

Cálculo de las integrales radiales en dispersión de electrones

C.W. Soto Vargas
Universidad de Costa Rica
Escuela de Física, San José, Costa Rica
(recibido 17 junio 1996, aceptado setiembre 1996)

Abstract: The radial integrals which arise from the distorted wave treatment of photon emission processes in electron and positron scattering, involve products of the electron's (or positron's) ingoing and outgoing wave functions and the radial part of the electromagnetic Green's function. They can be performed analytically for point Dirac-Coulomb wave functions, but are difficult to evaluate because they involve slowly converging doubly infinite series. We present a discussion and review of the formulation and methods employed to calculate these basic integral at a given value of the energy transfer.

Subject headings: Dirac's equation, electron scattering, radial integrals, distorted wave functions

Resumen: Las integrales radiales que surgen del tratamiento por medio de ondas distorsionadas de los procesos que emiten fotones en la dispersión de electrones y positrones, involucran productos de las funciones de onda incidentes y salientes del electrón (o positrón) y la parte radial de la función de Green electromagnética. Las integrales pueden calcularse analíticamente para funciones de onda puntuales de Dirac-Coulomb, pero son difíciles de evaluar porque involucran series infinitas dobles de lenta convergencia. Se presenta y discute una revisión de la formulación y método empleado para calcular estas integrales básicas en un valor dado de la energía transferida.

Encabezados de materia: ecuación de Dirac, dispersión de electrones, integrales radiales, funciones de onda distorsionadas

1. Introducción

Han habido varios cálculos en los últimos años en que las integrales radiales exactas sobre productos de funciones de Dirac-Coulomb han sido obtenidos. Los cálculos tempranos (Reynolds, Onley, y Biedenharn 1964) son un tanto restrictivos, i.e., cero pérdida de energía; otros (Rozics y Johnson 1964) expresaron sus resultados en términos de funciones hipergeométricas de Lauricella y obtuvieron continuaciones analíticas para electrones de baja energía. Se revisará aquí un cálculo relativamente reciente que usa una técnica matricial que permite derivar y desarrollar un método relativamente sencillo de propagación en energía de las integrales radiales (Wright, Onley y Soto Vargas 1977).

Antes que nuevas continuaciones analíticas para funciones hipergeométricas generalizadas fueran introducidas, (Gargaro y Onley 1971, Sud 1976), las integrales radiales requeridas para el análisis de la dispersión inelástica de electrones de niveles discretos habían sido evaluadas usando técnicas de integración numérica (Tuan, Wright y Onley 1968). Este cálculo particular fue tomado como el código standard para computadora usado en casi todos los centros experimentales de dispersión de electrones. Sin embargo, la precisión y exactitud de los experimentos en dispersión de electrones mejoró a tal punto que pocos años la integración numérica dejó de ser suficientemente precisa, particularmente en el cálculo de la cola de radiación. Esta situación condujo a nuevos métodos analíticos para obtener las integrales radiales requeridas (Sud 1976; y Sud, Wright y Onley 1976).

2. Método matricial

Se empieza con las definiciones introducidas por Onley (Onley 1972), que conducen a la función gamma matricial. Se considera la siguiente ecuación definitoria

$$S(A, B; R)W(A, B; R) = \int_R^{\infty} W(A, B; r)dr \quad (1)$$

donde $W(A, B; r)$ satisface la ecuación diferencial matricial de primer orden

$$\frac{dW}{dr} = \left(\frac{A}{r} - B \right) W. \quad (2)$$

Aquí se considera solamente integrales que son convergentes en el límite superior. El operador matricial S satisface la ecuación inhomogénea (Onley 1972; Sud, Wright y Onley 1976):

$$\frac{dS}{dr} + S \left(\frac{A}{r} - B \right) = -I \quad (3)$$

Una solución general a esta ecuación diferencial tiene la forma

$$S(A, B; r) = \Gamma W(A, B; r)^{-1} + P(A, B; r) \quad (4)$$

donde W^{-1} es la solución homogénea y P es la solución particular que tiene la siguiente expansión en series:

$$P(A, B; r) = -(A + 1)^{-1}r - (A + 1)^{-1}B(A + 2)^{-1}r^2 - \dots$$

donde $A + n$ significa $A + nI$ y es asumida que es no-singular. De las ecuaciones (1) y (4), la matriz constante Γ es dada por

$$\Gamma = \int_R^\infty W(A, B; r)dr - P(A, B; R)W(A, B; R). \quad (5)$$

Para obtener las integrales radiales puntuales se deja $R \rightarrow 0$. Para las soluciones regulares no hay problema haciendo $R \rightarrow 0$; mientras que para las soluciones irregulares se usa la definición restada análoga a la función gamma convencional con argumentos negativos (Whittaker y Watson 1927). Así

$$\Gamma(A + 1, B) = \int_0^\infty W(A, B; r)dr. \quad (6)$$

Propiedades tal como $A\Gamma(A, B) = B\Gamma(A + 1, B)$, (Onley 1972), justifican tratar esta recién definida función como una generalización de la función gamma convencional. Más similitudes surgirán en el transcurso de este artículo.

Pronto se establecerá que las integrales radiales objeto de nuestro cálculo son todas expresadas como elementos de la función gamma matricial, y por lo tanto el cálculo de esta función para las variables particulares de la dispersión de leptones es equivalente al cálculo de las integrales radiales. Así, la investigación de criterios de convergencia, continuaciones analíticas y otros aspectos de los elementos individuales de la función gamma matricial, serán presentados para el caso de dispersión en un campo de Dirac-Coulomb.

Las funciones de onda radiales del electrón, (Soto Vargas 1998), obedecen ecuaciones diferenciales matriciales de primer orden de la forma (2), así:

$$\frac{dU^S(r)}{dr} = \left(\frac{A^S}{r} - B^S \right) U^S(r) \quad (7)$$

donde

$$A^S = \begin{pmatrix} -\kappa & \alpha_{f.s.}Z \\ -\alpha_{f.s.}Z & \kappa \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad B^S = \begin{pmatrix} 0 & -(E + m) \\ (E + m) & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

son matrices constantes 2×2 . La matriz $U^S(r)$ es escrita en términos de las funciones de onda radiales por la ecuación (Soto Vargas 1998):

$$U^S(r) = \begin{pmatrix} rg_\kappa^R & rg_\kappa^I \\ rf_\kappa^R & rf_\kappa^I \end{pmatrix}. \quad (9)$$

La nomenclatura $R(I)$ designa la funciones de onda puntuales de Coulomb regulares (irregulares)denota la representación estandard.

Existen varias otras representaciones, entre ellas la representación A-diagonal y B-diagonal (Onley 1972, Sud 1976). La representación A-diagonal se obtiene por una transformación de similaridad con la matriz C dada por:

$$C = \frac{\gamma - i\eta}{2\gamma(\gamma + i\eta)} \times \begin{pmatrix} \frac{-i}{\sqrt{E+m}} \left(1 - \frac{\kappa - i\beta}{\gamma + i\eta}\right) & \frac{-1}{\sqrt{E-m}} \left(1 + \frac{\kappa - i\beta}{\gamma + i\eta}\right) \\ \frac{i}{\sqrt{E+m}} \left(1 + \frac{\kappa - i\beta}{\gamma - i\eta}\right) & \frac{1}{\sqrt{E-m}} \left(1 - \frac{\kappa - i\beta}{\gamma - i\eta}\right) \end{pmatrix}; \quad (10)$$

entonces

$$U^A(r) = CU^S(r) = \begin{pmatrix} M_{-i\eta, \gamma - \frac{1}{2}}(2ipr) & \frac{\gamma - i\eta}{2\gamma(2\gamma - 1)} M_{-i\eta, -\gamma + \frac{1}{2}}(2ipr) \\ \frac{-(\gamma + i\eta)}{2\gamma(2\gamma + 1)} M_{-i\eta, \gamma + \frac{1}{2}}(2ipr) & M_{-i\eta, -\gamma - \frac{1}{2}}(2ipr) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} N(\gamma) & 0 \\ 0 & N(-\gamma) \end{pmatrix} \quad (11)$$

donde

$$N(\gamma) = \frac{-e^{i\eta\kappa}(\gamma) i^{1-\gamma} e^{\frac{\pi}{2}\eta} (\gamma - i\eta) |\Gamma(\gamma + i\eta)|}{p\sqrt{E+m}(\gamma + i\eta)\Gamma(2\gamma + 1)}. \quad (12)$$

Las soluciones en series de potencias dadas en la ecuación (11) pueden ser transformadas a soluciones asintóticas introduciendo la relación entre $M_{\kappa, \mu}$ y la función de Whittaker de segunda clase $W_{\kappa, \mu}$ (Slater 1960, Sud 1976); en este caso no serán necesarias. También,

$$A^A = CA^SC^{-1} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 \\ 0 & -\gamma \end{pmatrix}$$

y

$$B^A = CB^SC^{-1} = \frac{ip}{\gamma} \begin{pmatrix} -i\eta & \gamma - i\eta \\ \gamma + i\eta & i\eta \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Análogamente, una representación B-diagonal se obtiene por medio de la matriz de transformación

$$D = \frac{-1}{(\gamma + i\eta)^2} \begin{pmatrix} \frac{i(\gamma - i\eta)}{\sqrt{E+m}} & \frac{\gamma - i\eta}{\sqrt{E-m}} \\ \frac{-i(\kappa - i\beta)}{\sqrt{E+m}} & \frac{\kappa - i\beta}{\sqrt{E-m}} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Ya que la representación B-diagonal será la más usada en este trabajo, es conveniente prescindir del superíndice, esto es $U^B \equiv U$, y $A^B \equiv A$, etc. Entonces,

$$U = DU^S$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2ipr}} \begin{pmatrix} M_{-\frac{1}{2}-i\eta,\gamma}(2ipr) & -\frac{\gamma-i\eta}{\gamma+i\eta} M_{-\frac{1}{2}-i\eta,-\gamma}(2ipr) \\ M_{\frac{1}{2}-i\eta,\gamma}(2ipr) & M_{\frac{1}{2}-i\eta,-\gamma}(2ipr) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} N(\gamma) & 0 \\ 0 & N(-\gamma) \end{pmatrix} \quad (15)$$

y

$$A = \begin{pmatrix} i\eta & \gamma - i\eta \\ \gamma + i\eta & -i\eta \end{pmatrix}, \quad B = p \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Tal como ha sido costumbre, los subíndices 1 y 2 representan los aspectos incidentes y salientes del problema de dispersión, respectivamente. Se debe entender que las expresiones anteriores pueden representar tanto ecuaciones incidentes como salientes simplemente marcando las variables y las funciones con los subíndices 1 o 2. Se introduce ahora el producto directo de soluciones (Onley 1972)

$$W(A, B; r) = U_2(r) \otimes U_1(r) \quad (17)$$

el cual también obedece una ecuación de la forma (2) pero con matrices 4×4

$$\begin{aligned} A &= A_2 \otimes I + I \otimes A_1 \\ B &= B_2 \otimes I + I \otimes B_1. \end{aligned} \quad (18)$$

Las integrales, luego identificadas como los elementos de la función gamma matricial, son entonces

$$RI = \int_0^{\infty} U_2^* \otimes U_1 \left\{ \begin{matrix} h_L^1(\omega r) \\ j_L(\omega r) \end{matrix} \right\} dr \quad (19)$$

donde h_L^1 y j_L son las funciones esféricas de Hankel y Bessel que surgen de la parte radial de función de Green electromagnética; corresponden, respectivamente, a la emisión de fotones virtuales o reales con carácter multipolar L .

La función esférica de Hankel tiene una expansión en series finita dada por:

$$h_L^1(\omega r) = e^{i\omega r} \sum_{n=1}^{L+1} a_n(L) r^{-n}. \quad (20)$$

La razón de considerar solamente la función esférica de Hankel viene del hecho de que en la representación estandar las funciones de onda de Dirac-Coulomb son reales y por lo tanto, ya que $j_L = \Re(h_L^1)$, es posible obtener la integral con la función de Bessel de la integral con la función Hankel sencillamente tomándole su parte real.

En la ecuación (20) los coeficientes $a_n(L)$ están dados por

$$a_n(L) = \frac{2\Gamma(L+n)i^{n-L+2}}{\Gamma(n)\Gamma(2+L-n)(2\omega)^n}. \quad (21)$$

Si se sustituye la expansión (20) en la ecuación (19) y se hace uso de la propiedad (Onley 1972)

$$x^a e^{bx} W(A, B; x) = W(A+a, B+b; x),$$

entonces la ecuación (19) se reduce a (Sud 1976)

$$RI = X\Gamma(A, B - i\omega) \quad (22)$$

donde

$$X = a_1(L)I + \sum_{n=2}^{L+1} a_n(L) \prod_{m=1}^{n-1} \{(A-m)^{-1}B\}. \quad (23)$$

Las ecuaciones (22) y (23) tienen una especial importancia ya que muestran que una vez que la función gamma matricial básica $\Gamma(A, B - i\omega)$ es calculada, entonces se pueden obtener integrales sobre productos de funciones de Dirac-Coulomb por una función de Hankel de orden L arbitrario por medio de una sola operación. Esta técnica de recurrencia se encuentra que es accesible al cálculo numérico (Sud, Wright y Onley 1976).

El resto del problema es entonces el cálculo de $\Gamma(A, B - i\omega)$. Se ha desarrollado un método que logra obtener la integral cuando ésta es puesta en la representación B-diagonal (ver cita inmediatamente anterior). La representación A-diagonal conduce a series matriciales no-convergentes con continuaciones analíticas desconocidas. Considérese entonces

$$\Gamma(A, B - i\omega) = \int_0^{\infty} U_2^* \otimes U_1 \frac{e^{i\omega r}}{r} dr \quad (24)$$

de la que un elemento típico es

$$I = \int_0^{\infty} r^{\alpha-1} e^{-\Delta r} {}_1F_1(a_2, b_2, k_2 r) {}_1F_1(a_1, b_1, k_1 r) dr, \quad (25)$$

y donde $\Delta = i(p_1 - p_2 - \omega)$, $k_1 = 2ip_1$ y $k_2 = -2ip_2$. Los parámetros restantes dependen del elemento de la matriz gamma que se esté considerando, excepto α que es constante para cada columna. Sin embargo, se dan aquí los parámetros de la primera columna, y que son los que surgen en las integrales radiales de núcleos puntuales.

$$a_1 = \gamma_1 + i\eta_1 \quad b_1 = 2\gamma_1 + 1$$

$$a_2 = \gamma_2 - i\eta_2 \quad b_2 = 2\gamma_2 + 1$$

y $\alpha = \gamma_1 + \gamma_2 - n + 1$; donde n es la misma que en la ecuación (20).

La integral de la forma (25) puede ser fácilmente integrada término a término de la manera siguiente:

$$I = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-(\Delta + \epsilon)r} r^{\alpha - 1} \sum_{l,m} \frac{(a_1)_l (k_1 r)^l}{(b_1)_l l!} \frac{(a_2)_m (k_2 r)^m}{(b_2)_m m!} dr$$

donde ϵ tiene una pequeña parte real para asegurar convergencia, y la serie de potencias explícita para las funciones hipergeométricas confluentes ha sido usada. Entonces, permitiendo que $t = (\Delta + \epsilon)r$,

$$I = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{l,m} \frac{(a_1)_l (a_2)_m}{(b_1)_l (b_2)_m} \frac{k_1^l k_2^m}{l! m! (\Delta + \epsilon)^{\alpha + l + m}} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{\alpha + l + m - 1} dt$$

y por lo tanto

$$I = \frac{\Gamma(\alpha)}{\Delta^\alpha} \sum \frac{(\alpha)_{m+l} (a_2)_m (a_1)_l}{(b_2)_m (b_1)_l l! m!} \left(\frac{k_2}{\Delta}\right)^m \left(\frac{k_1}{\Delta}\right)^l$$

o

$$I = \frac{\Gamma(\alpha)}{\Delta^\alpha} F_2(\alpha, a_2, a_1, b_2, b_1; x, y). \tag{26}$$

En la ecuación (26), $x = k_2/\Delta$, $y = k_1/\Delta$ y la función hipergeométrica de Appell es dada por (Appell y de Fériet 1926; Erdélyi, Magnus, Oberhettinger y Tricomi 1953)

$$F_2(\alpha, \beta, \beta', \gamma, \gamma'; x, y) = \sum_{m,n} \frac{(\alpha)_{m+n} (\beta)_m (\beta')_n}{(\gamma)_m (\gamma')_n m! n!} x^m y^n \tag{27}$$

que es absolutamente convergente para $|x| + |y| < 1$. Esta región de convergencia es de poco interés físico ya que las variables físicas están fuera de la condición $|x| + |y| < 1$. Afortunadamente, existe una continuación analítica (Gargaro y Onley 1971) que permite evaluar la función de Appell F_2 para funciones de onda de Coulomb (puntuales), i.e., la primera columna de la función gamma matricial Γ . Las integrales que involucran funciones de onda irregulares pueden también se evaluadas con esta misma continuación analítica; estas integrales corresponden a la segunda, tercera y cuarta columnas de Γ . La continuación analítica es la siguiente:

$$F_2(\alpha, \beta, \beta', \gamma, \gamma'; x, y) = Q_1 + Q_2 + Q_3 \tag{28}$$

en donde las Q 's son series dobles dadas por

$$Q_1 = \frac{\Gamma(\gamma') \Gamma(\beta' - \alpha)}{\Gamma(\beta') \Gamma(\gamma' - \alpha)} (-y)^{-\alpha} \times \sum_{m,n} \frac{(\alpha)_m (1 - \gamma' + \alpha)_m (\alpha + m)_n (\beta)_n}{(1 - \beta' + \alpha)_m (1 - \beta' + \alpha + m)_n (\gamma)_n m! n!}$$

$$\times (1 - \gamma' + \alpha + m)_n \left(\frac{1}{y}\right)^m \left(-\frac{x}{y}\right)^n$$

$$Q_2 = \frac{\Gamma(\gamma') \Gamma(\alpha - \beta') \Gamma(\gamma) \Gamma(\beta - \alpha + \beta')}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma' - \beta') \Gamma(\beta) \Gamma(\gamma - \alpha + \beta')} \left(\frac{x}{y}\right)^{\beta'} (-x)^{-\alpha}$$

$$\times \sum_{m,n} \frac{(\beta')_n (1 - \gamma' + \beta')_n (\alpha - \beta')_m (\alpha + 1 - \gamma + \beta')_m (\beta - \alpha + \beta' - m)_n}{(1 - \alpha + \beta' - m)_n (\gamma + \beta' - \alpha - m)_n (1 + \alpha - \beta - \beta')_m m! n!}$$

$$\times \left(\frac{1}{x}\right)^m \left(-\frac{x}{y}\right)^n$$

$$Q_3 = \frac{\Gamma(\gamma') \Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha - \beta' - \beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma' - \beta') \Gamma(\gamma - \beta)} (-y)^{-\beta'} (-x)^{-\beta}$$

$$\times F_3 \left(\beta, \beta', 1 - \gamma + \beta, 1 - \gamma' + \beta', 1 + \beta + \beta' - \alpha; \frac{1}{x}, \frac{1}{y} \right).$$

En Q_3 , F_3 es una función hipergeométrica de Appell y es absolutamente convergente para $\left|\frac{1}{x}\right| < 1$ y $\left|\frac{1}{y}\right| < 1$. En las series Q_1 y Q_2 la condición de convergencia absoluta es $\left|\frac{1}{y}\right| + \left|\frac{x}{y}\right| < 1$. Los valores físicos de x y y definidos para el problema de dispersión de electrones por la ecuación (26), satisfacen todas estas condiciones.

Existe una continuación analítica adicional (Sud 1976), pero la ecuación (28) es adecuada al cálculo propuesto.

3. Conclusión

Resumiendo, la integral básica dada por la función gamma $\Gamma(A, B - i\omega)$ puede ser evaluada y es posible entonces formar los elementos de matriz necesarios en el espectro de fotones reales y virtuales en los procesos de dispersión de electrones por un núcleo atómico. Se han desarrollado técnicas posteriores para propagar estas integrales sobre su rango de energía transferida sin tener que volverlas a calcular para cada energía requerida (Soto Vargas, Onley y Wright 1977; Wright y Soto Vargas 1980), lo que ha dado oportunidad a cálculos de procesos físicos importantes posteriores (Talwar, Wright, Onley y Soto Vargas 1987; Sud y Soto Vargas 1991 y Sud y Soto Vargas 1994).

4. Referencias

- [1] Appell, P. y Kampé de Fériet, J., *Fonctions Hypergéométriques et Hypersphériques*, Gauthier-Villars, Paris, 1926.
- [2] Erdélyi, A., Magnus, W., Oberhettinger, F. y Tricomi, F.C., *Higher Transcendental Functions*, Vol. 1, McGraw-Hill, New York, 1953.
- [3] Gargaro, W.W. y Onley, D.S., *Phys. Rev. C*4, 1032 (1971).
- [4] Onley, D.S., *Nuclear Structure Studies Using Electron Scattering and Photoreaction*, Tohoku Univ., Sendai, Japan, 1972.
- [5] Reynolds, J.T., Onley, D.S. y Biedenharn, L.C., *J. Math. Phys.* 5, 411 (1964).
- [6] Rozics, J.D. y Johnson, W.R., *Phys. Rev. B*135, 56 (1964).
- [7] Slater, L.J., *Confluent Hypergeometric Functions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1960.
- [8] Soto Vargas, C.W., Onley, D.S. y Wright, L.E., *Nucl. Phys. A*288, 45, (1977).
- [9] Soto Vargas, C.W., *Cien. Tec. Aceptado para publicación* (1998).
- [10] Sud, K., Ph.D. dissertation, Ohio Univ., 1976.
- [11] Sud, K. y Soto Vargas, C.W., *Phys. Rev. A*43, 5124 (1991).
- [12] Sud, K. y Soto Vargas, C.W., *Phys. Rev. A*49, 4624 (1994).
- [13] Sud, K., Wright, L.E. y Onley, D.S., *J. Math. Phys.* 17, 2175 (1976).
- [14] Talwar, I., Wright, L.E., Onley, D.S. y Soto Vargas, C.W., *Phys. Rev. C*35, 510 (1987).
- [15] Tuan, S.T., Wright, L.E. y Onley, D.S., *Nucl. Inst. Meth.* 60, 70 (1968).
- [16] Whittaker, E.T. y Watson, G.N., *A Course of Modern Analysis*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1927.
- [17] Wright, L.E., Onley, D.S. y Soto Vargas, C.W., *J. Phys. A: Math. Gen.* 10, L53 (1977).
- [18] Wright, L.E. y Soto Vargas, C.W., *Comp. Phys. Comm.* 20, 337 (1980).