures in scattering theory*, ISBN 0080165745. Pergamon Press, 1971. Referenciado en 154
- [12] B.H.Bransden and C.Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*, ISBN 978-0-582-35692-4. Prentice Hall, 2003. Referenciado en 156