

"ESTUDIO DE EFECTOS ISOTOPICOS A BAJAS ENERGIAS"

N. R. Arista

Centro Atómico Bariloche
Comisión Nacional de Energía Atómica
Instituto de Física "Dr. José A. Balseiro"
Universidad Nacional de Cuyo

Resumen:

Se estudia los efectos de la masa sobre el scattering elástico a muy bajas energías. Para el caso de potenciales homogéneos se obtiene una propiedad de invariancia de los corrimientos de fase, y sencillas relaciones de transformación de escalas para la sección eficaz y la velocidad. Esto permite obtener el rango de velocidades en que existen diferencias isotópicas, encontrándose excelente acuerdo con la aproximación de Landau-Lifshitz-Schiff en la zona asintótica en la cual tales diferencias desaparecen.

Finalmente se calcula efectos isotópicos en $\text{He}^3 - \text{He}^{3,4}$, en un rango de velocidades accesible experimentalmente.

Una propiedad de invariancia de los corrimientos de fase.

La ecuación radial que describe el scattering de una partícula de masa μ e impulso K en un potencial $V(r)$ es⁽¹⁾:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + K^2 \right\} \psi_K(r) = 0 \quad (1.a)$$

siendo $U(r) = 2\mu V(r)$.

La función $\psi_K(r)$ tiene el siguiente límite asintótico:

$$\psi_K(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left(Kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell \right) \quad (1.b)$$

siempre que $V(r)$ sea regular en el infinito (esto es, $r^2 V(r) \rightarrow 0$).

Mediante la sustitución $r = \lambda r'$, la ecuación (1.a) se transforma en:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr'^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r'^2} - U'(r') + K'^2 \right\} \psi_{K'}(r') = 0 \quad (2.a)$$

siendo: $U'(r') = \lambda^2 U(\lambda r')$, $K' = \lambda K$ y $\psi_{K'}(r') = \psi_K(\lambda r')$.

Para $\psi_{K'}(r')$ se obtiene el límite asintótico:

$$\psi_{K'}(r') \underset{r' \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left(K' r' - \frac{2\pi}{2} + \delta_2 \right), \quad (2.b)$$

y observando que (2.a) es formalmente idéntica a (1.a) se puede concluir que el corrimiento de fase δ_2 es invariante frente a un cambio simultáneo de potencial e impulso dado por:

$$\begin{cases} U'(r) = \lambda^2 U(\lambda r) \\ K' = \lambda K \end{cases} \quad (3)$$

Sección eficaz elástica para potenciales homogéneos. Propiedades de escalas.

Los efectos de la masa sobre la sección eficaz elástica pueden ponerse totalmente de manifiesto para el caso sencillo de potenciales del tipo:

$$V(r) = \frac{V_0}{r^n}, \quad n > 2 \quad (4)$$

Nuestro objeto es relacionar la sección eficaz o correspondiente a una partícula de masa m y velocidad v en un potencial de intensidad V_0 , con la sección eficaz σ' correspondiente a otra de masa m' y velocidad v' en un potencial de intensidad V'_0 .

Usaremos para ello la propiedad de invariancia de los corrimientos de fase frente a una transformación del tipo (3); en donde pondremos:

$$\begin{cases} U(r) = 2m \frac{V_0}{r^n} \\ \lambda = \left(\frac{m V_0}{m' V'_0} \right)^{1/(n-2)} \end{cases} \quad (5)$$

(°) Se utiliza el sistema de unidades atómicas:

1 u.a. de masa = m_e

1 u.a. de longitud = $a_0 = \hbar^2/e^2 m_e$

1 u.a. de tiempo = $\hbar^3/e^4 m_e$

en este sistema resulta $\hbar = 1$.

Esto nos permite obtener:

$$U'(r) = 2 m' \frac{V'_0}{r^n} \quad (6)$$

$$\frac{v'}{v} = \lambda \frac{m}{m'}$$

Siendo iguales los corrimientos de fase resulta:

$$\sigma(v) \cdot K^2 = \sigma'(v') K'^2 = 4 \pi \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}$$

luego:

$$\frac{\sigma'(v')}{\sigma(v)} = \frac{1}{\lambda^2} \quad (7)$$

Sustituyendo λ en (6) y (7) resulta:

$$\begin{cases} \frac{v'}{v} = \left(\frac{V_0}{V'_0} \right)^{1/(n-2)} \left(\frac{m}{m'} \right)^{(n-1)/(n-2)} \\ \frac{\sigma'}{\sigma} = \left(\frac{m' V'_0}{m V_0} \right)^{2/(n-2)} \end{cases} \quad (8)$$

Las relaciones (8) dan cuenta de los efectos isotópicos en cuestión; en particular, para $v \rightarrow 0$:

$$\sigma \rightarrow \text{cte} \times (m V_0)^{2/(n-2)} \quad (9)$$

Para un dado valor de n , la familia de curvas $\sigma = \sigma(v)$ puede reducirse a una curva única en términos de las variables reducidas:

$$\begin{cases} v^* = v \cdot m^{(n-1)/(n-2)} V_0^{1/(n-2)} \\ \sigma^* = \frac{\sigma}{(m V_0)^{2/(n-2)}} \end{cases} \quad (10)$$

$\sigma^{(0)}$ representa la sección eficaz correspondiente a un electrón en un potencial $1/r^n$.

En la figura 1 se muestra los resultados de cálculos numéricos de la sección eficaz reducida para $n = 6$ y $n = 12$. Se ha utilizado el método JWKB para $v^0 > 10$, y se ha resuelto numéricamente la ecuación radial (1) para velocidades menores, mediante el método Runge-Kutta, con paso variable.

En el rango de validez de la aproximación semiclásica es sabido que no hay diferencias isotópicas, es decir las secciones eficaces correspondientes a un mismo potencial y diferentes masas dependen solo de la velocidad. Este significa que existirá una velocidad por encima de la cual las curvas de sección eficaz convergen a una única forma, la cual debe ser invariante ante la transformación (8), cuando $V_0 = V'_0$.

Es fácil ver entonces que la única curva que cumple con este requisito tiene la siguiente forma funcional:

$$\sigma = C_n \left(\frac{V_0}{v} \right)^{2/(n-1)} \quad (11)$$

donde C_n es un coeficiente numérico que depende solo de n .

Utilizando diferentes aproximaciones Massey-Mohr⁽¹⁾, Schiff⁽²⁾ y Landau-Lifshitz⁽³⁾, han llegado a resultados que coinciden con (11), pero los valores de C_n obtenidos por Massey y Mohr discrepan de los encontrados por los otros autores.

En la figura 1 se compara los resultados del cálculo numérico con los valores previstos por las aproximaciones de Massey-Mohr ($\sigma_{MM}^{(0)}$) y de Landau-Schiff ($\sigma_{LS}^{(0)}$), obteniéndose un excelente acuerdo con la aproximación LLS.

Las discrepancias con los valores de $\sigma_{LLS}^{(0)}$ se dan, aproximadamente, para $v^0 < 3$ - u.a.; siendo por consiguiente este valor una buena cota superior para la zona de existencia de diferencias isotópicas.

La figura 2 ilustra las diferencias encontradas en $V = 1/r^6$ para masas $m = m_p, 2 m_p, 3 m_p$ ($m_p = 1837$).

Efectos isotópicos en $He^3 - He^3$ y $He^3 - He^4$.

La interacción de dos átomos de He puede ser descripta aproximadamente⁽⁴⁾ mediante un potencial de Lennard-Jones:

$$LJ(12,6) = 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

$$\sigma \approx 4,73 \text{ u.a.}$$

$$\epsilon \approx 3,21 \times 10^{-5} \text{ u.a.}$$

La condición $\nabla^0 < 30 \text{ u.a.}$ aplicada separadamente a cada uno de los dos potenciales homogéneos, da;

$$v \lesssim 10^{-3} \text{ u.a.} \approx 2 \times 10^3 \text{ m/seg.}$$

De modo que, salvo que se dé alguna compensación muy particular, el potencial $LJ(12,6)$ debe dar lugar a diferencias isotópicas, para velocidades inferiores a $2 \times 10^3 \text{ m/seg.}$

Los cálculos han consistido en hallar los corrimientos de fase resolviendo la ecuación radial (1.a) con el siguiente potencial (5,6);

$$MDD - 2 \text{ para } r \leq 2,15 \text{ \AA}$$

$$LJ(m_1, 6) \text{ para } 2,15 \text{ \AA} \leq r \leq r_0$$

$$LJ(m_1, 6) \text{ para } r_0 \leq r \leq 6,3 \text{ \AA}$$

$$- (C_6/r^6 + C_8/r^8) \text{ para } r \geq 6,3 \text{ \AA}$$

$$\text{con } \epsilon = 0,888 \text{ meV, } r_0 = 2,685 \text{ \AA, } m_1 = 8,8, m_2 = 14,5$$

Las curvas a y b de la figura 3 muestran los resultados obtenidos para la sección eficaz elástica de $\text{He}^3 - \text{He}^4$ y $\text{He}^3 - \text{He}^3$, respectivamente; hallándose en el segundo caso fuertes oscilaciones debidas a la identidad nuclear, que ocultan la diferencia isotópica en cuestión. La curva c corresponde a la colisión $\text{He}^3 - \text{He}^3$, pero con espines nucleares polarizados en forma tal que permitan discriminar el proyectil del blanco (proyectil He^3 , blanco He^3 , por ejemplo). Las diferencias isotópicas entre las curvas a y c llegan a ser hasta del 80% en la zona de menores velocidades.

Recientemente Bennowitz et al. (7) han medido secciones eficaces de $\text{He}^{3,4}$ para velocidades entre 100 y 1000 m/seg., hallándose resultados que coinciden con las curvas a y b del presente cálculo. Estos autores no han utilizado haces polarizados, por lo cual no existe por ahora verificación experimental para la curva c. Han encontrado en cambio una diferencia isotópica mucho menor, que se debe muy probablemente a efectos de polarización de masa, es decir acoplamiento entre movimiento electrónico y nuclear.

Los cálculos se han realizado en la computadora IBM 360/44 del Centro Atómico Bariloche.

AGRADECIMIENTO: El autor desea agradecer la valiosa colaboración prestada por el Lic. V. H. Ponce.

REFERENCIAS

- 1 - H.S. Massey y C.B. Mohr, Proc. Roy Soc. (London) A144, 188 (1943).
 - 2 - L.I. Schiff, Phys. Rev. 103, 443 (1956).
 - 3 - L.D. Landau y E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics (Pergamon Press, Ltd. London, 1959), p.416.
 - 4 - J. Hirschfelder, C. Curtis y R. Bird, Molecular Theory of Gases and Liquids, John Wiley & Sons, Inc., New York, p. 1069.
 - 5 - L.W. Bruch y L.J. Mc Gee, J. Chem. Phys. 52, 5884 (1970).
 - 6 - M.D. Davison, Proc. Phys. Soc., London 87, 133 (1966).
 - 7 - H. Bennewitz, H. Busse, H. Dohmann, D. Oates y W. Schrader, Z. Phys. 253, 435 (1972).
- H. Bennewitz, H. Busse, H. Dohmann, D. Oates y W. Scharader, Phys. Rev. Lett. 29, 533 (1972).

