

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 2	AÑO 1974

"ESTUDIO DE EFECTOS ISOTOPICOS A BAJAS ENERGIAS"

N. R. Arista

01.74.04

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 $^3\text{He} - ^3\text{He}^4$, 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:

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

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:

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

Producido el golpe militar chileno, el Dr. J. Leite Lopes en -
vió al Presidente de la Conferencia Pugwash la carta que a conti-
nuación se transcribe.

September 27, 1973

Professor Hannes ALFVEN
Pugwash Conferences
9, Great Russell Mansions
60, Great Russell Street
LONDON WC1B 3BE-ENGLAND

Dear Professor Alfven,

In view of the reign of terror which is being installed in CHILE by the Military Junta-as in Brazil several years ago and, recently, in Uruguay-with the indiscriminate imprisonment of thousands of persons, workers, students, intellectuals and political leaders, expatriates from Brazil, Bolivia and Uruguay, and, as reported in the press, the summary execution of many of them, the burning of books as in Hitler's times, I am asking you that you ceaselessly employ your high personal prestige and that of Pugwash in favour of those who are thus per -
secuted in Chile.

We would all be grateful to you and to Pugwash if you could main-
tain contact with the United Nations authorities, the Catholic Church in the Vatican, the International Red Cross as well as the government of the Big Powers so that a joint pressure be exercised to the Chilean Military Junta to stop the massacre.

This is a dark moment in the history of civilization. It is true that when such events happen in Latin America, the advanced nations do not, as a rule, get too much emotion. While the U.S. National Academy of Sciences protested because of alleged harassment to Soviet physicist A. SAKHAROV, this same Academy has established cooperation agreements with countries where there is an iron dictatorship, like Brazil, where the elementary human rights are not respected, and, as far as we know from the international press, it has remained silent in the face of the Chilean fascist coup d'Etat.

Liberty however, is indivisible. And the human rights must be respected in small as in big countries, in near as in far away coun-
tries, if the respect of the human values is to have a sense.

A small, but highly civilized nation, has been violated and gravely
blest by military who feel themselves too powerful and well pro -
tected and inspired to commit such crimes.

Please, we ask you, and we are sure you will do it, try to use the
prestige of Pugwash and your own scientific and moral reputation in
favour of those who are imprisoned, tortured and harassed in Chile.

With my thanks for your attention to this letter. I am

Very sincerely yours

J. LEITE LOPES
Pugwash Member

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:

$$\psi_{K'}(r') \sim_{r' \rightarrow \infty} \sin \left(K' r' - \frac{\frac{1}{2} \pi}{2} + \delta_{\frac{1}{2}} \right), \quad (2.b)$$

y observando que (2.a) es formalmente idéntica a (1.a) se puede concluir que el corrimiento de fase $\delta_{\frac{1}{2}}$ 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:

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

(°) Se utiliza el sistema de unidades atómicas:

$$1 \text{ u.a. de masa} = m_e$$

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

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

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:

$$\begin{cases} v^* = v \cdot m^{(n-1)/(n-2)} v_0^{1/(n-2)} \\ \sigma^* = \frac{\sigma}{(m v_0)^{2/(n-2)}} \end{cases} \quad (10)$$

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 $v^* > 10$, 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. Esto 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 (σ_{MM}^*) y de Landau-Schiff (σ_{LS}^*), obteniéndose un excelente acuerdo con la aproximación ILS.

Las discrepancias con los valores de σ_{LS}^* se dan, aproximadamente, para $v^* < 3\theta$ 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 $He^3 - He^4$.

(4) La interacción de dos átomos de He puede ser descripta aproximadamente 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 $v^* < 30 \text{ u.a.}$ 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);

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

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

$$LJ(m_2, 6) \text{ para } r_0 \leq r \leq 6,3 \text{ \AA}$$

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

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

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.

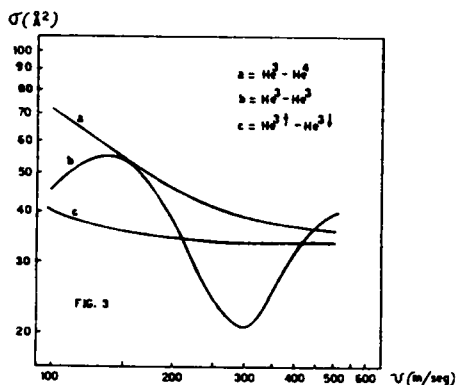
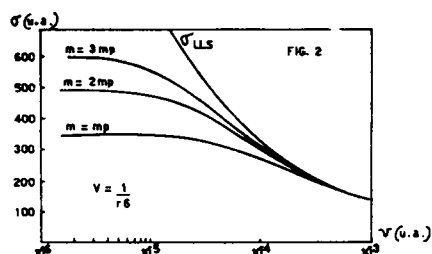
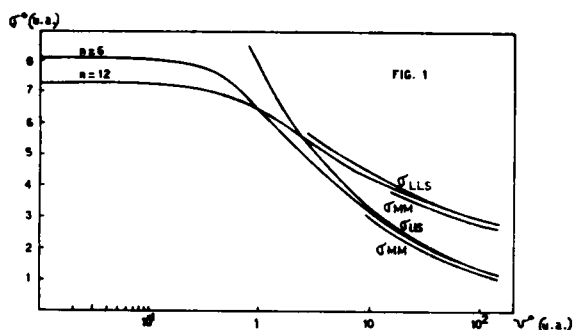
Recientemente Bennowitz et al. (7) han medido secciones eficaces de $\text{He}^3, 4$ para velocidades entre 100 y 1000 m/seg., hallándose resultados que coinciden con las curvas a y b del presente cálculo. Estos autores no han utilizado haces polarizados, por lo cual no existe por ahora verificación 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 I.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).



"ENTALPIAS DE VAPORIZACION DE MAGNESIO Y PLOMO"

Raúl A. Baragiola

Centro Atómico Bariloche

Comisión Nacional de Energía Atómica

Instituto de Física "Dr. José A. Balseiro"

Universidad Nacional de Cuyo

RESUMEN

Se han determinado las entalpías de vaporización de Mg y de Pb mediante un nuevo método que se basa en la relación lineal entre el flujo de partículas dispersadas y la densidad de blancos, en procesos de colisiones. A partir de mediciones efectuadas en nuestro laboratorio para la obtención de secciones eficaces de cambio de carga se han deducido los valores:

$$\Delta H_{v,0}(\text{Mg}) = (34,0 \pm 0,2) \text{ Kcal/mol}$$

$$\Delta H_{v,0}(\text{Pb}) = (47,1 \pm 0,4) \text{ Kcal/mol}$$

siendo el rango de temperatura de las mediciones, entre 540°K y 620°K para Mg y entre 790°K y 890°K para Pb. Este método permite determinaciones de las constantes de vaporización a temperaturas menores y con igual o mejor precisión, que otros métodos usados hasta el presente.

.....

Las entalpías de evaporación o sublimación son determinadas comúnmente a partir de la ecuación de Clausius-Clapeyron

$$(dP/dT) = \Delta H / T \Delta V \quad (1)$$

y de mediciones de presión de vapor en función de la temperatura.

En el presente trabajo se obtienen las presiones de vapor en forma relativa usando técnicas de colisiones atómicas. Un haz de partículas (En este caso H^+ , H , He^+ o He de energías entre 5 y 45 keV) pasa a través de una celda de Knudsen que contiene el vapor metálico. Como resultado de colisiones, se obtiene un haz de partículas producto de intensidad I_p , que para espesores de blanco pequeños, es proporcional a $I_i P / T$ donde I_i es la intensidad del haz incidente, P la presión del vapor y T su temperatura absoluta.

A partir de mediciones efectuadas en este laboratorio⁽¹⁾ de las fracciones $F_{ip} = I_p / I_i$ en función de la temperatura del vapor y poniendo