

UCH - FC  
MAG - F  
R618  
0.1

SOBRE EL USO DE APROXIMACIONES SEMICLASICAS AL  
SCATTERING ELASTICO DE ATOMOS SOBRE SUPERFICIES  
CRISTALINAS.

Tesis

Entregada a la

Universidad de Chile

en cumplimiento parcial de los requisitos

para optar al grado de

Magister en Ciencias Físicas

Facultad de Ciencias

Básicas y Farmacéuticas

por

Miguel Rivas Avila

Marzo - 1983

Patrocinante: Dr. Herbert Massmann Leser.

Facultad de Ciencias  
Básicas y Farmacéuticas  
Universidad de Chile

I N F O R M E   D E   A P R O B A C I O N  
T E S I S   D E   M A G I S T E R

Se informa a la Comisión de Postgrado de la Facultad de Ciencias Básicas y Farmacéuticas que la tesis de Magister presentada por el candidato

Miguel Rivas Avila

ha sido aprobada por la Comisión Informante de Tesis como requisito de tesis para el grado de Magister en Ciencias Físicas, en el examen de Defensa de Tesis rendido el día

Patrocinante de Tesis

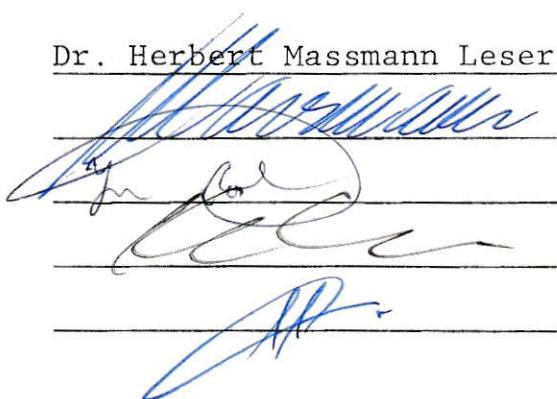
Dr. Herbert Massmann Leser

Comisión Informante de Tesis

Sr. Jaime Roessler B.

Sr. Luis Moraga J.

Dr. Arturo Menchaca R.

The image shows three handwritten signatures in blue ink, each written over a horizontal line. The top signature is the most complex and dense. The middle signature is more fluid and cursive. The bottom signature is the simplest and most stylized.

# I N D I C E      D E      M A T E R I A S

Capítulo I      Introducción

Capítulo II     La aproximación semiclásica

1. La ecuación de Schrödinger
2. La aproximación WKB
3. La función de onda emergente
4. La amplitud de Scattering
5. Aproximación de fase estacionaria
6. Aproximación uniforme de Airy
7. Representación integral de  $f_{\mu}$
8. Las ecuaciones clásicas de movimiento

Capítulo III    Resultados de los estudios numéricos

1. Las trayectorias clásicas
2. Las fases
3. Las probabilidades  $P_{\mu}$
4. Transiciones a canales clásicamente inaccesibles
5. Resonancias
6. Resultados en función de  $E_i$
7. Resultados en función de la Rugosidad
8. La representación integral
9. Tiempo de computación

Capítulo IV Conclusiones

Apéndice A Descripción del programa computacional  
usado para calcular las distintas  
aproximaciones semiclásicas

Apéndice B Listado del programa computacional.

## AGRADECIMIENTOS

Deseo expresar mi sincera gratitud al Dr. Herbert Massmann L., quien dirigió esta tesis. Su determinación y esfuerzo en todas las etapas de este trabajo fueron esenciales para finalizarlo.

A mis amigos: David, Julio y Rosa María por su fé y confianza.

Mis agradecimientos a la Srta. Victoria, quien escribió a maquina los manuscritos de esta tesis.

En particular, deseo agradecer a mi esposa Elisa y a mi hijo Miguel Rafael, quienes fueron una fuente de aliento y motivación permanente durante el desarrollo de este trabajo.

A ellos y a mis padres dedico esta tesis.

RESUMEN.

En el presente trabajo se estudia la factibilidad de usar métodos semiclásicos para describir la interacción de átomos térmicos con superficies cristalinas.

Las expresiones semiclásicas usadas se desarrollan en todo detalle y se aplican al caso de átomos de He (con energías incidentes entre 2 y 20 meV) incidiendo sobre la superficie corrugada en sólo una dirección. Se encuentra un muy buen acuerdo en algunos casos y resultados insatisfactorios en otros. El rango de validez de los métodos semiclásicos se delimita.

Como conclusión general se encuentra que los métodos semiclásicos no son de utilidad práctica para la descripción del scattering elástico de átomos sobre superficies cristalinas.

## I. INTRODUCCION.

El principal objetivo de este trabajo es estudiar la factibilidad de usar métodos semiclásicos para describir el scattering elástico de átomos (de energías térmicas) sobre superficies cristalinas. Este tipo de experimentos se ha transformado en los últimos años en una herramienta experimental muy importante de la física de superficies. La solución del scattering elástico átomo-superficie es un paso previo para el estudio de colisiones no elásticas. Métodos semiclásicos, que son una generalización del método WKB a problemas de más de una dimensión, han sido desarrollados en la última década especialmente por W.H. Miller [1] y R.A. Marcus [2].

Una excelente recopilación de los avances logrados en los primeros años se presenta en la referencia [3].

Estos métodos semiclásicos, que fueron desarrollados para el estudio de problemas físico-químicos, fueron usados con gran éxito en ciertos problemas de la física nuclear de iones pesados [4]. En numerosas de estas aplicaciones, la así llamada aproximación semiclásica uniforme (USCA) mostró tener ventajas sustanciales sobre cálculos cuánticos exactos usando el formalismo de canales acoplados: con un esfuerzo numérico considerablemente menor y

al mismo tiempo permitiendo una comprensión más profunda del fenómeno estudiado, se obtenían esencialmente los mismos resultados cuánticos exactos.

El scattering de átomos térmicos sobre una superficie cristalina puede ser formulado de una manera que es formalmente idéntica a los problemas nucleares analizados en las referencias [4]. Esto sugiere inmediatamente intentar aplicar la aproximación semiclásica uniforme a este problema. J. Doll [5] y otros investigadores [6], han aplicado métodos semiclásicos para estudiar el scattering elástico átomo-superficie, sin embargo las ventajas y desventajas de los métodos semiclásicos con respecto a los cuánticos no han sido señalados con precisión. Es esto el principal objetivo del presente trabajo.

Aquí sólo consideraremos el caso en que el átomo incidente es difractado por una superficie corrugada en una dirección. Esta hipótesis (que sin duda no es realista) simplifica considerablemente la aplicación de los formalismos semiclásicos al problema. Al final del trabajo se harán algunos comentarios sobre cómo uno espera que lo aquí presentado varíe si se asume una superficie corrugada en dos dimensiones.

En el capítulo II se desarrollan formalmente las distintas aproximaciones semiclásicas. Los resultados de los estudios numéricos se presentan en el capítulo

III donde estos son comparados con los resultados obtenidos por un programa de canales acoplados (cuántico). El programa numérico cuántico desarrollado para este trabajo ha sido descrito en otras oportunidades, [7] razón por la cual no se dan detalles en esta tesis. Finalmente, en el capítulo IV se resumen las conclusiones.

## II, LA APROXIMACION SEMICLASICA,

### 1.- La ecuación de Schrödinger.

Como ya hemos mencionado en la introducción, consideramos un cristal corrugado sólo en una dirección. Con esta hipótesis el problema se reduce a un problema bidimensional.

Sea  $(\hat{x}, \hat{z})$  un sistema de coordenadas fijo en el cristal, con el eje  $\hat{z}$  normal a la superficie (ver figura 1). Denotamos por  $V(x, z)$  al potencial de interacción entre el átomo incidente (situado en  $\vec{r} = (x, z)$ ) y la superficie cristalina. Si  $M$  y  $E$  son la masa y la energía del átomo incidente respectivamente, entonces la ecuación de Schrödinger para el problema aquí considerado viene dada por

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(x, z) - E \right] \psi(x, z) = 0 \quad (1)$$

con

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{z} \quad (2)$$



## 2.- La aproximación WKB.

Sin pérdida de generalidad podemos escribir la función de onda para el sistema de la forma

$$\Psi(x,z) = e^{\frac{i}{\hbar} \phi(x,z)} \quad (3)$$

Reemplazando (3) en (1) se obtiene que  $\phi(x,z)$  satisface la ecuación

$$-\frac{i\hbar}{2M} \nabla^2 \phi + \frac{1}{2M} (\vec{\nabla} \phi)^2 + V - E = 0 \quad (4)$$

Planteemos para la función  $\phi(x,z)$  un desarrollo de la forma

$$\phi(x,z) = \phi_0(x,z) + (-i\hbar) \phi_1(x,z) + (-i\hbar)^2 \phi_2(x,z) + \dots \quad (5)$$

Sustituyendo esta expansión en (4) se obtiene

$$\left[ \frac{1}{2M} (\vec{\nabla} \phi_0)^2 + V - E \right] - \frac{i\hbar}{2M} \left[ \vec{\nabla} \phi_0 + 2\vec{\nabla} \phi_0 \cdot \vec{\nabla} \phi_1 \right] + O(\hbar^2) = 0 \quad (6)$$

Introducimos ahora la aproximación semiclásica que consiste en despreciar en (6) todos los términos de orden en  $\hbar$  superior o igual a  $\hbar^2$ .

Iguando a cero los términos en la ec. (6) con la misma potencia de  $\hbar$ , se obtiene que las

funciones  $\phi_0(x,z)$  y  $\phi_1(x,z)$  deben satisfacer las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{2M} (\vec{\nabla} \phi_0)^2 + (V(x,z) - E) = 0 \quad (7)$$

y

$$\nabla^2 \phi_0 + 2 \vec{\nabla} \phi_0 \cdot \vec{\nabla} \phi_1 = 0. \quad (8)$$

La ecuación (7) es la así llamada ecuación de Hamilton-Jacobi [8].

De (7) se observa que si  $V(x,z)$  es un potencial real, la función  $\phi_0(x,z)$  también lo será. Más aún, de la ec. (8) se desprende que, si  $\phi_0(x,z)$  es real, también lo será  $\phi_1(x,z)$ . Por lo tanto la función de onda  $\psi(x,z)$  aproximadamente se puede escribir de la forma

$$\psi(x,z) \approx A(x,z) e^{\frac{i}{\hbar} \phi_0(x,z)} \quad (9)$$

con

$$A(x,z) = e^{\phi_1(x,z)}. \quad (10)$$

La ecuación de continuidad para estados estacionarios se reduce a  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$ , pues como  $\psi$  no depende del tiempo,  $\partial \rho / \partial t = \partial (\psi \psi^*) / \partial t = 0$ .

Evaluemos  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}$  para la función de onda dada por la ec.

(10):

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{J} &= -\frac{i\hbar}{2M} \vec{\nabla} \cdot \left[ \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right] \\ &= \frac{\psi \psi^*}{M} \left[ \nabla^2 \phi_0 + 2 \vec{\nabla} \phi_0 \cdot \vec{\nabla} \phi_1 \right] = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

De (11) se desprende que la ecuación (8) no es otra cosa que la ecuación de continuidad.

3.- La función de onda emergente.

Para obtener la función de onda, se debe encontrar  $A(x, z)$  y  $\phi_0(x, z)$ .

La fase  $\phi_0(x, z)$  se encuentra integrando la ecuación de Hamilton-Jacobi (7) por el método de las características. De la ecuación (7) se obtiene que

$$\frac{1}{\hbar} \phi_0(x, z) = \int_{x_0, z_0}^{x, z} \vec{k}(x', z') \cdot d\vec{r}' + C, \quad (12)$$

donde la integral se evalúa a lo largo de la trayectoria clásica que pasa por el punto  $(x, z)$ . En (12),  $\vec{k}(x', z')$  es el vector de onda local cuya magnitud viene dada por

$$|\vec{k}(x',z')| = \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} (E - V(x',z'))} \quad (13)$$

y cuya dirección es tangente a la trayectoria.

Es claro que hay numerosas trayectorias clásicas que pasan por el punto  $(x,z)$ . En este trabajo nosotros sólo estamos interesados en el scattering elástico y por lo tanto es suficiente conocer la función de onda emergente lejos de la superficie cristalina (es decir para  $z$  tales que  $V(x,z) \approx 0$ ). Si sólo estamos interesados en la función de onda emergente, basta considerar las trayectorias clásicas que pasan por el punto  $(x,z)$  y han sido reflejadas por la superficie. Aún así hay numerosas trayectorias clásicas que cumplen con estos requisitos. Consideremos una de estas trayectorias y evaluemos su amplitud  $A(x,z)$ . Para esto igualemos el flujo incidente y emergente entre dos características. Supongamos que la onda plana incidente viene dada por

$$\psi_{in} = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \quad (14)$$

Para el flujo incidente  $\Phi_{in}$  a través del "tubo" de sección  $(dx_o) \cdot (\cos \theta_i)$  (ver fig. 1) se obtiene entonces

$$\Phi_{in} = |\vec{J}_{in}| \cos \theta_i dx_o = dx_o \cos \theta_i |\vec{k}_i| = -k_i dx_o, \quad (15)$$

donde hemos denotado por una  $k$  cursiva la componente  $z$  de  $\vec{k}_i$ , es decir  $\vec{k}_i = (K_i, k_i)$ , (la componente paralela a la superficie, o sea a lo largo del eje  $\hat{x}$ , las denotaremos con letras mayúsculas). Note que  $k_i$  es negativo.

Para el flujo emergente  $\Phi_{em}$  se tiene que

$$\Phi_{em} = (dx) \cos \theta_f |\vec{J}_{em}|, \quad (16)$$

donde  $|\vec{J}_{em}|$  se evalúa con la función de onda

$$\Psi(x,z) = A(x,z) e^{\frac{i}{\hbar} \phi_0(x,z)} \quad (17)$$

Así se obtiene

$$\begin{aligned} \Phi_{em} &= dx \cos \theta_f |A(x,z)|^2 |\vec{k}_f| \\ &= |A(x,z)|^2 dx k_f. \end{aligned} \quad (18)$$

Aquí nuevamente  $k_f$  es la componente normal del vector de onda emergente  $\vec{k}_f$  de la trayectoria considerada. Igualando ambos flujos se obtiene que la amplitud  $A(x,z)$  viene dada por

$$A(x,z) = \sqrt{-\frac{k_i}{k_f} \frac{dx_0}{dx}} \quad (19)$$

El factor  $dx/dx_0$  puede ser positivo o negativo. En el caso que sea negativo se debe reemplazar  $dx/dx_0$  por su valor absoluto y agregar una fase  $(\pi/2)$  a  $\phi_0(x,z)$ . Este punto lo detallaremos más adelante.

En la integral que aparece en la ecuación (12) para la evaluación de la fase  $\phi_0(x,z)$ , el punto inicial de la integración  $(x_0, z_0)$  debe ser elegido de manera tal que la trayectoria clásica que parte de este punto con momento  $\hbar\vec{k}_i$  pase efectivamente por el punto  $(x,z)$  después de ser reflejada por la superficie cristalina. Para todas las trayectorias podemos tomar el mismo valor  $z_0 =$  constante (por supuesto que fuera del alcance del potencial  $V(x,z)$ ). A pesar de esta limitación, pueden existir numerosas trayectorias clásicas distintas, o sea trayectorias que comienzan en lugares  $x_0$  distintos, todos con el mismo  $\vec{k}_i$ , que llegan finalmente al mismo punto  $(x,z)$ . Por supuesto que todas estas distintas trayectorias tendrán diferentes momentos finales  $\hbar\vec{k}_f$ . Para obtener la función de onda emergente, deberemos sumar sobre todas estas trayectorias distintas.

Aún falta especificar la constante de integración  $C$  que aparece en la ecuación (12). Note que al variar  $x_0$  para un  $z_0$  fijo, no se recorre un frente de onda ya que los puntos de fase constante de la onda incidente se encuentran en el "plano" normal a  $\vec{k}_i$ . De la

figura 1 se desprende inmediatamente que C debe elegirse como sigue,

$$C = \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i = k_i x_0 + k_i z_0 \quad (20)$$

donde se usó la notación  $\vec{r}_i = (x_0, z_0)$ . Resumiendo: La función de onda emergente se puede escribir de la forma

$$\Psi_{em}(x, z) = \sum_{\text{trayectorias}} A(x, z) e^{\frac{i}{\hbar} \phi_0(x, z)} \quad (21)$$

donde

$$\frac{1}{\hbar} \phi_0(x, z) = \int_{\vec{r}_i}^{\vec{r}} \vec{k}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i \quad (22)$$

La amplitud  $A(x, z)$  viene dada por la ec. (19). En (21), para un punto  $(x, z)$  dado, la suma debe realizarse sobre todas las trayectorias clásicas que:

- i) Tienen momento inicial  $\hbar \vec{k}_i$ .
- ii) Parten a una distancia  $z_0$  del cristal.
- iii) Pasan finalmente, después de chocar con la superficie cristalina, por el punto  $(x, z)$ .

Note que la integral en (22) evalúa el número de ondas de De Broglie a lo largo de la trayectoria clásica.

4.- La amplitud de scattering.

Para  $z$  fuera del alcance del potencial  $V(x,z)$ , la onda emergente debe ser una superposición de ondas planas. Por este motivo escribimos (para  $z \rightarrow \infty$ ):

$$\psi_{em}(x,z) = \sum_{\text{trayectorias}} A(x,z) e^{\frac{i}{\hbar} \phi_0(x,z)} = \frac{L}{2\pi} \int_{\alpha} f_{\alpha} \sqrt{\frac{-k_i}{k_{\alpha}}} e^{i\vec{k}_{\alpha} \cdot \vec{r}} d\alpha \quad (23)$$

donde  $L$  es el largo del cristal y

$$\vec{k}_{\alpha} = (K_i + \alpha, k_{\alpha}) \quad (24)$$

con

$$|\vec{k}_{\alpha}|^2 = |\vec{k}_i|^2. \quad (25)$$

Esta última relación (que se debe a la ley de conservación de la energía), junto con la definición (24) permite para un  $\vec{k}_i$  y  $\alpha$  dado, evaluar  $k_{\alpha}$ . En (23)  $f_{\alpha}$  es la amplitud de la onda plana. El factor  $\sqrt{-k_i/k_{\alpha}}$  es de origen puramente geométrico; en efecto, es la razón entre el ancho del frente de onda incidente y del emergente en la dirección  $\vec{k}_{\alpha}$  (ver fig. 2).

La densidad de probabilidad que una partícula incidente emerja en la dirección  $\vec{k}_{\alpha}$  viene dada por (ver por ejemplo ref. [7]):

$$P_{\alpha} = |f_{\alpha}|^2. \quad (26)$$

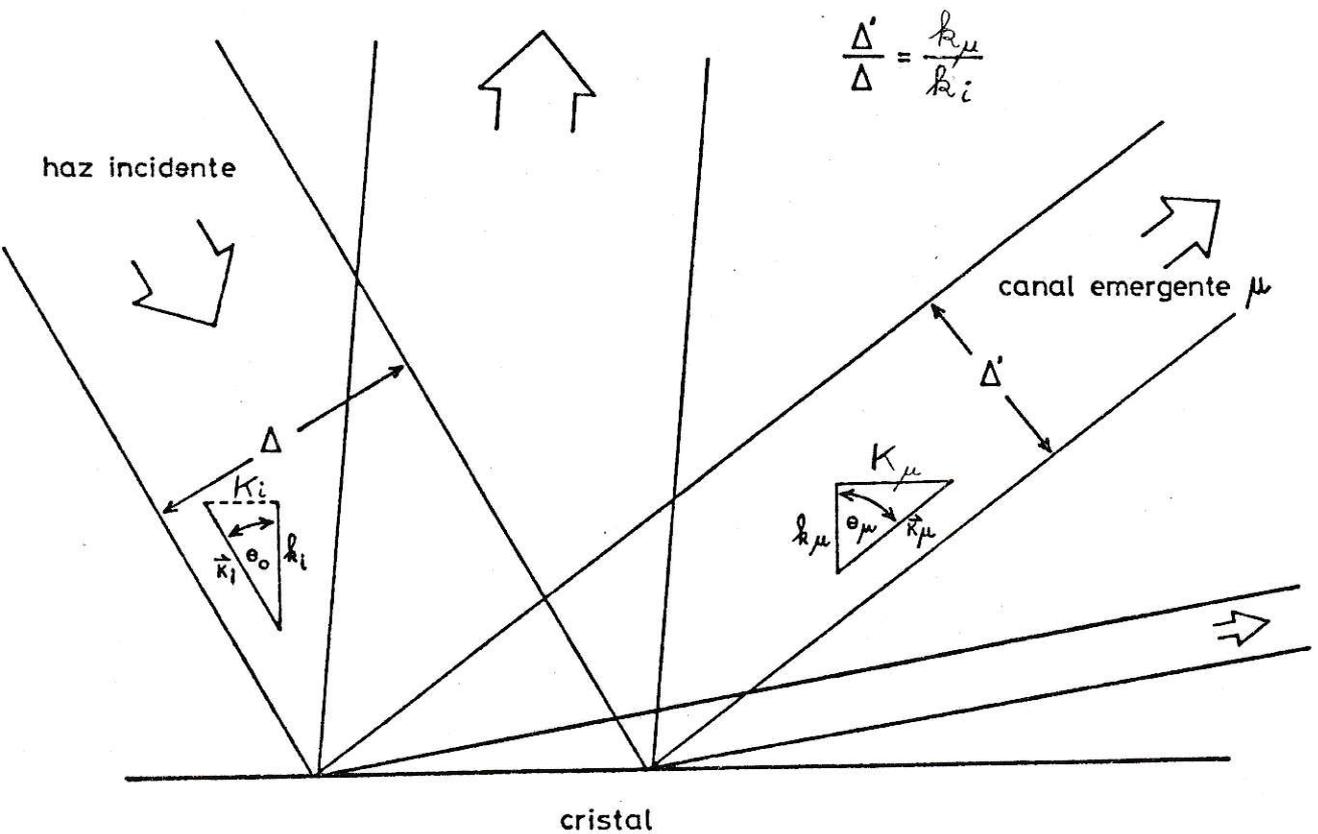


Fig. 2 Gráfico que muestra en forma esquemática la relación geométrica que existe entre el ancho del frente de ondas incidente y las diversas ondas emergentes.

Evaluemos

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(\vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta) \cdot \vec{r}} &= e^{i(k_\alpha - k_\beta)z} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(\alpha - \beta)x} \\
 &= e^{i(k_\alpha - k_\beta)z} 2\pi \delta(\alpha - \beta) \\
 &= 2\pi \delta(\alpha - \beta).
 \end{aligned} \tag{27}$$

Multiplicando (23) por  $\exp(-i\vec{k}_\beta \cdot \vec{r})$ , integrando y usando la ec. (27) se obtiene

$$\begin{aligned}
 \sum_{\text{tray.}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx A(x,z) e^{i\left[\frac{1}{\hbar} \phi_0(x,z) - i\vec{k}_\beta \cdot \vec{r}\right]} &= \\
 &= \frac{L}{2\pi} \int d\alpha \sqrt{\frac{-k_i}{k_\alpha}} f_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(\vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta) \cdot \vec{r}} \\
 &= \sqrt{\frac{-k_i}{k_\beta}} f_\beta L,
 \end{aligned} \tag{28}$$

o sea

$$f_\beta = \frac{1}{L} \sqrt{\frac{k_\beta}{-k_i}} \sum_{\text{tray.}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx A(x,z) e^{i\left[\frac{1}{\hbar} \phi_0(x,z) - \vec{k}_\beta \cdot \vec{r}\right]} \tag{29}$$

Usando la relación que antes habíamos encontrado para la amplitud  $A(x,z)$  (ec. (19)) se obtiene

$$f_{\beta} = \frac{1}{L} \sum_{\text{tray.}} \int_{-L/2}^{L/2} dx \sqrt{\frac{k_{\beta} dx_0}{k_f dx}} e^{i\left(\frac{1}{\hbar} \phi_0(x,z) - \vec{k}_{\beta} \cdot \vec{r}\right)} \quad (30)$$

Ahora convertimos la integral sobre  $x$  en una integral sobre  $x_0$ . Usando el hecho que

$$\sum_{\text{tray.}} \int_{-L/2}^{L/2} dx \dots = \int_{-L/2}^{L/2} dx_0 \cdot \left(\frac{dx}{dx_0}\right) \dots, \quad (31)$$

(30) queda de la forma

$$f_{\beta} = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx_0 \sqrt{\frac{k_{\beta}}{k_f}} \sqrt{\frac{dx}{dx_0}} e^{i\left(\frac{1}{\hbar} \phi_0(x_0, z_0) - \vec{k}_{\beta} \cdot \vec{r}\right)} \quad (32)$$

Definamos

$$\Delta_{\beta}(x_0, z_0) = \frac{1}{\hbar} \phi_0(x_0, z_0) - \vec{k}_{\beta} \cdot \vec{r} \quad (33)$$

Usando las ecs. (22) y (24), se obtiene que

$$\Delta_{\beta}(x_0, z_0) = \int_{x_0, z_0}^{x, z} \vec{k}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i - \vec{k}_{\beta} \cdot \vec{r} \quad (34a)$$

$$= \int_{x_0, z_0}^{x, z} \vec{k}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' - \beta x + K_i(x_0 - x) + k_i z_0 - k_{\beta} z \quad (34b)$$

Por supuesto que  $\vec{k}(\vec{r}')$  es periódico en la dirección paralela a la superficie, es decir

$$\vec{k}(x'+a, z') = \vec{k}(x', z') \quad (35)$$

donde  $a$  es el parámetro de la red. De esta observación y la ec. (34b) se desprende que

$$\Delta_{\beta}(x_0+a, z_0) = \Delta_{\beta}(x_0, z_0) - \beta a. \quad (36)$$

Los demás términos del integrando de la ec. (32) son periódicos si  $x_0 \rightarrow x_0 + a$ , luego

$$f_{\beta} = \frac{1}{L} \sum_{m=0}^N \int_0^a dx_0 \sqrt{\frac{k_{\beta}}{k_f}} \sqrt{\frac{dx}{dx_0}} e^{i(\Delta_{\beta}(x_0, z_0) - m\beta a)} \quad (37)$$

con  $L = Na$ .

Por otra parte

$$\sum_{m=0}^N e^{im\beta a} = \begin{cases} 0 & \text{si } \beta a \neq 2\pi n \\ N & \text{si } \beta a = 2\pi n \end{cases} \quad n \in \mathbb{Z} \quad (38)$$

o sea,  $f_{\beta}$  será distinto de cero sólo si

$$\beta = \frac{2\pi}{a} \mu =: G_{\mu} \quad \text{con } \mu \in \mathbb{Z} \quad (39)$$

Note que  $G_\mu$  es un vector de la red recíproca superficial. De todo lo anterior se desprende que sólo hay ondas planas emergentes en cierto número finito de direcciones discretas. Los ángulos emergentes  $\theta_\nu$  deben satisfacer la siguiente ley de difracción:

$$\text{sen } \theta_\nu = \text{sen } \theta_i + \nu \frac{\lambda}{a} \quad (40)$$

Usando (38) y (39), (37) queda

$$f_\mu = \frac{1}{a} \int_0^a dx_0 \sqrt{\frac{k_\mu}{k_f} \frac{dx}{dx_0}} e^{i \Delta_\mu(x_0, z_0)} \quad (41)$$

Podemos ahora nuevamente escribir la integral en la ec. (41) en términos de las coordenadas finales  $(x, z)$ , en lugar de las coordenadas iniciales  $(x_0, z_0)$ . De esta manera se obtiene

$$f_\mu = \frac{1}{a} \int_0^a dx \sqrt{\frac{k_\mu}{k_f} \frac{dx_0}{dx}} e^{i \Delta_\mu(x, z)} \quad (42)$$

con

$$\Delta_\mu(x, z) = \int_{x_0, z_0}^{x, z} \vec{k}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i - \vec{k}_\mu \cdot \vec{r} \quad (43)$$

## 5.- Aproximación de fase estacionaria.

Consideramos la integral

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) e^{i f(x)} dx \quad (44)$$

y supongamos que  $f(x)$  varía rápidamente y  $g(x)$  suavemente. Además supongamos que el integrando tiene un punto de fase estacionaria, es decir, que existe un punto  $x_1$  tal que

$$f'(x_1) = 0 \quad (45)$$

Supongamos, sin pérdida de generalidad que  $f''(x_1) > 0$ . El integrando en (44) sólo contribuye a la integral en la vecindad del punto de fase estacionaria, pues lejos de él, la fase varía rápidamente dando origen a rápidas oscilaciones del integrando que se promedian a cero. En la vecindad de  $x_1$  se tiene que

$$f(x) \simeq f(x_1) + \frac{1}{2} f''(x_1) (x - x_1)^2 + \dots \quad (46)$$

Reemplazando (46) en (44) y asumiendo que  $g(x)$  varía lentamente ahí donde la ecuación (46) es válida, se obtiene

$$\begin{aligned} I &\simeq g(x_1) e^{i f(x_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{i}{2} f''(x_1) (x - x_1)^2} \\ &\simeq g(x_1) e^{i f(x_1)} \left( \frac{2\pi}{i f''(x_1)} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (47)$$

Este método aproximado para evaluar la integral (44) se conoce bajo el nombre de "método de la fase estacionaria".

Usemos el método de la fase estacionaria para evaluar la expresión integral para  $f_\mu$  dada por la ecuación (42).

Los puntos de fase estacionaria se encuentran de la siguiente ecuación

$$\frac{\partial \Delta_\mu(x, z)}{\partial x} = \left( \vec{k}(x, z) - \vec{k}_\mu \right) \cdot \hat{x} = 0 \quad (48)$$

o sea, se debe cumplir que

$$\vec{k}(x, z) = \vec{k}_\mu. \quad (49)$$

La interpretación física de la ec. (49) es inmediata. Para un  $\mu$  dado, es decir, para un pico de difracción determinado, los puntos de fase estacionaria en la ec. (42) corresponden justamente a las trayectorias clásicas que para  $t \rightarrow +\infty$  se mueven en dirección de  $\vec{k}_\mu$ .

Como veremos más adelante, en cada intervalo de tamaño  $a$ , o sea, entre  $x_0$  y  $x_0 + a$ , hay 2 trayectorias clásicas que cumplen con (49). Denotemos estas 2 trayectorias (para cada  $\mu$ ) con un índice adicional  $j = 1, 2$ .

Supongamos además que los puntos de fase estacionaria en la ec. (42) pueden ser considerados en forma separada (o sea están bien aislados), entonces

$$\begin{aligned}
 f_{\mu} &= \sum_{j=1,2} \sqrt{\frac{2\pi}{ia^2 \left. \frac{\partial K(x,z)}{\partial x} \right|_{(j)}} \cdot \left( \frac{dx_0}{dx} \right)} e^{i\Delta_{\mu}^{(j)}} \\
 &= \sum_{j=1,2} \sqrt{\frac{2\pi}{ia^2 \left. \frac{\partial K(x,z)}{\partial x_0} \right|_{(j)}}} e^{i\Delta_{\mu}^{(j)}} \quad (50)
 \end{aligned}$$

donde  $K(x,z)$  es la componente paralela a la superficie del vector de onda final  $\vec{k}(x,z)$ .

Como veremos en las aplicaciones numéricas más adelante, la derivada  $\partial K(x,z)/\partial x$  que aparece en (50), para un  $j$  es positiva y para el otro  $j$  es negativa; sin pérdida de generalidad los denotamos por  $j=1$  y  $j=2$  respectivamente. Definamos

$$P_{\mu,j} =: \left| \frac{2\pi}{a^2 \left. \frac{\partial K(x,z)}{\partial x_0} \right|_{(j)}} \right| \quad j=1,2 \quad (51)$$

Entonces

$$f_{\mu} = \sqrt{P_{\mu,1}} e^{i(\Delta_{\mu}^{(1)} - \frac{\pi}{4})} + \sqrt{P_{\mu,2}} e^{i(\Delta_{\mu}^{(2)} + \frac{\pi}{4})} \quad (52)$$

de donde

$$P_{\mu}^{\text{prim}} = |f_{\mu}|^2 = P_{\mu}^{\text{clas}} + 2\sqrt{P_{\mu,1} P_{\mu,2}} \text{sen}(\Delta_{\mu}^{(2)} - \Delta_{\mu}^{(1)}) \quad (53)$$

con

$$P_{\mu}^{\text{clas}} = P_{\mu,1} + P_{\mu,2} \quad (54)$$

$P_{\mu}^{\text{clas}}$  en cierto sentido, como veremos en el capítulo III, es la probabilidad clásica de que la partícula incidente emerja por el pico de difracción  $\mu$ .  $P_{\mu}^{\text{Prim}}$  es la así llamada "probabilidad semiclassical primitiva".  $P_{\mu}^{\text{Prim}}$  difiere de  $P_{\mu}^{\text{clas}}$  en el término de interferencia, o sea, para obtener (53) no se sumaron las probabilidades clásicas de cada una de las trayectorias  $j=1,2$ , sino que se sumaron las amplitudes de probabilidad y recién entonces se tomó el valor absoluto al cuadrado. En otras palabras, en el método semiclassical primitivo no se desprecia el principio de superposición, siendo posible por lo tanto la observación de fenómenos de interferencia.

## 6.- Aproximación uniforme de Airy.

Frecuentemente ocurre que la hipótesis, de que los 2 puntos de fase estacionaria están bien aislados, no es buena. En ese caso se debe recurrir a métodos más sofisticados para evaluar la integral (42).

Consideremos nuevamente la integral (44).

Supondremos ahora que hay 2 puntos de fase estacionaria tal

que

$$f'(x_1) = f'(x_2) = 0. \quad (55)$$

La figura 3 muestra en forma esquemática la forma de  $f(x)$  (si es que  $x_1$  y  $x_2$  son reales).

Introduzcamos una nueva variable  $u$  implícitamente definida por

$$f(x) = \frac{1}{3} u^3 - \xi u + \eta = h(u) \quad (56)$$

donde las constantes  $\xi$  y  $\eta$  se eligen de manera que los extremos de  $f(x)$  y  $h(u)$  coincidan.

Los extremos de  $f(x)$  y  $h(u)$  ocurren para  $x_1, x_2$ , y  $u_{1,2} = \pm \sqrt{\xi}$  respectivamente. Por lo tanto se tiene que

$$f_1 := f(x_1) = h(u_1) = -\frac{2}{3} \xi^{\frac{3}{2}} + \eta \quad (57a)$$

$$f_2 := f(x_2) = h(u_2) = \frac{2}{3} \xi^{\frac{3}{2}} + \eta \quad (57b)$$

Sumando y restando estas dos últimas ecuaciones obtenemos

$$\eta = \frac{1}{2} (f_1 + f_2) \quad (58)$$

y

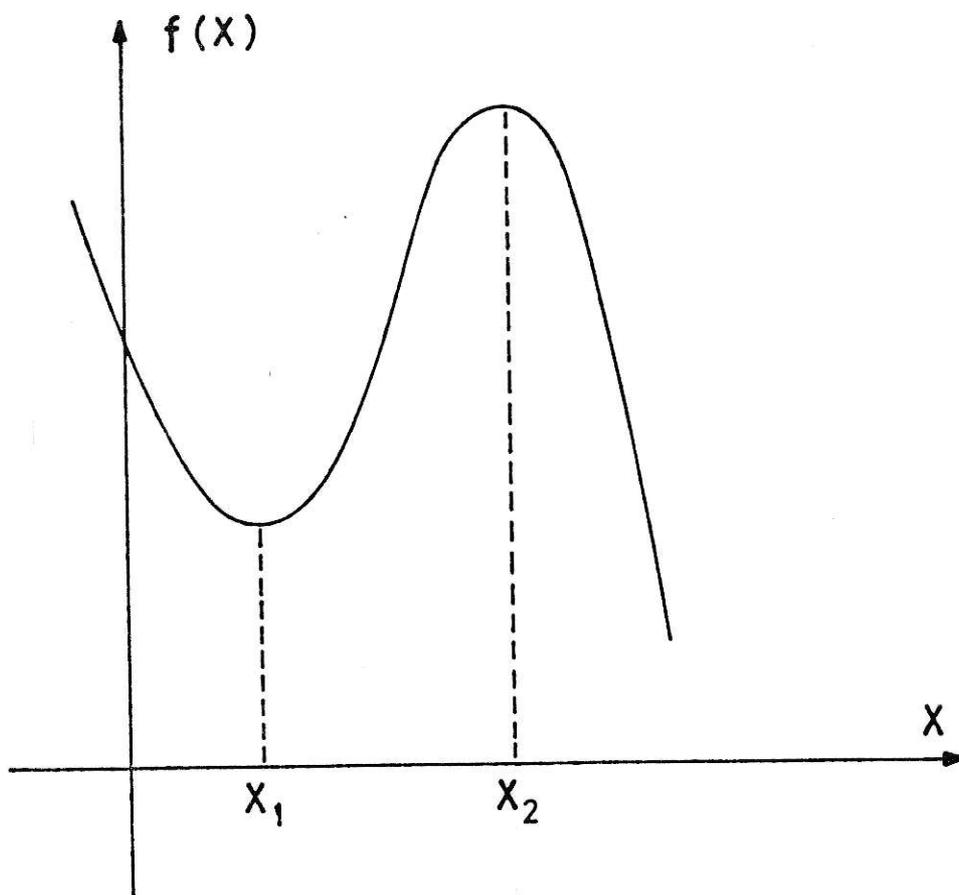


Fig. 3 Representación esquemática de la función  $f(x)$  mostrando los 2 puntos de fase estacionaria.

$$\xi = \left[ \frac{3}{4} (f_2 - f_1) \right]^{2/3} \quad (59)$$

Reemplazando (56) en (44) y realizando el cambio de variable de  $x$  a  $u$  se obtiene para  $I$  la expresión

$$I = e^{i\eta} \int_{-\infty}^{+\infty} du \left( \frac{dx}{du} \right) g(x) e^{i(-\xi u + \frac{1}{3} u^3)} \quad (60)$$

Igual que en la sección anterior, supongamos que  $(dx/du) \cdot g(x)$  varía lentamente. Más aún, supongamos que en la vecindad de  $u = 0$ ,  $(dx/du) \cdot g(x)$  tiene la siguiente expansión:

$$\left( \frac{dx}{du} \right) g(x) \simeq \alpha_0 + \alpha_1 u \quad (61)$$

Evaluemos esta última expresión para  $x_1$  y  $x_2$ :

$$\left( \frac{dx}{du} \right)_1 g_1 = \alpha_0 + \alpha_1 \sqrt{\xi} \quad (62a)$$

$$\left( \frac{dx}{du} \right)_2 g_2 = \alpha_0 - \alpha_1 \sqrt{\xi} \quad (62b)$$

Aquí se ha usado la definición

$$g_j = g(x_j) \quad j = 1, 2 \quad (63)$$

De (62) se pueden despejar  $\alpha_0$  y  $\alpha_1$  obteniéndose

$$\alpha_0 = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{dx}{du} \right)_1 g_1 + \left( \frac{dx}{du} \right)_2 g_2 \right] \quad (64a)$$

$$\alpha_1 = \frac{1}{2\sqrt{\xi}} \left[ \left( \frac{dx}{du} \right)_1 g_1 - \left( \frac{dx}{du} \right)_2 g_2 \right] \quad (64b)$$

Derivando la ec. (56) dos veces se obtiene que

$$f''(x) = 2u \left( \frac{du}{dx} \right)^2 + (u^2 - \xi) \frac{d^2u}{dx^2} \quad (65)$$

Evaluando esta última expresión en  $x_{1,2}$  y notando que

$$u_{1,2}^2 - \xi = 0, \text{ se obtiene que}$$

$$f_1'' := f''(x_1) = 2\sqrt{\xi} \left( \frac{du}{dx} \right)_1^2 \quad (66a)$$

$$f_2'' := f''(x_2) = -2\sqrt{\xi} \left( \frac{du}{dx} \right)_2^2 \quad (66b)$$

de donde

$$\left( \frac{dx}{du} \right)_1 = \left( \frac{2\sqrt{\xi}}{f_1''} \right)^{1/2} \quad (67a)$$

$$\left( \frac{dx}{du} \right)_2 = \left( \frac{2\sqrt{\xi}}{-f_2''} \right)^{1/2} \quad (67b)$$

Reemplacemos la expansión (61) en la integral (60):

$$I \approx e^{i\eta} \int_{-\infty}^{+\infty} du (\alpha_0 + \alpha_1 u) e^{i(-\xi u + \frac{1}{3} u^3)} \quad (68)$$

Por otra parte la expresión integral para la función de Airy [9] es

$$Ai(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\lambda u + \frac{1}{3} u^3)} du \quad (69)$$

Derivando (69) respecto a  $\lambda$  se obtiene

$$Ai'(\lambda) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} u e^{i(\lambda u + \frac{1}{3} u^3)} du \quad (70)$$

Usando (69) y (70), (68) queda

$$I \approx 2\pi e^{i\eta} \left[ \alpha_0 Ai(-\xi) - i\alpha_1 Ai'(-\xi) \right] \quad (71)$$

O sea, usando (58), (59), (64) y (67), se obtiene finalmente

$$I \approx \sqrt{2} \pi e^{\frac{i}{2}(f_1 + f_2)} \left\{ \left( \frac{g_1}{\sqrt{f_1''}} + \frac{g_2}{\sqrt{-f_2''}} \right) \xi^{1/4} Ai(-\xi) + \right. \\ \left. + (-i) \left( \frac{g_1}{\sqrt{f_1''}} - \frac{g_2}{\sqrt{-f_2''}} \right) \frac{1}{\xi^{1/4}} Ai'(-\xi) \right\} \quad (72)$$

con

$$\xi^{1/2} = \left( \frac{3}{4} (f_2 - f_1) \right)^{1/3} \quad (73)$$

Esta expresión aproximada para la integral I se denomina "aproximación uniforme de Airy".

Usemos la aproximación uniforme de Airy para evaluar la expresión integral de  $f_\mu$  dada por la ec. (42).

Para  $g_1$  se tiene

$$g_1 = \sqrt{\left. \frac{dx_0}{dx} \frac{k_\mu}{k_f} \right|_1} = \sqrt{\left. \frac{dx_0}{dx} \right|_1} \quad (74)$$

pues, por (49),  $k_f = k_\mu$  para los puntos de fase estacionaria. Luego

$$\begin{aligned} \frac{g_1}{\sqrt{f_1''}} &= \sqrt{\left. \frac{dx_0}{dx} \right|_1 \frac{1}{f_1''}} = \frac{1}{\sqrt{\left. \frac{dx}{dx_0} \frac{\partial K(x,z)}{\partial x} \right|_1}} \\ &= \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{P_{\mu,1}} \quad , \end{aligned} \quad (75a)$$

donde se ha usado la definición (51). Análogamente se obtiene que

$$\frac{g_2}{\sqrt{-f_2''}} = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{P_{\mu,2}} \quad . \quad (75b)$$

Usando (75) se obtiene para  $f_\mu$  en la aproximación uniforme de Airy

$$f_\mu = \sqrt{\pi} e^{\frac{i}{2}(\Delta_\mu^{(1)} + \Delta_\mu^{(2)})} \left\{ (\sqrt{P_{\mu,1}} + \sqrt{P_{\mu,2}}) \xi^{1/4} \text{Ai}(-\xi) + (-i)(\sqrt{P_{\mu,1}} - \sqrt{P_{\mu,2}}) \xi^{-1/4} \text{Ai}'(-\xi) \right\} \quad (76)$$

con

$$\xi^{1/2} = \left( \frac{3}{4} (\Delta_\mu^{(2)} - \Delta_\mu^{(1)}) \right)^{1/3} \quad (77)$$

Para la probabilidad de que una partícula incidente emerja por el canal  $\mu$  se obtiene finalmente

$$P_\mu^{unif} = P_\mu^{clas} \cdot I_1 + 2\sqrt{P_{\mu,1}P_{\mu,2}} I_2 \quad (78)$$

con

$$I_{1,2} = \pi \left( |\xi|^{1/2} \text{Ai}^2(-\xi) \pm \frac{\text{Ai}'^2(-\xi)}{|\xi|^{1/2}} \right) \quad (79)$$

( $\xi > 0$ )

## 7.- Representación integral de $f_\mu$ .

En lugar de obtener  $f_\mu$  evaluando aproximadamente la integral que aparece en la ec. (42), se podría pensar en computar la integral directamente en forma numérica. Sin embargo esto trae consigo una seria dificultad. Al evaluar la integral (42) numéricamente, se encuentra que el resultado de la integración depende de la distancia  $z_f$  del cristal hasta donde se computaron las trayectorias clásicas. El origen de este problema radica en que a la integral (42) contribuyen todas las trayectorias clásicas. Estas trayectorias emergen en un continuo de direcciones diferentes, haciendo que el Jacobiano  $dx_0/dx$  como también la diferencia de fase de las distintas trayectorias dependan de  $z_f$ . Este problema desaparece al evaluar la integral (42) usando los métodos descritos en las dos secciones anteriores, pues como vimos, las trayectorias que contribuyen para un canal  $\mu$  dado, son sólo las trayectorias clásicas que asintóticamente emergen en la dirección  $\vec{k}_\mu$ , es decir, las trayectorias que contribuyen se mueven en la misma dirección (no divergen), haciendo que las magnitudes que aparecen en las expresiones finales no dependan de  $z_f$ .

Por otra parte, si  $V(z_f) \approx 0$ , es claro que no se puede obtener información adicional sobre el proceso de scattering, al integrar las trayectorias clásicas más

allá de  $z_f$ .

Mediante una transformación canónica a otro conjunto de variables, es posible encontrar una expresión integral para  $f_\mu$  que no tenga los problemas de la ec. (42). Estos procedimientos se conocen bajo el nombre de "uniformización de las trayectorias" y han sido estudiados especialmente por R.A. Marcus [2], [10].

Sean  $X_f, z_f$  las coordenadas finales de las trayectorias clásicas y  $p_{X_f}, p_{z_f}$  los valores de las coordenadas canónicamente conjugadas respectivas. Introduciremos las nuevas variables  $\bar{x}, \tau$  definidas por

$$\bar{X} = X_f - \frac{P_{X_f}}{P_{z_f}} z_f \quad (80)$$

y

$$\tau = M \frac{z_f}{P_{z_f}} \quad (81)$$

Note que  $\bar{x}$  no varía si  $z_f$  se aumenta y que  $\tau$  varía asintóticamente igual que el tiempo. Denotemos por  $\bar{p}_{x_f}$  y  $\bar{E}$  las nuevas variables canónicamente conjugadas a  $\bar{x}$  y  $\tau$ . Asintóticamente,  $\bar{E}$  coincide con la energía  $E$ .

Consideremos la función generatriz del tipo  $F_2$  (ver ref. [8]) que tiene como argumento las viejas coordenadas y los nuevos momentos

$$F_2(x_f, z_f; \bar{P}_{x_f}, \bar{E}) = x_f \bar{P}_{x_f} + z_f \tilde{P}_{z_f} \quad (82)$$

con

$$\tilde{P}_{z_f} = \sqrt{2M \left( \bar{E} - \frac{\bar{P}_{x_f}^2}{2M} \right)} \quad (83)$$

Se tiene que:

$$P_{z_f} = \frac{\partial F_2}{\partial z_f} = \tilde{P}_{z_f}(\bar{P}_{x_f}, \bar{E}) \quad (84a)$$

$$P_{x_f} = \frac{\partial F_2}{\partial x_f} = \bar{P}_{x_f} \quad (84b)$$

de 83 y 84 a-b vemos que  $\bar{E} = E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2M}$

$$\bar{x} = \frac{\partial F_2}{\partial \bar{P}_{x_f}} = x_f - z_f \frac{\bar{P}_{x_f}}{\tilde{P}_{z_f}} = x_f - z_f \frac{P_{x_f}}{P_{z_f}} \quad (84c)$$

$$\tau = \frac{\partial F_2}{\partial \bar{E}} = z_f \frac{M}{\tilde{P}_{z_f}} = z_f \frac{M}{P_{z_f}} \quad (84d)$$

En la ec. (17) hemos denotado por

$$\Psi(x, z) = A(x, z) e^{\frac{i}{\hbar} \phi(x, z)} \quad (85)$$

a la función de ondas, escrita en función de las viejas variables. Denotemos por

$$\bar{\Psi}(\bar{x}, \tau) = \bar{A}(\bar{x}, \tau) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{\phi}_0(\bar{x}, \tau)} \quad (86)$$

a la función de onda que describe el mismo estado pero en términos de las nuevas variables  $\bar{x}$  y  $\tau$ . En las referencias [3], [10] y [11] se muestra que la relación entre  $\phi_0$  y  $\bar{\phi}_0$  viene dada por

$$\frac{1}{\hbar} \bar{\phi}_0(\bar{x}, \tau) = \frac{1}{\hbar} \phi_0(x_f, z_f) - F_2(x_f, z_f; \bar{p}_{x_f}, \bar{E}) + \bar{x} \bar{p}_{x_f} + \tau \bar{E}, \quad (87)$$

o sea, usando (22), (82) y (84)

$$\frac{1}{\hbar} \bar{\phi}_0(\bar{x}, \tau) = - \int_{t_i}^{t_f} \left( z \frac{dk}{dt} + x \frac{dK}{dt} \right) dt + \frac{E\tau}{\hbar} + K_f \bar{x} \quad (88)$$

Para la amplitud  $\bar{A}$  se tiene que

$$k_f \bar{A}^2 d\bar{x} = (-k_i) A_0^2 dx_0 = \frac{(-k_i)}{2\pi L} dx_0, \quad (89)$$

luego

$$\bar{A}(\bar{x}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sqrt{\frac{dx_0}{d\bar{x}}} \sqrt{\frac{-k_i}{k_f}} \quad (90)$$

Una onda plana emergente en la dirección  $\vec{k}_\mu$  en las viejas

coordenadas viene dada por la expresión

$$\varphi_{\vec{k}_\mu}(x, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{i\vec{k}_\mu \cdot \vec{r}} \quad (91)$$

Para la misma función de onda, pero en las nuevas coordenadas se obtiene

$$\bar{\varphi}_{\vec{k}_\mu}(\bar{x}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{i(K_\mu \bar{x} + \tau E)} \quad (92)$$

A partir de (86) y (92), y usando (88) y (90), se obtiene

$$\begin{aligned} f_\mu \sqrt{\frac{-k_i}{k_f}} \delta(E-E') &= \langle \bar{\varphi}_{\vec{k}_\mu} | \bar{\Psi} \rangle \\ &= \iint d\bar{x} d\tau \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sqrt{\frac{-k_i}{k_f}} e^{-i(\bar{x} K'_\mu + \tau E')} \\ &\quad \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sqrt{\frac{dx_0}{d\bar{x}}} e^{i\left(\frac{E\tau}{\hbar} + K_f \bar{x} - \int_{t_i}^{t_f} \left(z \frac{dk}{dt} + x \frac{dK}{dt}\right) dt\right)} \\ &= \frac{1}{2\pi L} \int d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')\tau} \int_0^L dx_0 \sqrt{\frac{-k_i dx}{k_f dx_0}} e^{i((K_f - K'_\mu)\bar{x} - \bar{\Delta})} \\ &= \delta(E-E') \frac{1}{L} \int_0^L dx_0 \sqrt{\frac{d\bar{x}}{dx_0}} \sqrt{\frac{-k_i}{k_f}} e^{i((K_f - K'_\mu)\bar{x} - \bar{\Delta})} \quad (93) \end{aligned}$$

con

$$\bar{\Delta} =: \int_{t_i}^{t_f} \left( z \frac{dk}{dt} + x \frac{dK}{dt} \right) dt \quad (94)$$

En las ecuaciones anteriores  $K'_\mu$  denota la componente paralela a la superficie de  $\vec{k}'_\mu$ , que es el vector de onda cuya magnitud está relacionada con  $E'$  por la ecuación

$$\frac{\hbar^2 |\vec{k}'_\mu|^2}{2M} = E' \quad (95)$$

De (93) se obtiene la expresión integral buscada

$$f_\mu = \frac{1}{a} \int_0^a dx_0 \sqrt{\frac{d\bar{x}}{dx_0} \frac{k_\mu}{k_f}} e^{i((K_f - K'_\mu)\bar{x} - \bar{\Delta})} \quad (96)$$

con  $\bar{\Delta}$  dado por (94). Esta expresión a pesar de su gran parecido con la ec. (42), no tiene los problemas de ella. Como  $\bar{x}$  ni  $\bar{\Delta}$  varían una vez que se ha llegado a la región asintótica, el integrando no depende del punto donde se detiene la evaluación numérica de las trayectorias.

A partir de (96) se obtiene finalmente la probabilidad  $P_\mu^{\text{int}}$  de que una partícula incidente emerja por el canal  $\mu$ .

$$P_\mu^{\text{int}} = |f_\mu|^2 \quad (97)$$

## 8.- Las ecuaciones clásicas de movimiento.

De todo lo presentado en las secciones anteriores, se desprende que la evaluación de las trayectorias clásicas es esencial para estas aproximaciones semiclásicas.

El hamiltoniano para el problema viene dado por

$$H(x, z; p_x, p_z) = \frac{1}{2M} (p_x^2 + p_z^2) + V(x, z) \quad (98)$$

donde para el potencial átomo-superficie elegiremos un potencial canónico usado por numerosos autores [12], el así llamado potencial de Lennard-Jones-Devonshire:

$$V(x, z) = V_0(z) + V_1(z) \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \quad (99)$$

con

$$V_0(z) = D e^{\alpha(z_m - z)} \left[ e^{\alpha(z_m - z)} - 2 \right] \quad (100)$$

y

$$V_1(z) = -2\beta D e^{2\alpha(z_m - z)} \quad (101)$$

El potencial  $V_0(z)$  es el promedio sobre un plano paralelo situado a una distancia  $z$  sobre la superficie. Los parámetros  $D$  y  $z_m$  corresponden a la profundidad y posición del mínimo del potencial. El parámetro  $\beta$  mide la rugosidad de la superficie,  $a$  es el espaciado de la red mientras que  $\alpha^{-1}$  es una medida del alcance del potencial.

Los valores de estos parámetros que se usarán en el presente trabajo se dan en la tabla I. Estos parámetros corresponden al scattering de átomos de He sobre la superficie LiF (001) a una energía incidente de 20 meV. La figura 4 muestra el potencial en función de  $z$  para este caso.

A partir del hamiltoniano se encuentran las siguientes ecuaciones de movimiento:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{P_x}{M} \quad (102a)$$

$$\frac{dP_x}{dt} = - \frac{\partial V(x,z)}{\partial x} \quad (102b)$$

$$\frac{dz}{dt} = \frac{P_z}{M} \quad (102c)$$

y

$$\frac{dP_z}{dt} = - \frac{\partial V(x,z)}{\partial z} \quad (102d)$$

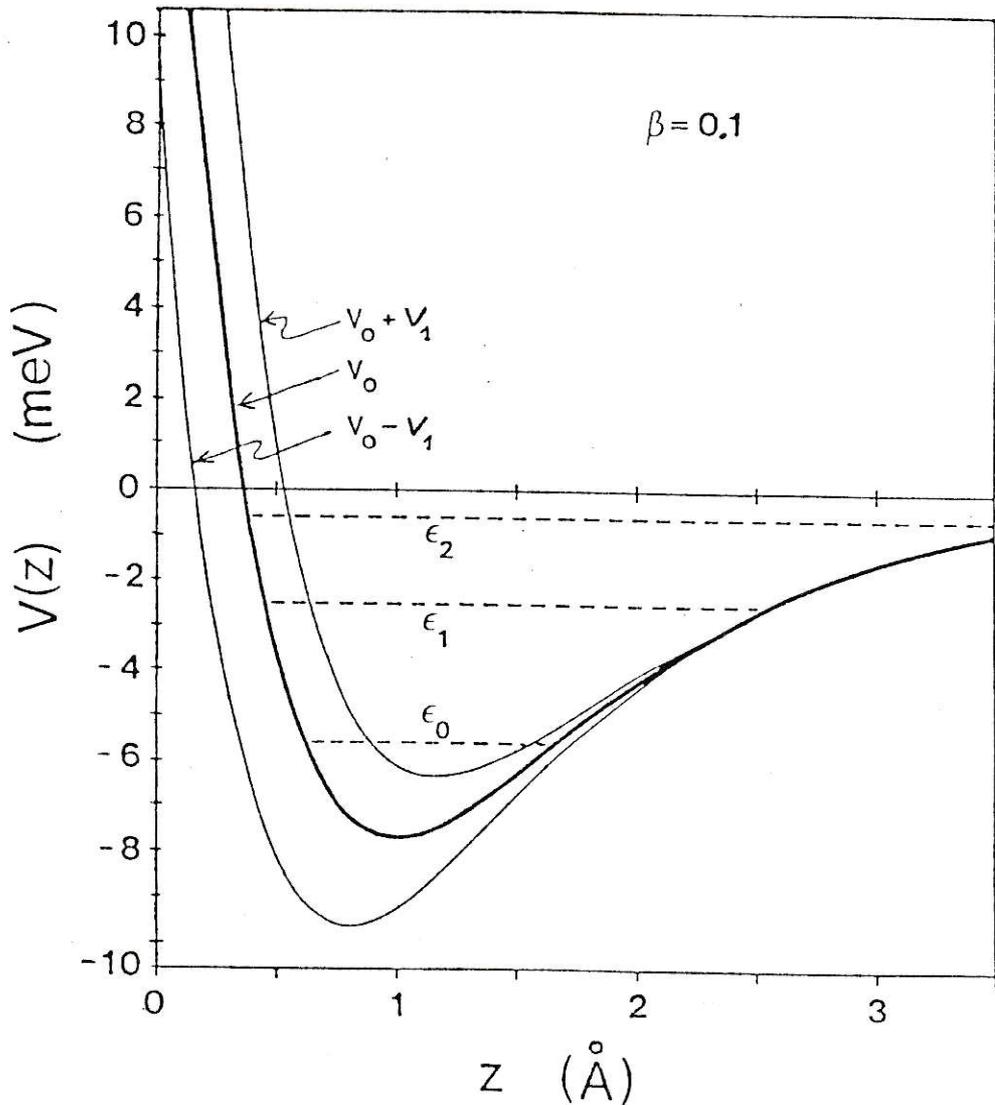


Fig. 4 Gráfico del potencial usado en este trabajo.  $V_0(z)$  es un potencial de Morse. Las líneas cortadas indican las energías  $E_i$  de los tres estados ligados del potencial  $V_0(z)$ .

Tabla 1

Parámetros del Potencial  $V(x,z)$   
 usados para el scattering de He  
 sobre una superficie de LiF.

Parámetro	Valor	Significado
a	$2.84 \text{ \AA}$	Parámetro de la red cristalina.
D	$-7.63 \text{ meV}$	Valor del mínimo del potencial.
$z_m$	$1.0 \text{ \AA}$	Posición del mínimo del potencial.
$\alpha$	$1.1 \text{ \AA}^{-1}$	$\alpha^{-1}$ es el "alcance" de potencial.
$\beta$	0.1	Medida de la rugosidad de la superficie.

Estas ecuaciones deben ser resueltas en forma simultánea con la ecuación diferencial para la fase  $\bar{\Delta}$ :

$$\hbar \frac{d\bar{\Delta}}{dt} = z \frac{dp_z}{dt} + x \frac{dp_x}{dt} \quad (103)$$

Note que conociendo  $\bar{\Delta}$  se pueden obtener las fases que aparecen en las expresiones para las probabilidades semiclásicas  $p_{\mu}^{\text{prim}}$  y  $p_{\mu}^{\text{unif}}$ .

Las ecuaciones de movimiento deben ser integradas con las siguientes condiciones iniciales en  $t=0$ :

$$\bar{\Delta}(0) = 0 \quad (104a)$$

$$z(0) = z_0 \approx 4 \text{ \AA} \quad (104b)$$

$$x(0) = x_0 \quad (104c)$$

$$p_x(0) = \sqrt{2ME} \sin \theta_i \quad (104d)$$

$$p_z(0) = \sqrt{2ME} \cos \theta_i \quad (104e)$$

donde  $E$  y  $\theta_i$  son la energía cinética y el ángulo de incidencia (medido desde la normal) del átomo incidente.

### III RESULTADO DE LOS ESTUDIOS NUMERICOS.

#### 1.- Las trayectorias clásicas.

Para familiarizarnos con el método, analizaremos primero en forma completa el caso particular en que el átomo de He incide con un ángulo  $\theta_i = 30^\circ$  y energía de 20 meV sobre una red (unidimensional) de rugosidad  $\beta = 0.1$ .

La figura 5 muestra las trayectorias clásicas obtenidas integrando numéricamente las ecuaciones clásicas de movimiento para 10 puntos de partida distintos (las trayectorias denotadas por los números 0 y 0' son idénticas excepto por una traslación en el parámetro de red  $a$ ). Los puntos de retroceso de las trayectorias clásicas muestran claramente la rugosidad de la superficie. También se observa en la figura 5 que los ángulos de emergencia varían para este caso, en forma continua entre dos extremos  $\theta_f^{\min}$  y  $\theta_f^{\max}$  a medida que se desplaza el punto de partida de las trayectorias paralelamente a la superficie. Las trayectorias que emergen en los ángulos  $\theta_f^{\min}$  y  $\theta_f^{\max}$  están en la vecindad de las denotadas por los números 2 y 6 respectivamente. La existencia de 2 envolventes (cáusticas) de trayectorias clásicas también se aprecian en la figura 5.

En la figura 6 se muestra  $v_f$  (o equivalentemente, a través de la ec. (40),  $\theta_f$ ) en función de  $x_0$ .

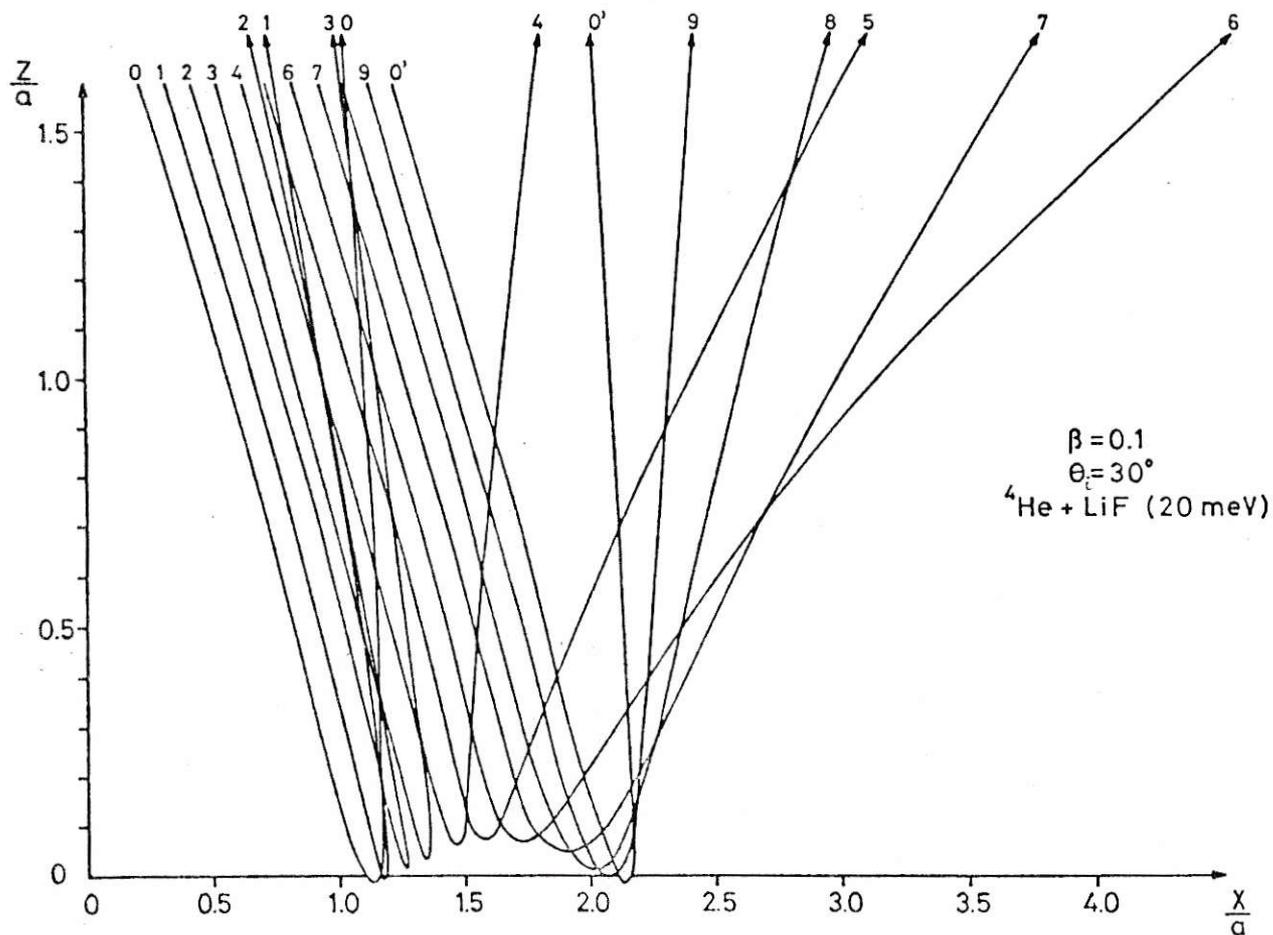


Fig. 5 Trayectorias clásicas incidiendo sobre el cristal con  $E_i = 20 \text{ meV}$  y  $\theta_i = 30^\circ$ . Las unidades a lo largo del eje  $\hat{z}$  están expandidas con respecto a las del eje  $\hat{x}$  por un factor 2. Las trayectorias  $\circ$  y  $\circ'$  son idénticas excepto por una traslación en un vector de red  $a$ .

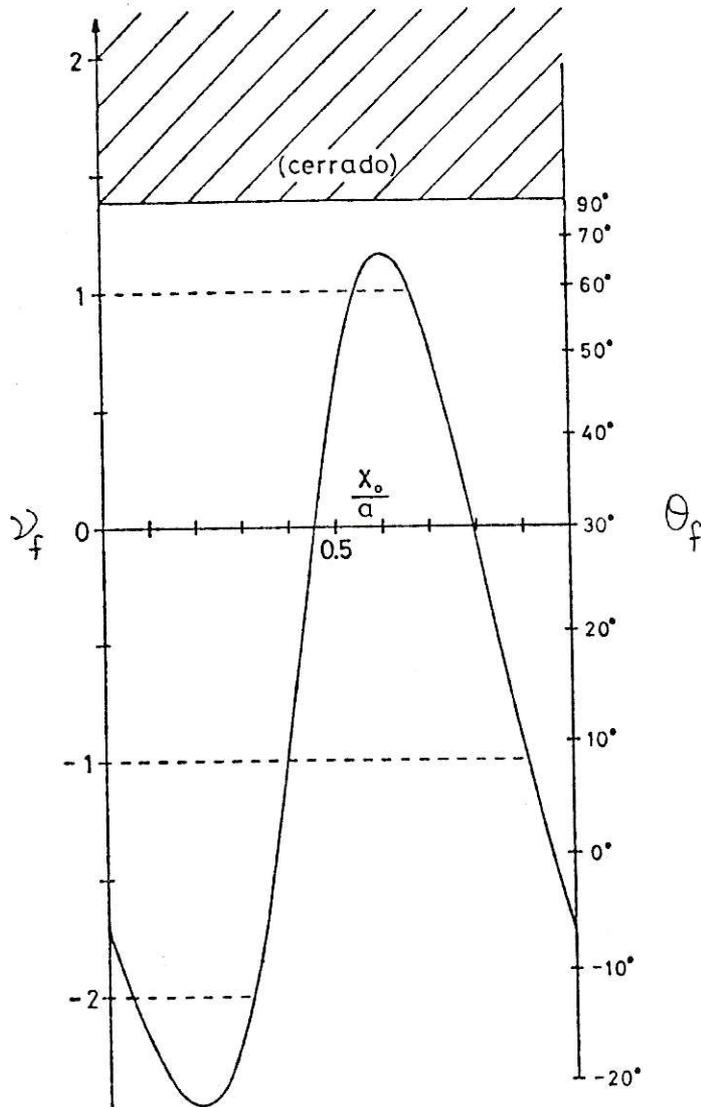


Fig. 6 Gráfico de la así llamada "función número cuántico"  $v_f(x_0)$ . Al lado derecho se indicó el ángulo  $\theta_f$  correspondiente a los  $v_f$  de la escala de la izquierda.

Para este caso,  $\Theta_f^{\max} \approx 66^\circ$  y  $\Theta_f^{\min} \approx -22^\circ$ . Como sabemos, los picos de difracción ocurren sólo en los ángulos para los cuales  $v_f$  es un entero. Para el caso aquí considerado, estas direcciones se muestran en la figura 7. Es claro a partir de la ec. (40), que  $\Theta_v$  será real sólo para un número restringido de enteros  $v$ . Estos se denominan los "canales abiertos". Para nuestro ejemplo los valores de  $v \geq 2$  y  $v \leq -5$  no dan origen a ángulos emergentes reales y estos canales se dice que son "cerrados". Es interesante hacer notar que no todos los canales abiertos son necesariamente clásicamente accesibles. En particular, no existen trayectorias clásicas que emerjan en las direcciones dadas por la ec. (40) para  $v = -3$  y  $-4$ . Estos canales se dice que son clásicamente inaccesibles.

De la figura 6 se encuentran fácilmente las 2 trayectorias que para un  $\mu$  entero dado cumplen con la relación (49): basta resolver la ecuación

$$\mathcal{V}_f(x_0) = \mu. \quad (105)$$

Si  $\mu$  corresponde a un canal clásicamente accesible ( $-2 \leq \mu \leq 1$ ) hay 2 soluciones reales  $x_0$  que cumplen con (105). Esto se muestra en forma esquemática en la figura 8.

Estamos ahora en condiciones de interpretar físicamente los términos  $p_{\mu,j}$ ,  $j = 1, 2$ . De la definición (51) y la ecuación (40) se obtiene que

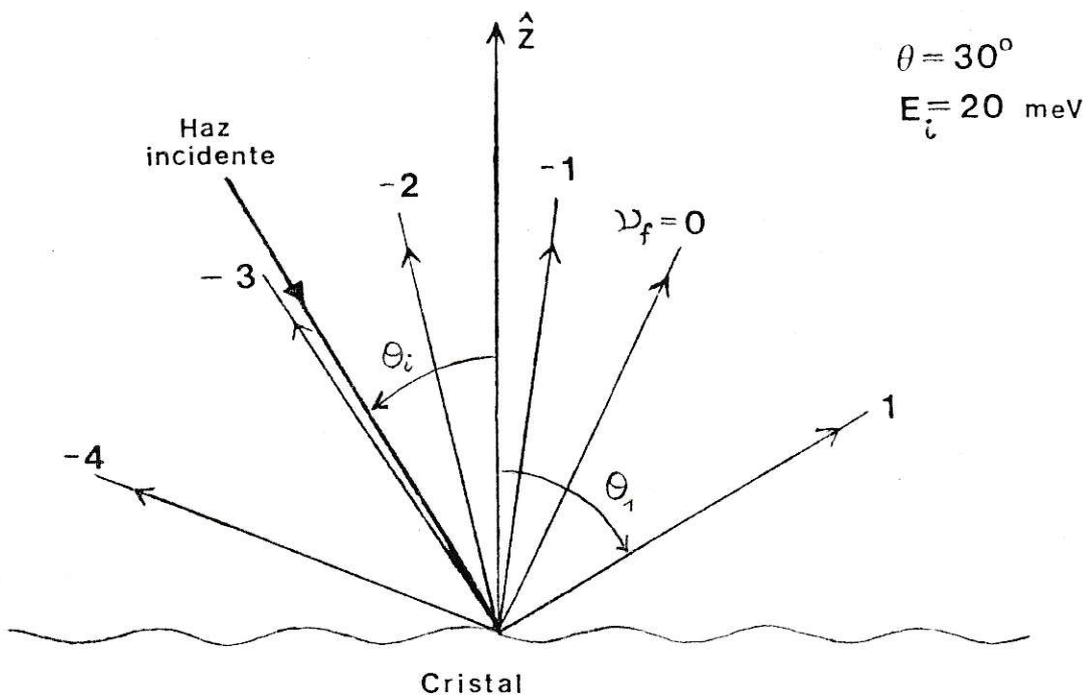


Fig. 7 Angulos de difracción para el ejemplo standard considerado en este trabajo.

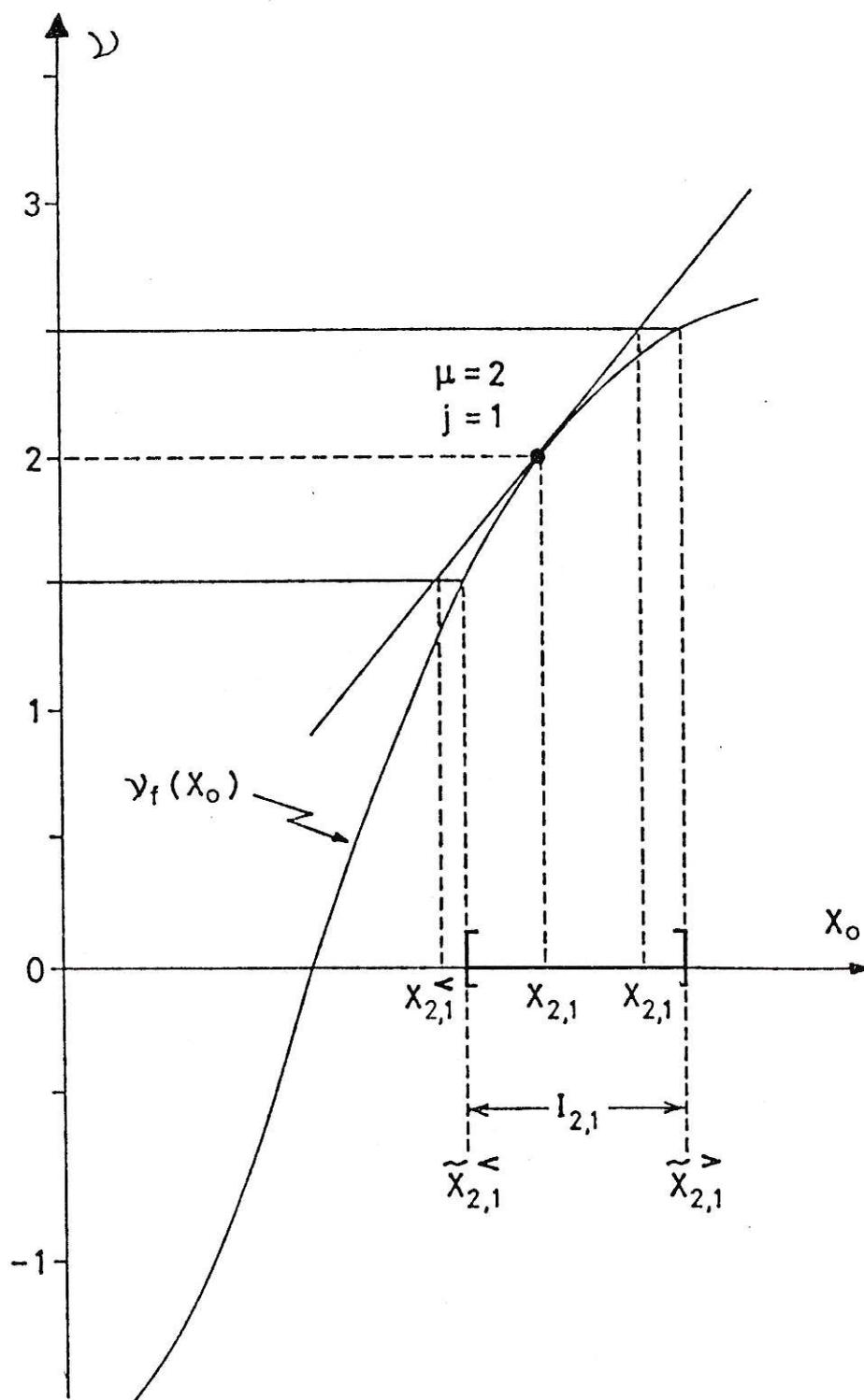


Fig. 8 Gráfico que muestra esquemáticamente el significado del intervalo  $x_{2,1}^{>} - x_{2,1}^{<}$  y  $I_{2,1}$ .

$$\begin{aligned}
 P_{\mu,j} &= \left| \frac{2\pi}{a^2 \frac{\partial}{\partial x_0} (k_f \text{sen} \theta_f)} \right|_{(j)} \\
 &= \frac{2\pi}{a^2 k_f} \left| \frac{1}{\frac{\partial}{\partial x_0} \left( \text{sen} \theta_i + v_f \frac{\lambda}{a} \right)} \right|_{(j)} \\
 &= \frac{2\pi}{\lambda k_f a} \left| \frac{1}{\frac{\partial v_f}{\partial x_0}} \right|_{(j)} = \left| \frac{1}{\frac{\partial v_f}{\partial x_0}} \right|_{(j)} \frac{1}{a} \quad (106)
 \end{aligned}$$

La expresión  $(\partial v_f / \partial x_0)_{(j)}$  es la pendiente de  $v_f(x_0)$  en el punto de fase estacionario  $j$ , de donde se deduce que (ver figura 8) que  $p_{v,j}$  es la razón entre el intervalo  $x_{v,j}^> - x_{v,j}^<$  y  $a$ . En otras palabras,  $(p_{v,1} + p_{v,2})$  es la probabilidad de que una partícula que incide sobre el cristal emerja con un ángulo  $\theta_f \in [\theta_f(v - \frac{1}{2}), \theta_f(v + \frac{1}{2})]$ , o equivalentemente con un  $v_f \in [v - \frac{1}{2}, v + \frac{1}{2}]$ . Esto justifica llamar  $p_{\mu,1} + p_{\mu,2}$  la probabilidad clásica.

Note sin embargo que esta interpretación es errónea si la curvatura de  $v_f(x_0)$  es importante. En particular cerca de los extremos de esta función  $\partial v_f / \partial x_0 \approx 0$ , lo que hace crecer desmesuradamente a los  $p_{\mu,j}$  invalidando esta interpretación. Por esta razón siempre se tiene que la suma de las probabilidades clásicas es siempre mucho mayor que 1.

Otra alternativa para definir una probabilidad clásica es tomar la función  $v_f(x_0)$  y obtener en forma exacta cuales son los intervalos

$$I_{\mu,j} =: \left[ \tilde{x}_{\mu,j}^<, \tilde{x}_{\mu,j}^> \right] \quad (107)$$

para los cuales se tiene que

$$x_0 \in I_{\mu,j} \implies v_f(x_0) \in \left[ \mu - \frac{1}{2}, \mu + \frac{1}{2} \right] \quad (108)$$

y luego definir

$$P_{\mu}^{\text{clas}} = \frac{1}{\alpha} \left( I_{\mu,1} + I_{\mu,2} \right) . \quad (109)$$

Para distinguir estas 2 formas de probabilidades clásicas denotemos la última por  $P_{\mu}^{\text{clas}}(2)$  mientras que la dada por la ecuación (54) por  $P_{\mu}^{\text{clas}}(1)$ .

## 2.- Las fases.

Un ingrediente esencial de los métodos semi-clásicos es la fase de la onda a lo largo de la trayectoria clásica.

La figura 9 muestra la fase  $\bar{\Delta}$  (ver ec. (94)) en función de  $x_0/a$ . Note que esta fase no es periódica. A

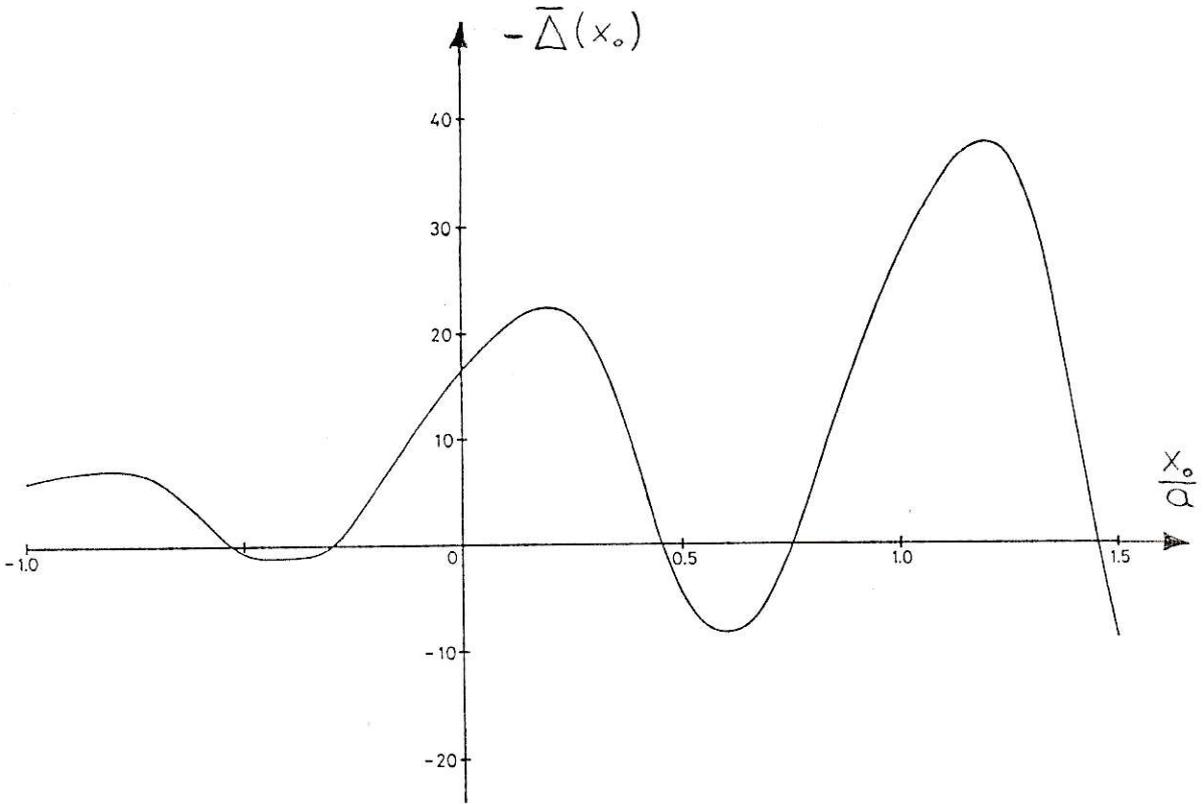


Fig. 9 Gráfico de la fase  $\bar{\Delta}$  en función de  $x_0/a$ .

partir de  $\bar{\Delta}$  se puede obtener la fase  $\Delta_{\mu}(x_0)$  que aparece en la aproximación semiclásica primitiva y uniforme (ec. (43)):

$$\Delta_{\mu}(x_0) = -\bar{\Delta}(x_0) + (\vec{K}_f - \vec{K}_{\mu}) \cdot \vec{F}_f. \quad (110)$$

La magnitud relevante en las aproximaciones semiclásicas primitiva y uniforme son las diferencias de fase

$$\Delta_{\nu}^{(2)} - \Delta_{\nu}^{(1)} = \Delta_{\nu}(x_{\nu,2}) - \Delta_{\nu}(x_{\nu,1}). \quad (111)$$

Para el mismo caso anteriormente considerado, esta diferencia de fase se muestra en la figura 10. Es claro que sólo nos interesa esta diferencia de fase si  $\nu$  es entero.

De la ecuación (53) se observa que la interferencia de las trayectorias será constructiva o destructiva dependiendo del valor de la diferencia de fase  $\Delta_{\nu}^{(2)} - \Delta_{\nu}^{(1)}$ . Por supuesto que esta diferencia de fase sólo puede ser evaluada para los  $\nu$  clásicamente accesibles. Las regiones donde la interferencia es constructiva y destructiva están indicadas en la figura 10.

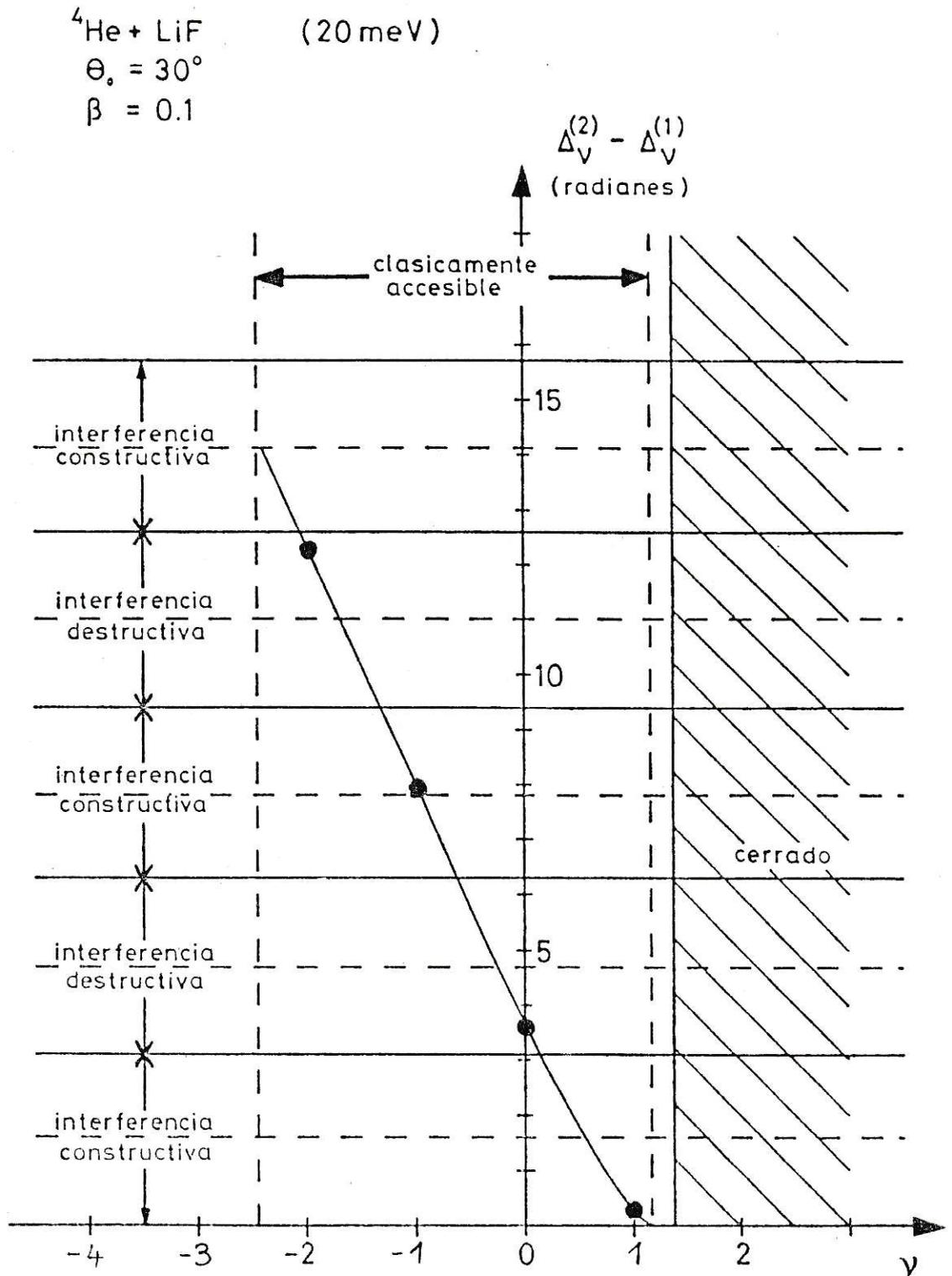


Fig. 10 Gráfico de la diferencia de fase  $\Delta_V^{(2)} - \Delta_V^{(1)}$  en función de  $\nu$ .

### 3.- Las probabilidades $P_\mu$ .

Una vez evaluadas las trayectorias clásicas y conocidas las fases  $\Delta_\mu$  se pueden evaluar las distintas expresiones para la probabilidad  $P_\mu$  de que una partícula incidente emerja por el canal  $\mu$ .

En la tabla II y figura 11 se muestran los resultados para el ejemplo considerado en las secciones anteriores.

Los resultados  $P_\mu^{\text{clas}}$  (1) (cuadrados unidos por una línea punteada) tienen la propiedad de divergir cuando estos se acercan a los límites donde los canales se tornan clásicamente inaccesibles. Esto se debe a que allí  $\partial v_f / \partial x_0 = 0$  y por lo tanto cada uno de los  $P_{\mu,j}$  ( $j=1,2$ ) (ver ec. (106)) diverge.

Los resultados  $P_\mu^{\text{clas}}$  (2) por supuesto que no tienen este problema, en efecto, la suma sobre todos los canales, por construcción, siempre dará 1.

Ninguno de los resultados clásicos está en buen acuerdo con los resultados cuánticos obtenidos por medio de un programa de canales acoplados. Los resultados cuánticos se vienen graficados por puntos sólidos. La línea sólida que une a estos puntos no tiene ningún significado, sólo se dibuja para guiar el ojo.

La aproximación semiclásica primitiva da un

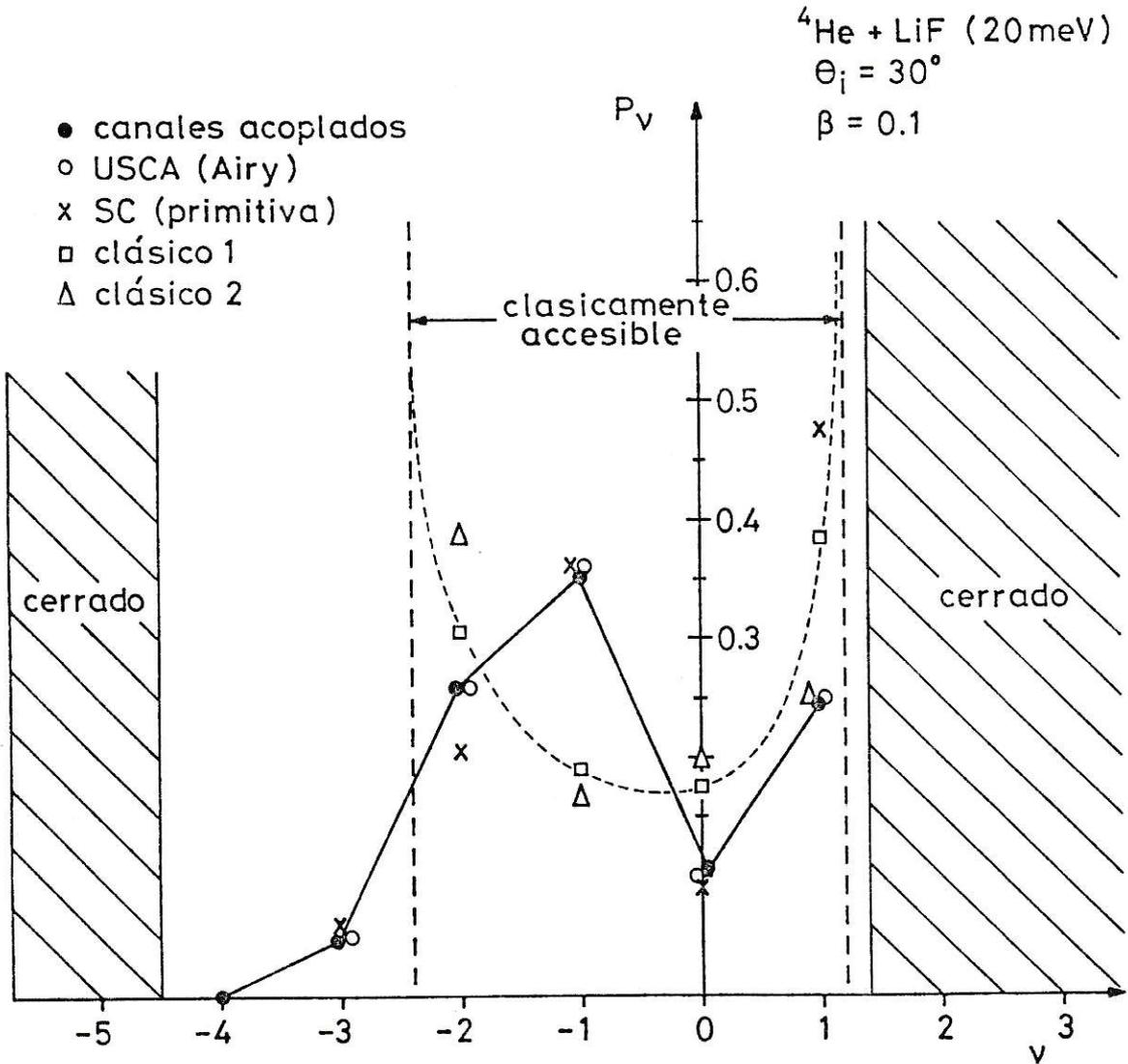


Fig. 11 Probabilidades de que la partícula incidente emerja por los distintos canales  $v$ .

Tabla II Magnitudes relevantes para el caso ilustrativo usado en el presente trabajo (es decir para  $\beta = 0.1$ ,  $\theta_i = 30^\circ$  y  $E = 20$  meV).

Magnitud \ canal $\mu$	-3	-2	-1	0	1	$\sum_{\mu} P_{\mu}$
raíz 1	0.220 + i 0.136	0.051	0.386	0.440	0.544	
raíz 2	0.220 - i 0.136	0.307	0.903	0.790	0.660	
$\phi_1$	27.290 + i 0.337	19.00	9.71	0.81	-7.35	
$\phi_2$	27.290 - i 0.337	18.65	17.79	4.47	-7.13	
$\Delta\phi = \Delta_{\mu}$		12.26	8.08	3.66	0.22	
$P_{\mu,1}$		0.192	0.064	0.067	0.179	
$P_{\mu,2}$		0.114	0.123	0.108	0.205	
$P_{\mu}^{\text{clas}}(1)$	0.0	0.31	0.19	0.18	0.39	1.06
$P_{\mu}^{\text{clas}}(2)$	0.0	0.30	0.17	0.20	0.25	1.00
$P_{\mu}^{\text{prim}}$	0.06	0.21	0.36	0.09	0.47	1.20
$P_{\mu}^{\text{uni}}$	0.05	0.26	0.36	0.10	0.25	1.01
$P_{\mu}^{\text{cuántico}}$	0.05	0.25	0.35	0.10	0.25	1.00

buen acuerdo con los resultados cuánticos mientras no se esté cerca del borde donde las trayectorias clásicas se vuelven clásicamente inaccesibles (líneas rectas punteadas). En este borde, igual que los resultados  $P_{\mu}^{\text{clas}}(1)$ , la aproximación semiclásica primitiva diverge.

Comparando los resultados  $P_{\mu}^{\text{clas}}(1)$  con  $P_{\mu}^{\text{prim}}$ , se observa inmediatamente el efecto del fenómeno de interferencia. En efecto, de la figura 10 se desprende que para  $\nu = -1$  la diferencia de fase es tal que la interferencia de las dos trayectorias clásicas es fuertemente constructiva. Esto se manifiesta en la figura 11 en el hecho que para  $\nu = -1$  el resultado  $P_{-1}^{\text{prim}}$  es mucho mayor que  $P_{-1}^{\text{clas}}(1)$ . Para  $\nu = -2$  y  $\nu = 0$  la diferencia de fase adquiere valores que hacen que la interferencia sea levemente destructiva, hecho que es corroborado en la fig. 11 en que los resultados de la aproximación semiclásica primitiva son levemente inferiores al resultado clásico.

Cuando  $\nu$  se acerca al borde donde las trayectorias clásicas se vuelven clásicamente inaccesibles, lo que ocurre es que también los 2 puntos de fase estacionaria se acercan uno al otro (ver por ej. la figura 6), de modo que se hace necesario usar la aproximación semiclásica uniforme de Airy. Esta última aproximación está en muy buen acuerdo con los resultados cuánticos usando el método de canales acoplados (7 canales).

#### 4.- Transiciones a canales clásicamente inaccesibles.

##### a) Soluciones complejas.

Si  $\mu$  corresponde a un canal clásicamente inaccesible, entonces la ecuación (105) no tiene soluciones reales. Sin embargo, si permitimos valores complejos para  $x_0$ , la ecuación (105) si tiene solución.

Es claro que si  $x_0$  es solución de la ecuación  $v_f(x_0) = \mu$ , entonces también lo será su complejo conjugado  $x_0^*$ . Estudiemos a continuación, para las aproximaciones semiclásicas primitiva y uniforme la forma cómo, usando estas soluciones complejas, se pueden obtener las transiciones a los canales clásicamente inaccesibles.

##### b) Aproximación semiclásica primitiva.

Recordemos que para obtener la aproximación semiclásica primitiva se evaluó la integral que aparece en la ec. (42) usando el método de fase estacionaria.

Si  $\mu$  corresponde a un canal clásicamente accesible la ecuación  $v_f(x_0) = \mu$  tiene dos soluciones reales  $x_{\mu,1}, x_{\mu,2}$  en el intervalo  $[0, a]$ . La figura 12a muestra para este caso las líneas de nivel de  $\text{Re}(i\Delta_\mu(x_0, z_0)) = C$  en el plano complejo  $x_0$ .  $\text{Re}(i\Delta_\mu(x_0, z_0))$  es la parte real

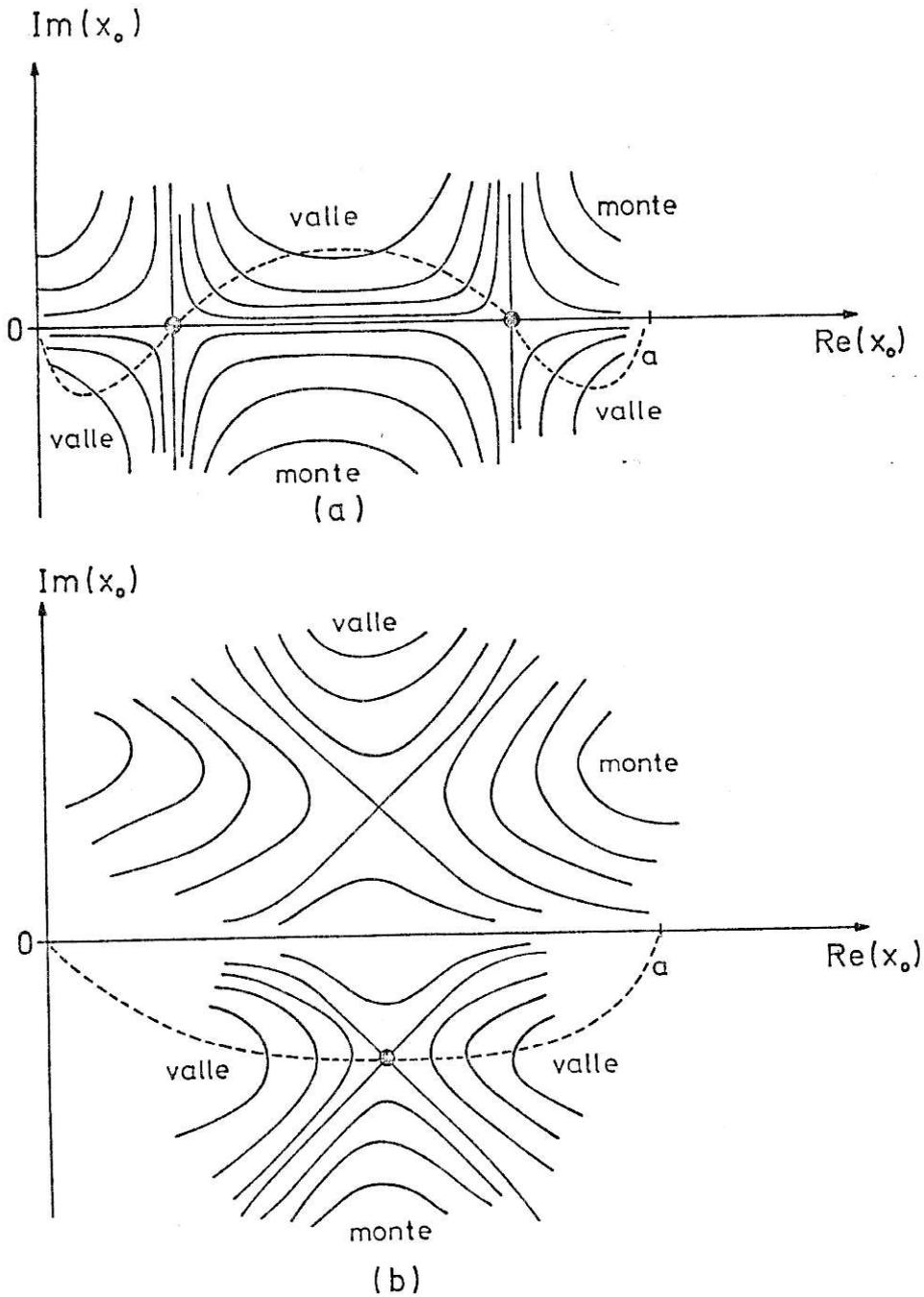


Fig. 12 Gráfico de  $\text{Re}(i \Delta_\mu(x_0)) = C$  en el plano complejo para a) el caso clásicamente accesible y b) el caso clásicamente inaccesible.

del exponente que aparece en el integrando de la ec. (42). Los puntos de fase estacionaria son puntos de ensilladura. Usar el método de la fase estacionaria en este caso significa modificar el camino de integración de manera tal que este atraviese los puntos de ensilladura de valle a valle por el camino de máxima pendiente. De esta forma a la integral sólo contribuye la vecindad del punto de ensilladura.

Si  $\mu$  corresponde a un canal clásicamente inaccesible la situación es completamente distinta. En este caso  $v_f(x_0) = \mu$  tiene dos soluciones complejas, una de ellas compleja conjugada de la otra. La topología de  $\text{Re}(i\Delta_\mu(x_0, z_0))$  en el plano complejo se muestra en la figura 12b. Ahora no es posible deformar el camino de integración de manera de cruzar ambos puntos de ensilladura; sólo se puede cruzar el de abajo. Esto significa que para los estados clásicamente inaccesibles sólo uno de los puntos de fase estacionaria contribuye a la integral. Como

$x_{\mu,1}^* = x_{\mu,2}$ , también se tiene que  $\Delta_\mu^{*(1)} = \Delta_\mu^{(2)}$ . De estos 2 términos el  $j$  que contribuye es el que tiene  $\text{Re}(i\Delta_\mu^{(j)}) < 0$  o sea  $\text{Im}(\Delta_\mu^{(j)}) > 0$ . Curiosamente esto significa que de los 2 términos que aparecen en la ec. (52), el que contribuye es el menor. Físicamente esto es lo que se esperaba: que la amplitud  $f_\mu$  decrezca exponencialmente a medida que uno elige canales cada vez más clásicamente inaccesibles (o sea a

medida que se penetra cada vez más en la "sombra").

Para la probabilidad  $p_{\mu}^{\text{prim}}$  se obtiene

$$P_{\mu}^{\text{prim}} = |P_{\mu,1}| e^{-2|\text{Im} \Delta_{\mu}^{(1)}|} \quad (112)$$

En la figura 11 se observa que esta receta para obtener la probabilidad semiclassical primitiva para el pico de difracción  $\nu = -3$  funciona bastante bien.

c) Aproximación semiclassical uniforme (Airy).

En este caso, el desarrollo realizado en la sección II.6, no se altera si se incluyen puntos de fase estacionaria complejas. En particular la ec. (78) sigue siendo válida. Sin embargo el hecho que los 2 puntos de fase estacionaria son uno el complejo conjugado del otro, introduce una simplificación. En efecto, para los canales clásicamente inaccesibles  $p_{\mu,1} = p_{\mu,2}$ , luego

$$\begin{aligned} P_{\mu}^{\text{unif}} &= 2 P_{\mu,1} (I_1 + I_2) \\ &= 4 P_{\mu,1} \pi |\xi|^{1/2} \text{Ai}^2(-\xi). \end{aligned} \quad (113)$$

En este caso  $\xi$  viene dado por

$$\begin{aligned} \xi &= \left[ \frac{3}{4} \left( \Delta_{\mu}^{(2)} - \Delta_{\mu}^{(1)} \right) \right]^{2/3} \\ &= \left[ - \left( \frac{3}{2} \operatorname{Im} \Delta_{\mu}^{(1)} \right)^2 \right]^{1/3} . \end{aligned} \quad (114)$$

Al extraer la raíz cúbica en la ec. (114) se debe elegir la solución real (que será negativa).

Es interesante mostrar como a partir del resultado dado por la ec. (113) se puede obtener la aproximación primitiva (ec. (112)). Para esto usamos la relación asintótica [9]:

$$Ai(-\xi) \underset{(-\xi) \gg 1}{\approx} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (-\xi)^{1/4} e^{-\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2}} . \quad (115)$$

Sustituyendo (115) en (113) se obtiene el resultado (112).

En forma análoga se puede demostrar que también para los canales clásicamente accesibles

$$P_{\mu}^{\text{unif}} \xrightarrow{|\xi| \gg 1} P_{\mu}^{\text{prim}} \quad (116)$$

esto indica que la aproximación uniforme es en general superior o al menos equivalente a la aproximación semiclásica primitiva.

d) La necesidad de evaluar trayectorias complejas.

Para evitar tener que evaluar trayectorias clásicas complejas es usual [3,4] aproximar la función  $v_f(x_0)$  por una parábola cerca de los extremos y encontrar los puntos de fase estacionaria resolviendo una simple ecuación cuadrática. Una vez encontrados estos puntos de fase estacionaria se evalúa las demás magnitudes de interés en estos puntos por medio de un esquema de extrapolación.

Esta forma de evitar la evaluación de trayectorias clásicas ha resultado ser muy exitoso en otras aplicaciones de estos métodos semiclásicos.

Sin embargo, para los casos analizados en este trabajo, el esquema de extrapolación recién planteado no sirve por ser demasiado impreciso. Se intentaron numerosas formas para realizar esta extrapolación, pero lamentablemente siempre el error introducido en magnitudes como la fase  $\Delta_\mu$ , fue demasiado grande como para que los resultados tuviesen algún significado.

Por este motivo se tuvo que optar por escribir un programa computacional que efectivamente encuentra las trayectorias clásicas también para condiciones iniciales complejas y resolver numéricamente la ecuación

$$v_f(x_0) = \mu.$$

## 5.- Resonancias.

En las siguientes secciones dejaremos de lado el caso particular hasta aquí considerado y realizaremos un barrido en ángulo y energía incidente como también variaremos la rugosidad de la superficie.

Comenzamos con un estudio de la intensidad del pico especular a medida que se varía el ángulo de incidencia  $\theta_i$ . La figura 13 muestra la intensidad especular en función de  $\theta_i$  (la energía incidente y la rugosidad se mantuvieron en  $E_i = 20$  MeV y  $\beta = 0.1$  respectivamente). En la figura 13 se observa que los resultados cuánticos (línea sólida) tienen para ciertos ángulos un comportamiento resonante. Como es bien sabido, estas resonancias se obtienen cuando la energía de un canal cerrado coincide con la energía de algún estado ligado del potencial  $V_0(z)$ . El potencial que estamos usando en este trabajo tiene 3 estados ligados (ver fig. 4) para  $\theta_0 = 40^\circ$  el canal 1 se cierra y este umbral (o "threshold") se observa claramente en la intensidad del canal especular. Para  $\theta_0 = 41^\circ, 44.5^\circ$  y  $50.5^\circ$  la energía cinética en la dirección  $z$  para el canal 1 es igual a la energía  $\varepsilon_2, \varepsilon_1$  y  $\varepsilon_0$  de los estados ligados del potencial  $V_0$ . Para estos ángulos se observan en la intensidad de los picos de difracción finas resonancias. Para designar estos fenómenos se usó la notación  $\left(\begin{smallmatrix} n \\ i \end{smallmatrix}\right)$  introdu-

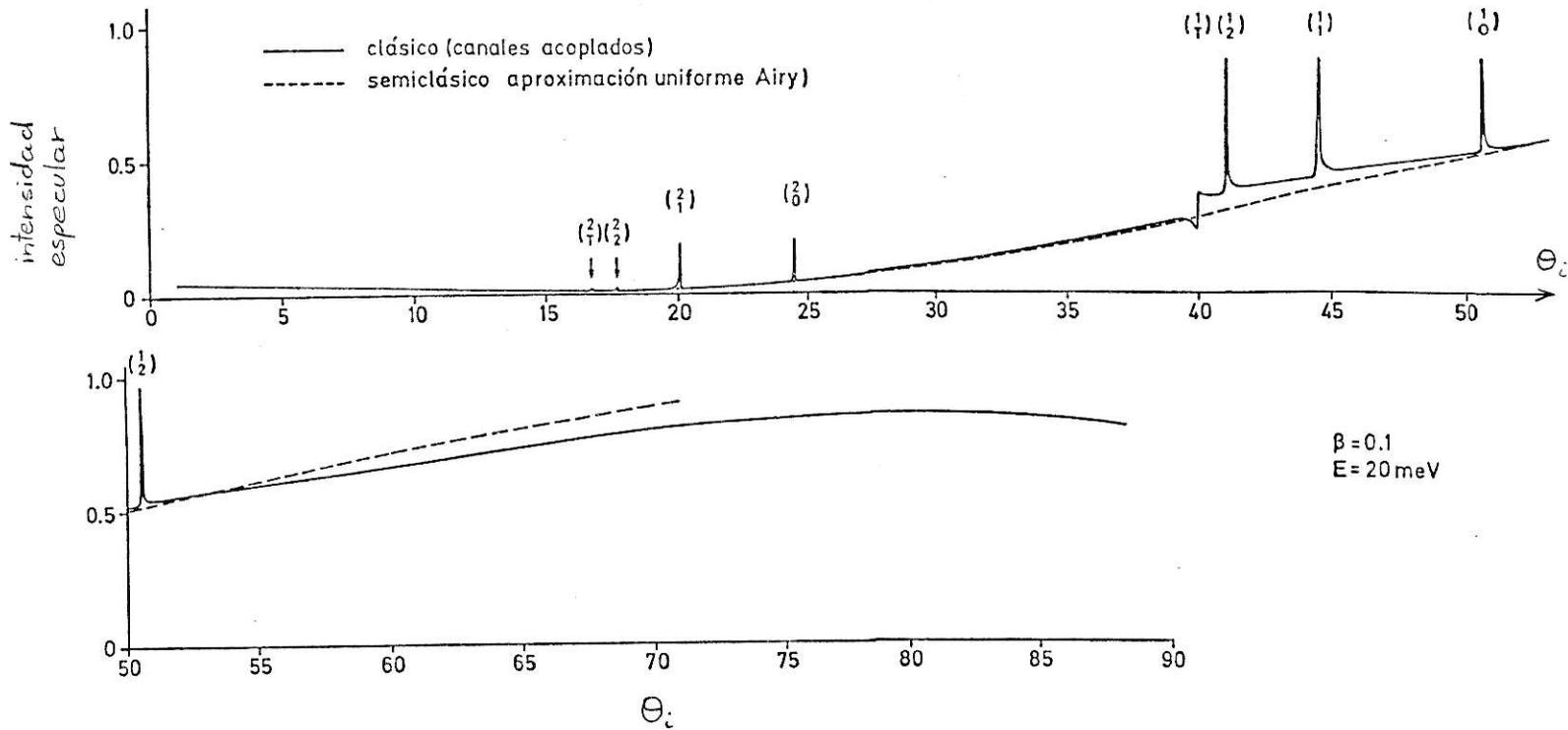


Fig. 13 Probabilidad de que la partícula incidente emerja por el pico especular en función del ángulo de incidencia  $\theta_i$ . La notación usada para denotar las resonancias se explica en el texto.

cida por Weare [13], donde  $n$  denota el canal que entra en resonancia con el estado ligado de energía  $\varepsilon_i$  ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ) del potencial  $V_0(z)$ . El umbral del canal  $n$  se denota por  $\left(\frac{n}{T}\right)$ .

Para mostrar explícitamente la relación entre los estados ligados del potencial  $V_0(z)$  y las resonancias se grafica en la figura 14 la relación de dispersión

$$\varepsilon(k_x, i) = \varepsilon_i + \frac{\hbar^2}{2M} k_x^2, \quad (117)$$

reducida a la primera zona de Brillouin. En la figura 15 se muestra un pequeño segmento (alrededor de  $E = 20$  meV) de la figura 14 junto con la correspondencia  $k_x \rightarrow \theta_i$  para  $E = 20$  meV. De esta figura se desprende que el canal 1 tiene su umbral en  $40^\circ$  y entra en resonancia con los niveles  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_0$  para  $\theta_i \approx 41^\circ$ ,  $44.5^\circ$  y  $51^\circ$  respectivamente; el canal 2 tiene su umbral para  $\theta_i \approx 16.5^\circ$  y entra en resonancia con los niveles  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_0$  para  $\theta_i \approx 17.5^\circ$ ,  $20^\circ$  y  $24.5^\circ$  respectivamente, etc. Esto explica totalmente las resonancias observadas en la fig. 13.

El acuerdo entre los resultados cuánticos y los semiclásicos (con la aproximación uniforme de Airy) es bueno mientras no se esté en la vecindad de una resonancia y mientras los ángulos de incidencia no sean demasiado grandes.

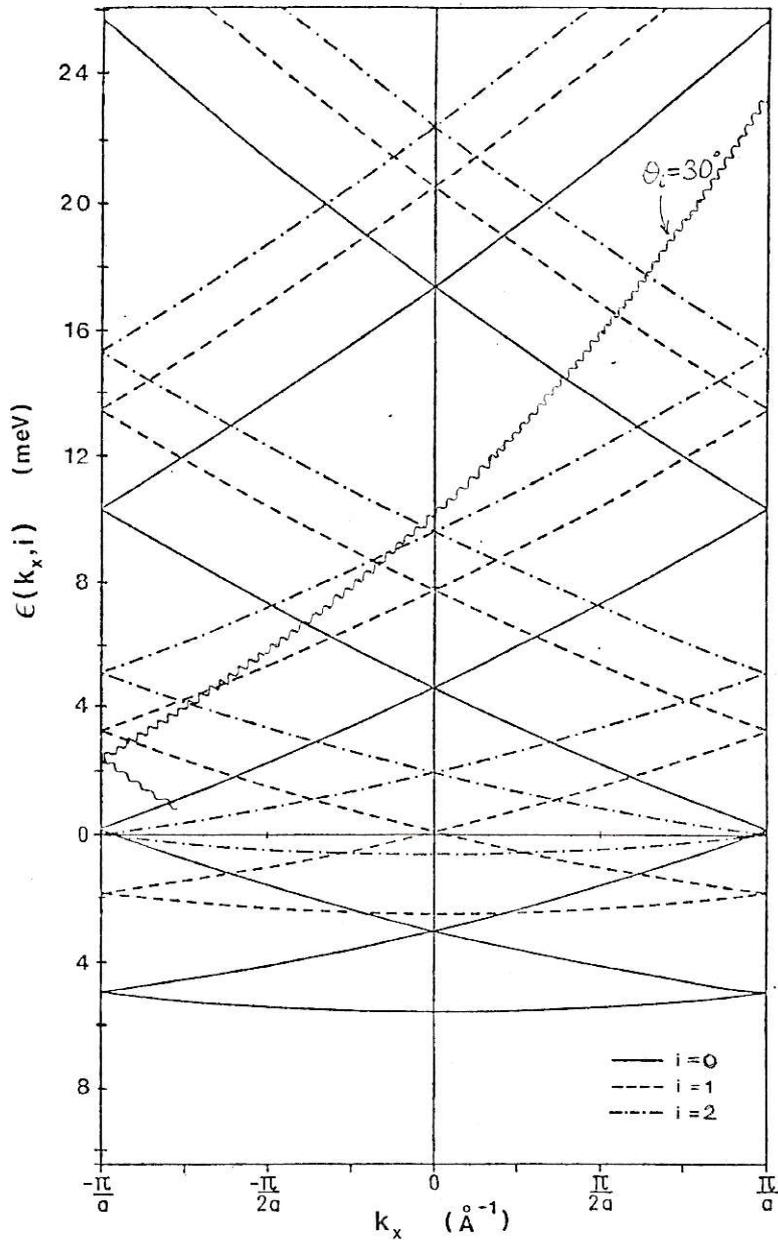


Fig. 14 Gráfico de la relación de dispersión dada por (117) reducida a la primera zona de Brillouin. Para  $\theta_i = 30^\circ$  fijo, la línea ondulada indica el vector de onda recíproco  $k_x$  para cada energía incidente  $\epsilon$ .

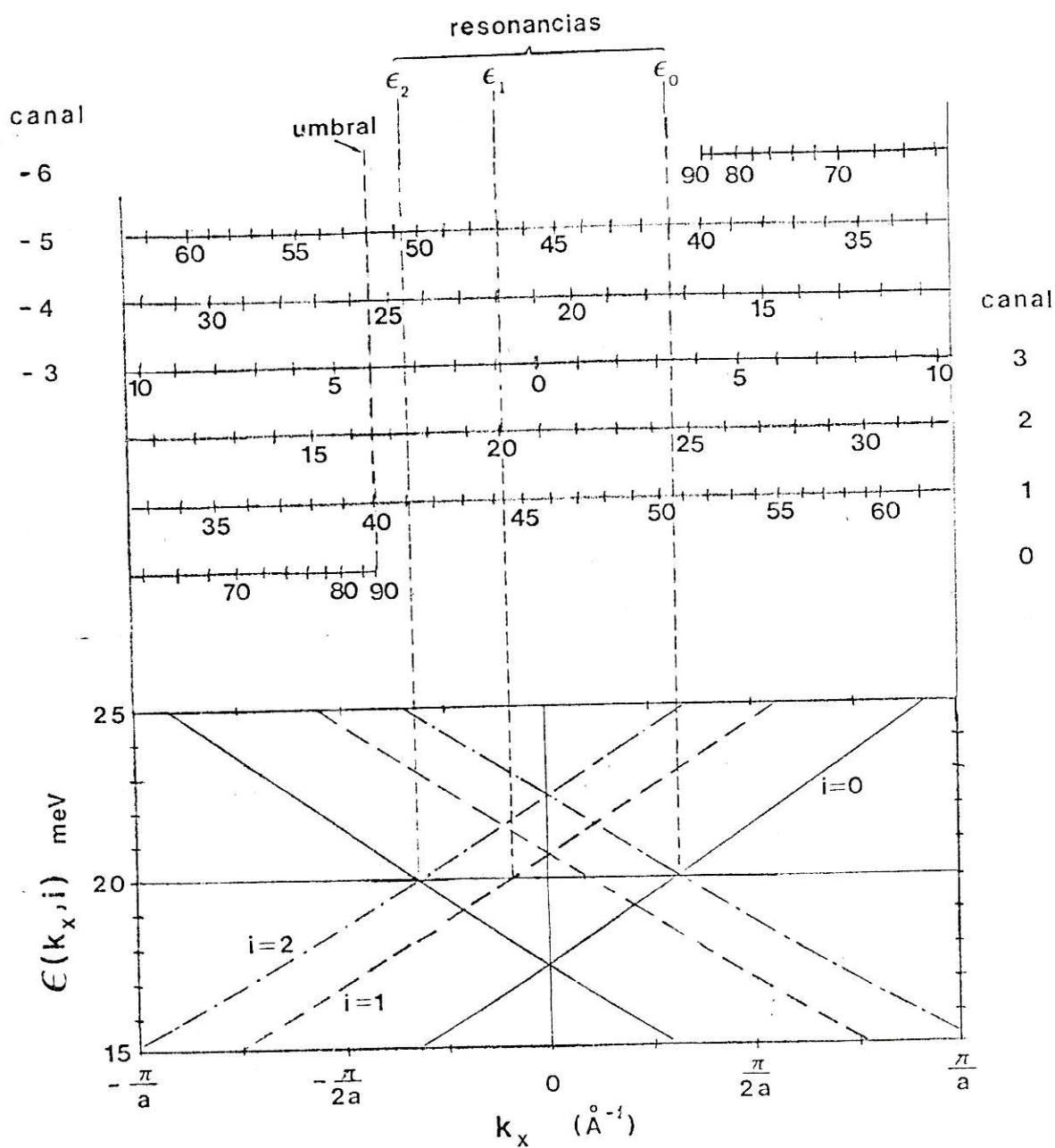


Fig. 15 Segmento de la figura 14 con la correspondencia

$$k_x \rightarrow \Theta_i \text{ para } E = 20 \text{ meV.}$$

El hecho que no haya acuerdo entre los resultados cuánticos y los semiclásicos en la vecindad de las resonancias significa que o el fenómeno de resonancias es implícitamente un fenómeno de orden más alto en  $\hbar$  que el primero y por lo tanto no descriptible con un formalismo que es una generalización de la aproximación WKB o en la expresión semiclásica no se incluyeron la contribución de todas las trayectorias clásicas posibles. Esta última afirmación se basa en el hecho que permitiendo incrementos complejos en el tiempo, es posible obtener trayectorias clásicas distintas. Esto en algunos trabajos anteriores ha sido usado para obtener trayectorias clásicas que penetran a través de barreras de potencial [14].

En el presente trabajo, intentos preliminares mostraron que la estructura analítica de  $v_f(x_0)$  era demasiado complicada como para tener esperanza de poder continuar mejorando los resultados ya obtenidos mediante la inclusión de trayectorias clásicas adicionales.

Para ángulos de incidencia grandes, aparecen dificultades adicionales. El origen de estas se debe a que las trayectorias clásicas pueden quedar atrapadas (ver fig. 16). Cuando esto ocurre, la función  $v_f(x_0)$  toca, para ciertos valores de  $x_0$ , la región cerrada (ver fig. 17). En particular para el canal  $\mu = 1$ , no se pueden encontrar las aproximaciones semiclásicas antes mencionadas. Para el

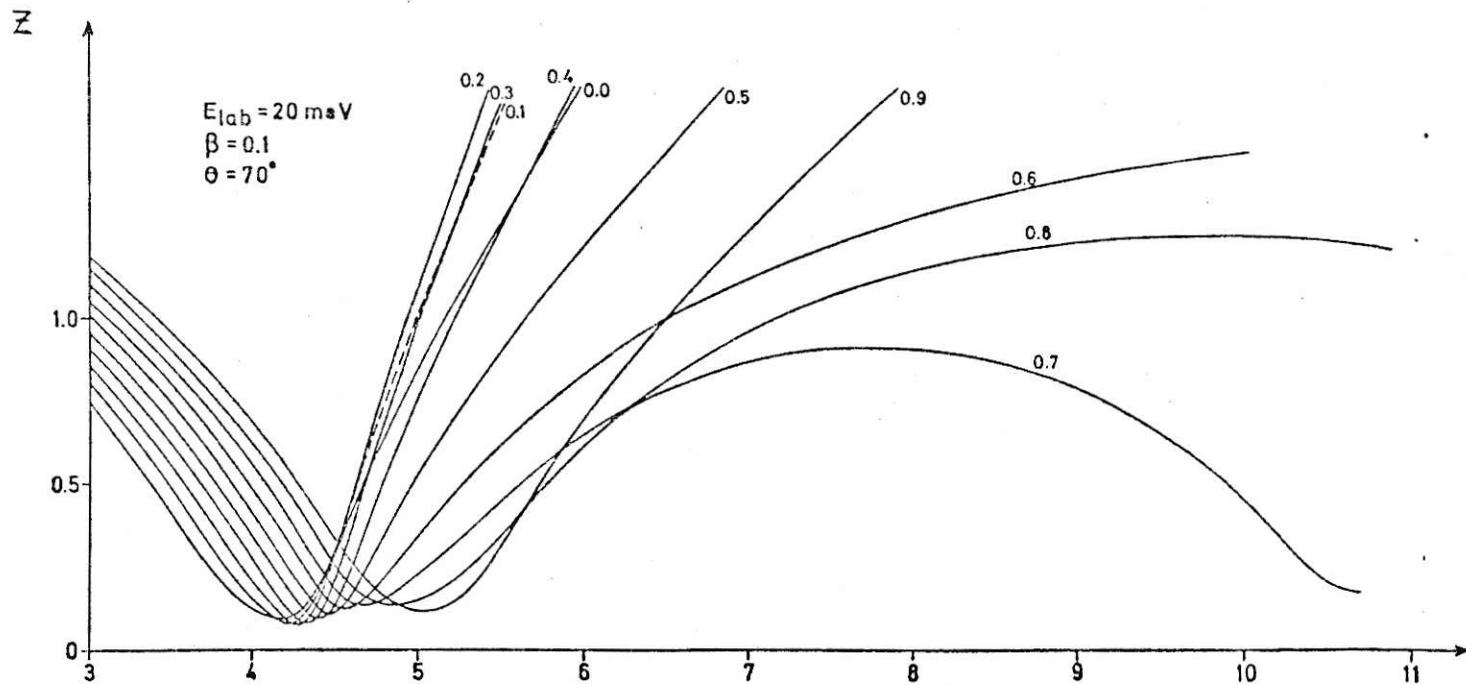


Fig. 16 Trayectorias clásicas, nótese que la trayectoria asociada a  $x_0 = 0.7$  queda atrapada momentáneamente rebotando algunas veces sobre el cristal antes de emerger.

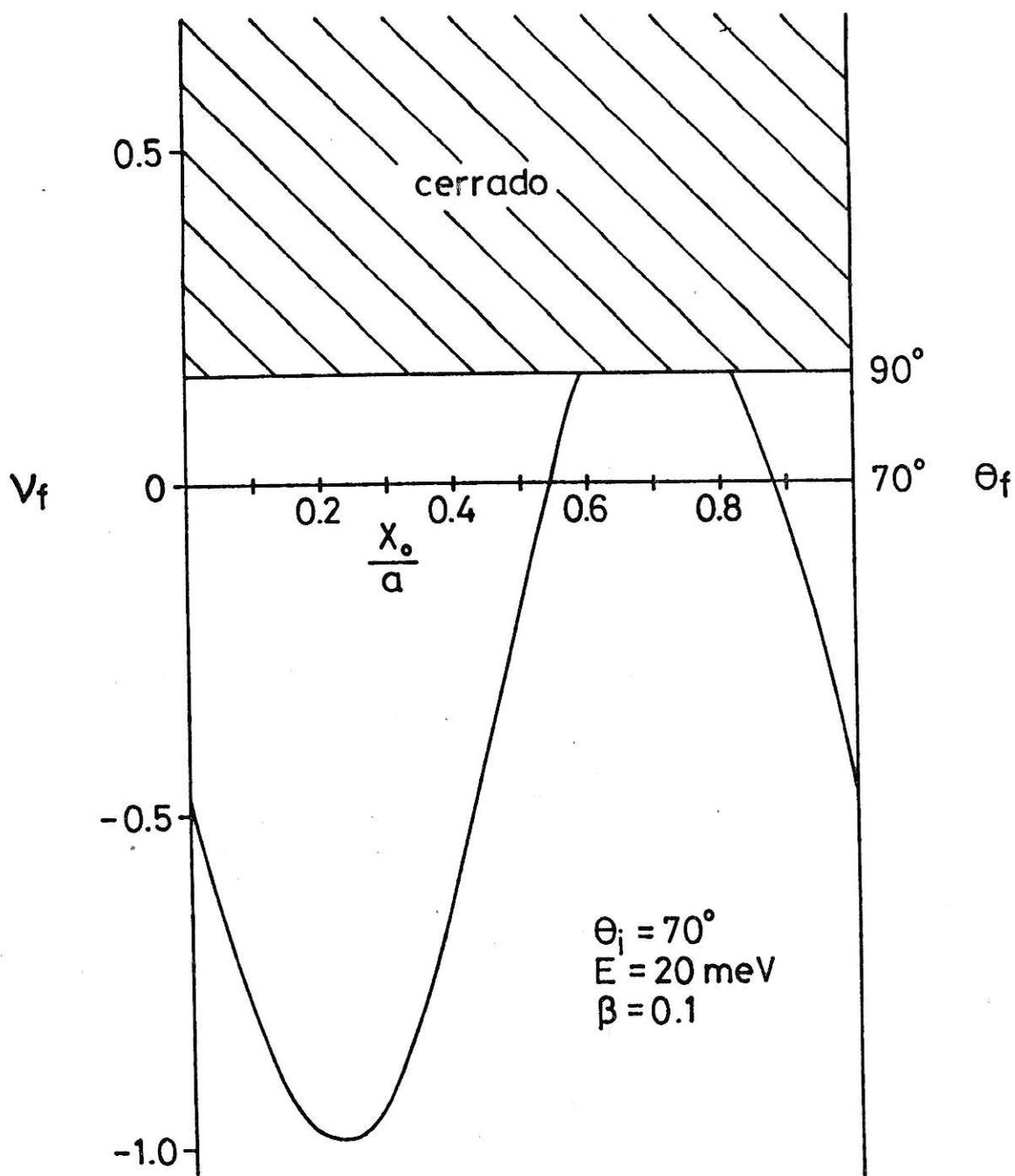


Fig. 17. Función número cuántico para  $\theta_i = 70^\circ$ . En este caso  $v_f(x_0)$  toca a la región cerrada y por lo tanto hay un intervalo de  $x_0$  para el cual las trayectorias clásicas son "atrapadas" por el cristal.

canal especular ( $\mu = 0$ ) todavía se pueden encontrar puntos de fase estacionaria tal que  $v_f(x_0) = 0$ , sin embargo, al usar estos en la expresión para la aproximación semiclásica uniforme de Airy, el resultado comienza a desviarse cada vez más del cuántico a medida que aumenta el ángulo de incidencia  $\theta_i$  (ver fig. 13).

#### 6.- Resultados en función de $E_i$ .

La figura 18 muestra el resultado para la intensidad del pico especular (con  $\theta_i = 30^\circ$  y  $\beta = 0.1$ ), en función de la energía incidente usando la aproximación semiclásica uniforme de Airy y el método cuántico (canales acoplados). Los cálculos cuánticos fueron realizados con los canales  $\nu = -3, -2, -1, 0, 1, 2$ . Los resultados cuánticos muestran pequeñas oscilaciones entre 11 y 20 meV. Para estas energías el acuerdo de los resultados semiclásicos con los cuánticos es razonablemente bueno.

Para energías menores se está en una región de energía en que hay resonancias y umbrales. En la figura 14 se ha indicado con una línea ondulada el vector de onda recíproco  $k_x$  que corresponde a cada energía  $\mathcal{E}$  para  $\theta_i = 30^\circ$ . Se deduce que para energías entre 18 y 14 meV el estado  $\nu = -4$  pasa por un umbral y entra en resonancia con los estados ligados  $\mathcal{E}_2, \mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_0$ . Sin embargo, el es-

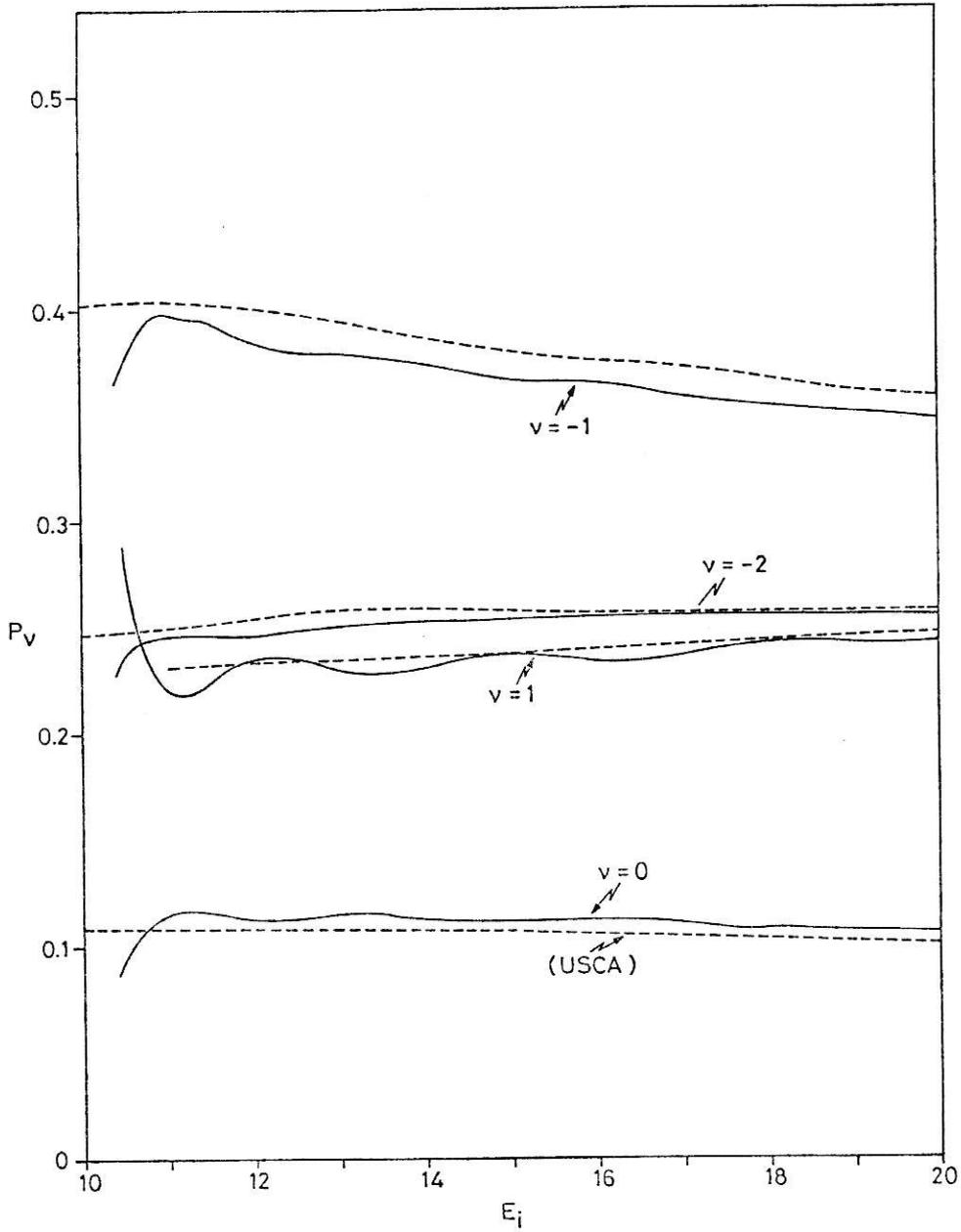


Fig. 18 Probabilidades de difracción cuánticas (líneas llenas) y semiclásicas (líneas punteadas) en función de la energía incidente para  $\theta_i = 30^\circ$  y  $\beta = 0.1$ .

tado  $\nu = -4$  está muy alejado de los canales con probabilidad grande y por lo tanto ni siquiera fue incluido en el cálculo cuántico. Por esta razón no se observan estas resonancias en la figura 18. Para energías menores que 11 meV los canales  $\nu = 1$  y  $\nu = -3$  pasan por un umbral y entran posteriormente, en resonancia con los estados ligados del potencial  $V_0(z)$  (ver fig. 14). Una pequeña sección de esta región se muestra en la figura 19. Aquí el resultado cuántico tiene gran estructura mientras que los resultados semiclásicos siguen variando suavemente en función de la energía, estando en total desacuerdo con los resultados exactos. La identificación de las resonancias que se ven en la figura 19 es la que tentativamente se desprende de la figura 14. La figura 20 muestra que hay una región entre  $\sim 1.5$  y  $2.9$  meV en que la intensidad especular varía suavemente tal como se esperaba de la figura 14. En esta región de energía el método semiclásico tiene serios problemas. La figura 21 muestra las trayectorias clásicas y la figura 22 la función  $\nu_f(x_0)$ . La aproximación semiclásica uniforme da para el canal especular  $P_0 = 0.086$  y para el canal  $\nu = 1$  (que es el único otro canal abierto para esta energía y ángulo de incidencia)  $P_1 = 0.5655$ . El resultado dista mucho de ser satisfactorio.

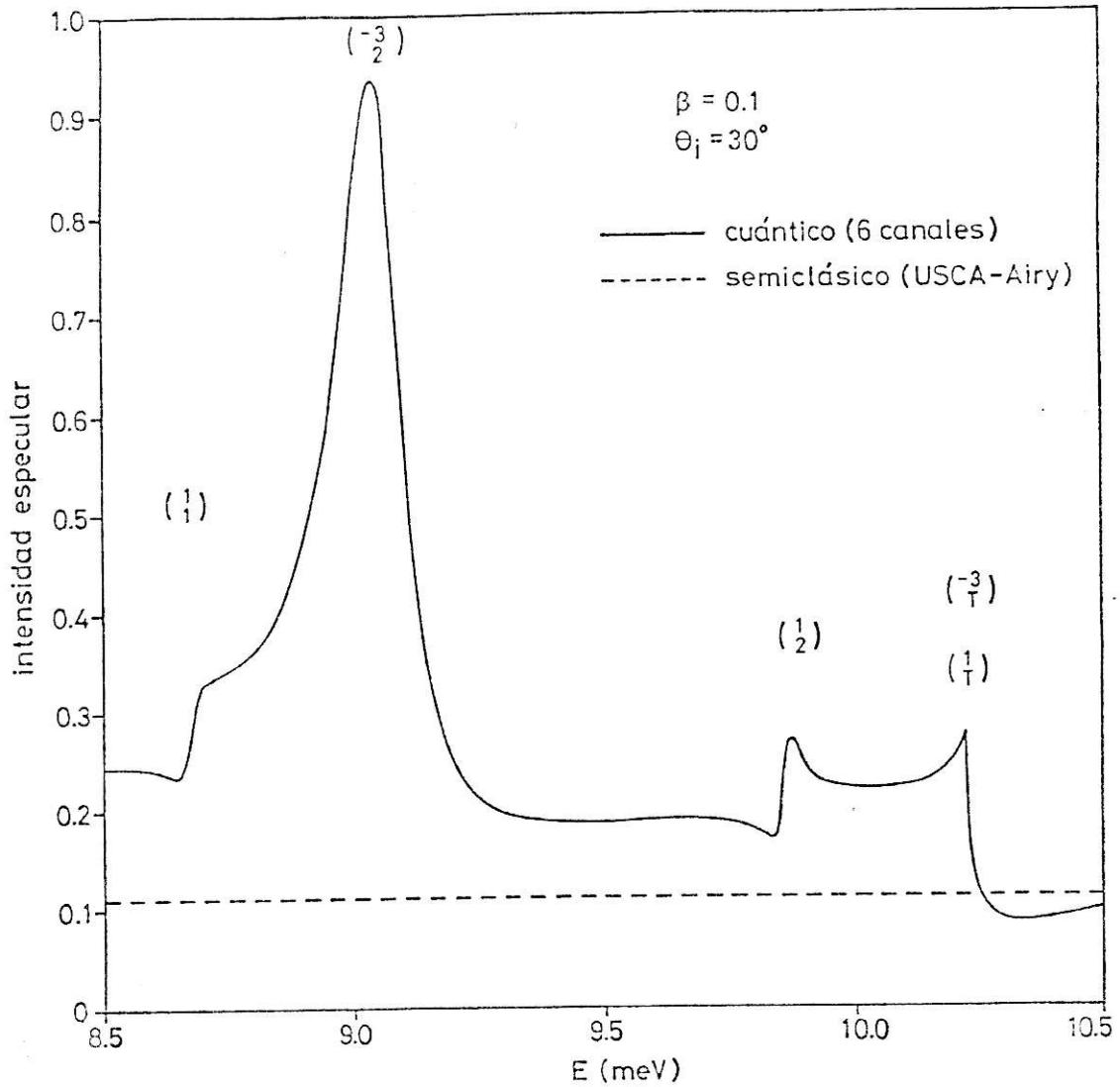


Fig. 19 Intensidad de pico especular para el mismo caso de la figura 18 pero para energías algo menores.

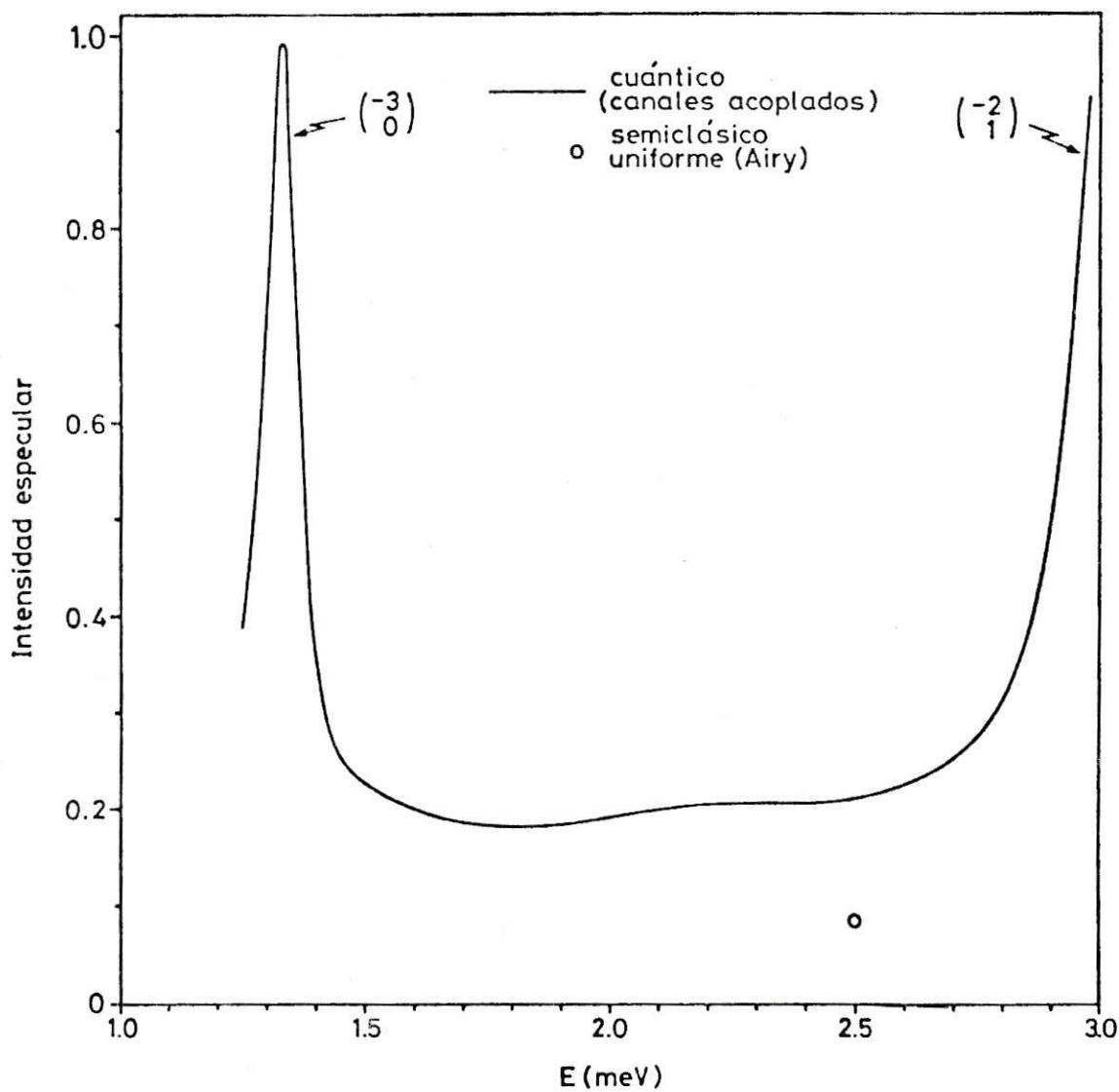


Figura 20. Igual que figura 19 pero para energía incidente entre 1.0 y 3.0 meV.

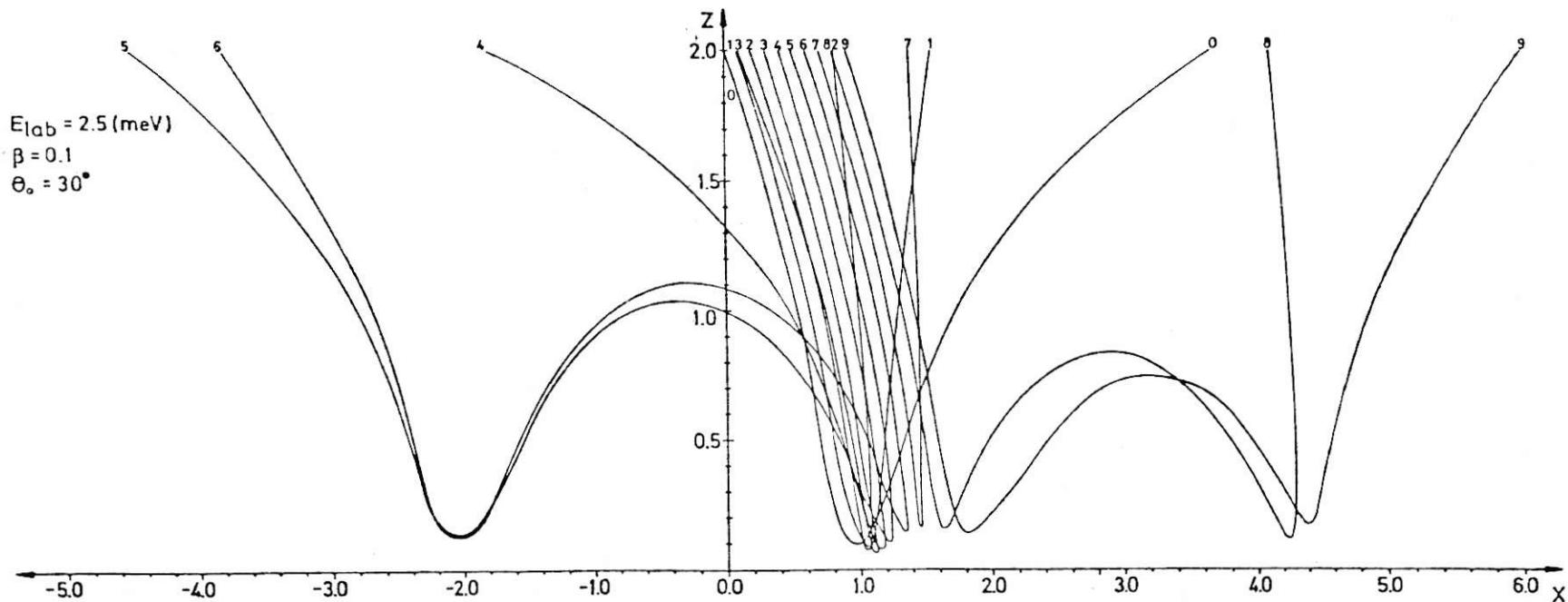


Figura 21. Trayectorias clásicas incidiendo sobre el cristal con  $E_i = 2,5 \text{ meV}$  y  $\theta_0 = 30^\circ$ , se observa como algunas trayectorias son recorridas en la dirección de las X negativas y otras quedan atrapadas por el potencial volviendo a rebotar en el cristal.

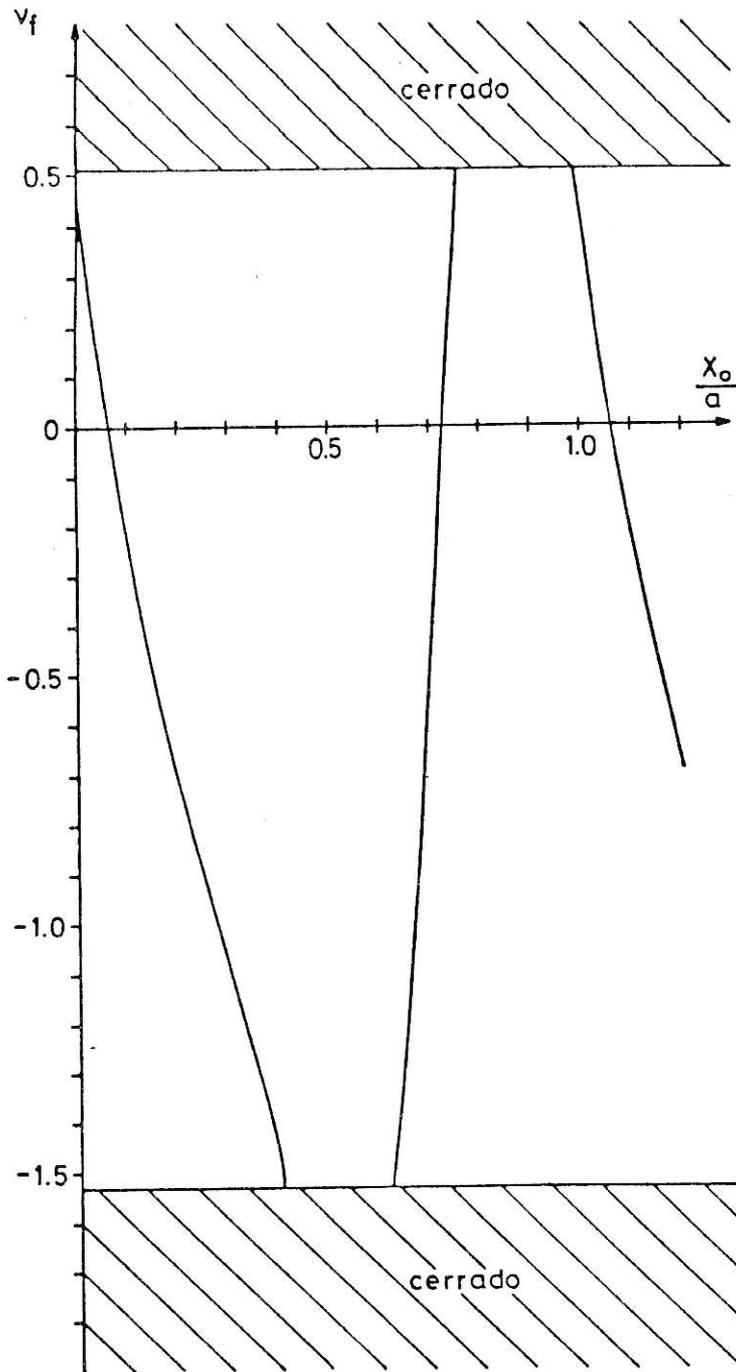


Figura 22. Función  $v_f(x_0)$  para el caso mostrado en la figura 21.

## 7.- Resultados en función de la rugosidad.

La figura 23 muestra los resultados que se obtienen si la energía y el ángulo de incidencia se mantienen fijos ( $E = 20 \text{ meV}$ ,  $\Theta_i = 30^\circ$ ) y se varía la rugosidad  $\beta$ . Para rugosidades pequeñas la aproximación semiclásica uniforme de Airy deja de ser válida para el canal especular. Para  $\mu = 0$  la fase  $\Delta_\mu$  es periódica; si además  $\beta$  es pequeño,  $\Delta_\mu$  función es muy plana en función de  $x_0$  y tiene más bien la forma de una función trigonométrica tipo coseno. En ese caso, aproximar esta función por una cúbica, tal como se hizo en la sección (II-6), no es lo más adecuado. En esos casos lo que conviene hacer es mapear  $\Delta_\mu(x,z)$  sobre una función trigonométrica del tipo coseno y repetir los desarrollos de la sección (II-6). Lo que se obtiene se conoce bajo el nombre de aproximación semiclásica uniforme de Bessel por aparecer en las expresiones finales las funciones de Bessel en lugar de las de Airy [15]. El uso de la aproximación uniforme de Bessel es algo más complicada que la de Airy y no se intentó en el presente trabajo.

### 8.- La representación integral.

En la figura 23 también se muestran los resultados que se obtienen al usar la representación integral para las probabilidades  $P_\mu$  (ver ec. (96)). Para rugosidades pequeñas no hay problemas pues  $X_f$  como función de  $x_0$  es una función monótona (ver fig. 24) y por lo tanto la raíz  $\sqrt{d\bar{x}_f/dx_0}$  en el integrando no causa problemas. Para obtener la integral con precisión se computaron 100 trayectorias clásicas en el intervalo  $[0, a]$ .

Sin embargo con  $\beta$  mayores hay problemas. Con  $\beta \approx 0.6$ , para las condiciones iniciales consideradas en la figura 24 (es decir  $E = 20$  meV y  $\Theta_i = 30^\circ$ ),  $X_f(x_0)$  ya no es una función monótona (ver fig. 24) y se tiene el serio problema de interpretar correctamente el término  $\sqrt{d\bar{x}_f/dx_0}$ . Ninguno de los intentos que se realizaron dieron un resultado satisfactorio. Entre estos vale la pena mencionar el siguiente: En principio la integral en la ecuación (96) no tiene por que evaluarse a lo largo del eje  $x_0$  real. O sea uno podría agregarle a  $x_0$  una parte imaginaria constante sin que el resultado varíe. Efectivamente, al proceder de esta forma para  $\beta$  pequeño, el resultado final no cambia. Lo atractivo de esta modificación es que en este caso  $\sqrt{d\bar{x}_f/dx_0}$  es siempre un número complejo que ahora no pasa por el origen para valores de  $\beta$  mayores y por lo tanto uno solo debe

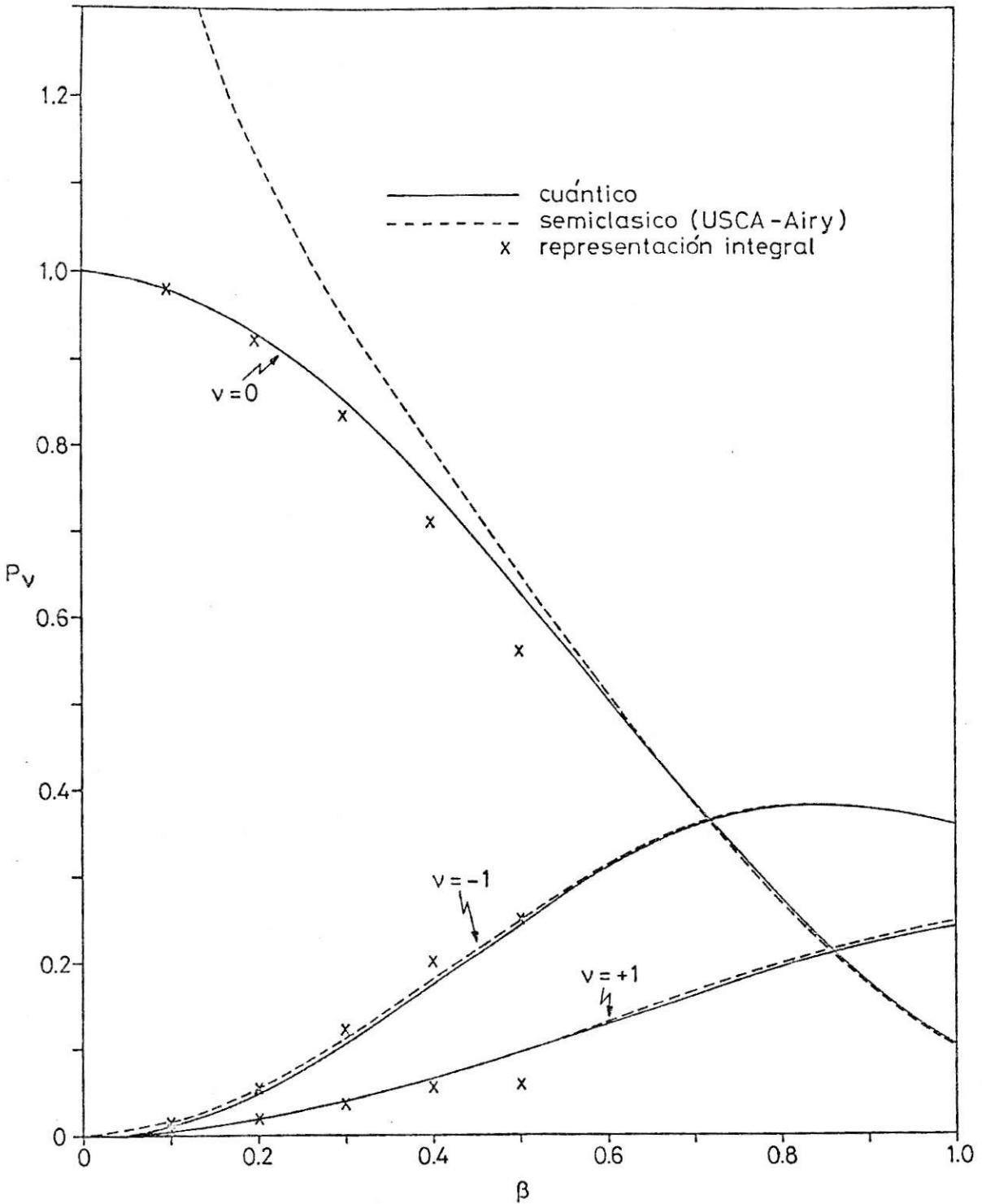


Fig. 23 Intensidades de difracción en función de la rugosidad para  $E_i = 20$  meV,  $\theta_i = 30^\circ$ .

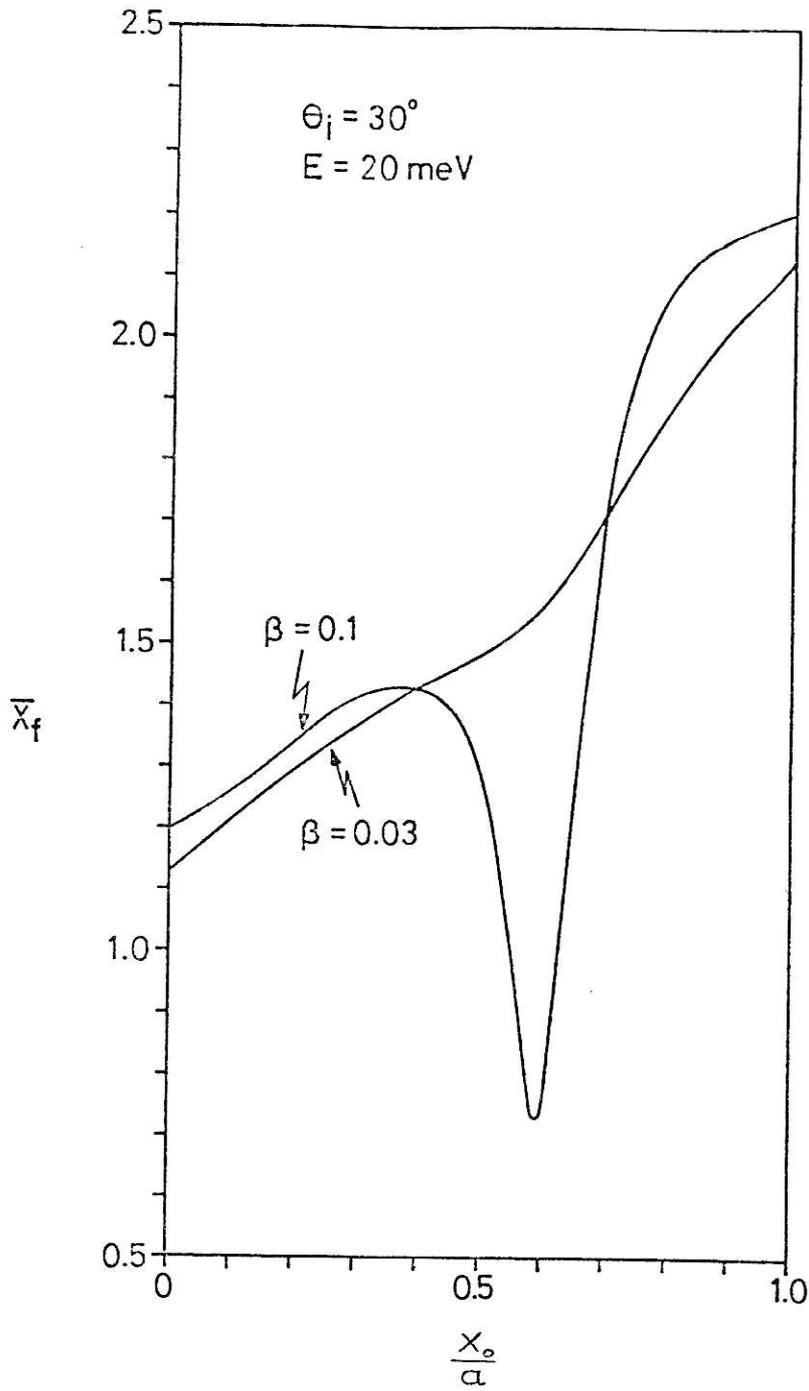


Fig. 24  $\bar{x}_f$  en función de la posición  $x_o$ .

preocuparse de que la raíz no cambie de hoja. Sin embargo esta idea no prosperó. Al aumentar  $\beta$ , incluso una ya muy pequeña parte imaginaria agregada a  $x_0$  hacia variar fuertemente el resultado final. El origen de esta dificultad no se siguió investigando.

#### 9.- Tiempos de computación.

Los programas numéricos usados en este trabajo no han sido optimizados pero aún así es posible sacar algunas conclusiones sobre los tiempos de computación. Para obtener las probabilidades de difracción a todos los canales abiertos, para una energía y ángulo de incidencia fijo, el método cuántico con 6 canales acoplados requiere de aproximadamente 1 seg. cpu. El tiempo de computación con el programa de canales acoplados aumenta aproximadamente con el cuadrado del número de canales.

Los programas usando los métodos semiclásicos típicamente requieren para el mismo caso de alrededor de 100 seg. cpu. El aumento de este tiempo con el número de transiciones a calcular es aproximadamente lineal.

Otra desventaja de los programas semiclásicos para este problema es que son difíciles de automatizar y requieren de una constante interacción con el usuario. El programa cuántico por otra parte, es de fácil manejo y funciona sin intervención del usuario.

#### IV CONCLUSIONES.

Con respecto a la aplicación de métodos semiclásicos para el scattering de átomos térmicos sobre superficies cristalinas corrugadas en sólo una dirección se puede concluir lo siguiente:

- a) Los métodos semiclásicos son atractivos por la descripción intuitiva que dan del fenómeno.
- b) La aproximación semiclásica uniforme de Airy funciona bien (con un error  $< 1\%$ ) en muchos casos.
- c) Los métodos semiclásicos no son capaces de describir los fenómenos de resonancias y umbrales. Esto es un serio defecto de estos métodos y los hace poco interesantes para este tipo de aplicaciones.
- d) El método semiclásico uniforme de Airy deja de dar resultados satisfactorios cuando la energía incidente es muy pequeña o los ángulos de incidencia son muy grandes. En ambos casos comienzan a existir trayectorias clásicas que son atrapadas por el potencial atractivo.
- e) Para rugosidades pequeñas, el método semiclásico uniforme de Airy debe reemplazarse por el de Bessel.
- f) El método semiclásico usando la representación integral funciona bien para rugosidades pequeñas. Para  $\beta$  grandes o sea cuando la función de onda semiclásica adquiere singularidades (las así llamadas cáusticas) hay problemas.

g) El esfuerzo numérico usando el método de canales acoplados es significativamente menor que para cualquiera de los métodos semiclásicos.

Al generalizar lo presentado en este trabajo a una superficie cristalina corrugada en 2 dimensiones aparece al menos 1 problema adicional. Las aproximaciones uniformes para este caso no han sido desarrolladas. Lo que usualmente se hace en este caso es usar la aproximación semiclásica primitiva (que funciona bastante bien mientras dos trayectorias clásicas de interés no estén demasiado juntas) y si 2 trayectorias clásicas se acercan, uniformizarlas con la aproximación de Airy. En el caso de una superficie con corrugación bidimensional contribuirán a lo menos 4 trayectorias clásicas. Qué hacer cuando éstas 4 se acercan mutuamente no está claro. Los cálculos hechos por J.D. Doll [5] para el caso bidimensional muestran que el desacuerdo con los resultados cuánticos es de aproximadamente un 30%.

Como conclusión general se puede decir que debido a todas las dificultades anteriormente mencionadas, estos métodos semiclásicos no son de utilidad práctica para la descripción del scattering elástico de átomos térmicos sobre superficies cristalinas.

Apéndice A. Descripción del programa computacional usado, para calcular las distintas aproximaciones semiclásicas.

El programa calcula:

- a) Las trayectorias clásicas para colisiones de átomos de He sobre superficies cristalinas de LiF.
- b) Las probabilidades de transición en los siguientes casos:
  - (I) Probabilidades clásicas.
  - (II) Probabilidades en la aproximación semiclásica primitiva.
  - (III) Probabilidades usando la aproximación semiclásica uniforme de Airy.
  - (IV) Probabilidades usando la representación integral.

El programa está escrito en forma interactiva, es decir de una forma que requiere constantemente la toma de decisiones de parte del usuario.

Las subrutinas que forman parte de este programa son; LEER, SGLTR, TRAJ, INTO, INT, QNFUN, ROOTS, ROOT, INTRE, TRAM, AIRY.

La función que cumple cada subrutina se detalla a continuación:

SubrutinaFunción

LEER

Esta subrutina proporciona los parámetros del potencial  $V(x,z)$ , estos valores están indicados en la tabla 1.

Da también las coordenadas y momentos iniciales.

SGLTR

Esta subrutina permite controlar la computación de una trayectoria clásica en particular. A través de la pantalla se debe ingresar la coordenada inicial  $x_0$  (real o compleja) cuando esta es solicitada. El parámetro IW permite controlar la impresión de la trayectoria en función de  $t$  (IW = 0 no se imprime, IW = 1 se imprime).

TRAJ

Esta subrutina es la que efectivamente calcula las trayectorias clásicas. Para evaluarlas llama a las subrutinas de integración INTO e INT, haciendo luego una interpolación para indicar los valores de las coordenadas, momentos y fase finales en el punto  $z_j$  pedido.

INTO - INT

Subrutinas de integración que integran las ecuaciones de movimiento y la fase según las ecuaciones dadas en (2.8).

La subrutina INT llama a su vez a la subrutina DERIV para proceder a integrar con las condiciones iniciales adecuadas dadas en (102).

QNFUN

Evalúa  $v_f$  para 20 valores reales o complejos de la coordenada  $x_0$ , para lo cual utiliza la subrutina TRAJ. La forma cualitativa de  $v_f$  en función de  $x_0$  tiene importancia para evaluar los puntos de fase estacionaria.

DERIV

En ella se dan las ecuaciones diferenciales y el potencial  $V(x,z)$  con los parámetros adecuados. Esta subrutina es usada por INT para integrar las ecuaciones de movimiento.

ROOTS

Esta subrutina maneja la búsqueda de los puntos de fase estacionaria. Estos cálculos los hace llamando a la subrutina ROOT.

- ROOT Esta subrutina es la que efectivamente, para un canal  $\mu$  dado, evalúa un punto de fase estacionario a partir de un valor estimativo inicial.
- INTRE Esta subrutina evalúa las probabilidades que el haz emerja por los distintos canales usando la representación integral.
- AUA Esta subrutina maneja la evaluación de las probabilidades de transición  $p_{\mu}^{\text{clas}}$ ,  $p_{\mu}^{\text{prim}}$  y  $p_{\mu}^{\text{unif}}$ .
- TRAM Evalúa efectivamente las probabilidades  $p_{\mu}^{\text{clas}}$ ,  $p_{\mu}^{\text{prim}}$  y  $p_{\mu}^{\text{unif}}$ .
- AIRY Evalúa la función de Airy y su derivada en el punto especificado por TRAM.

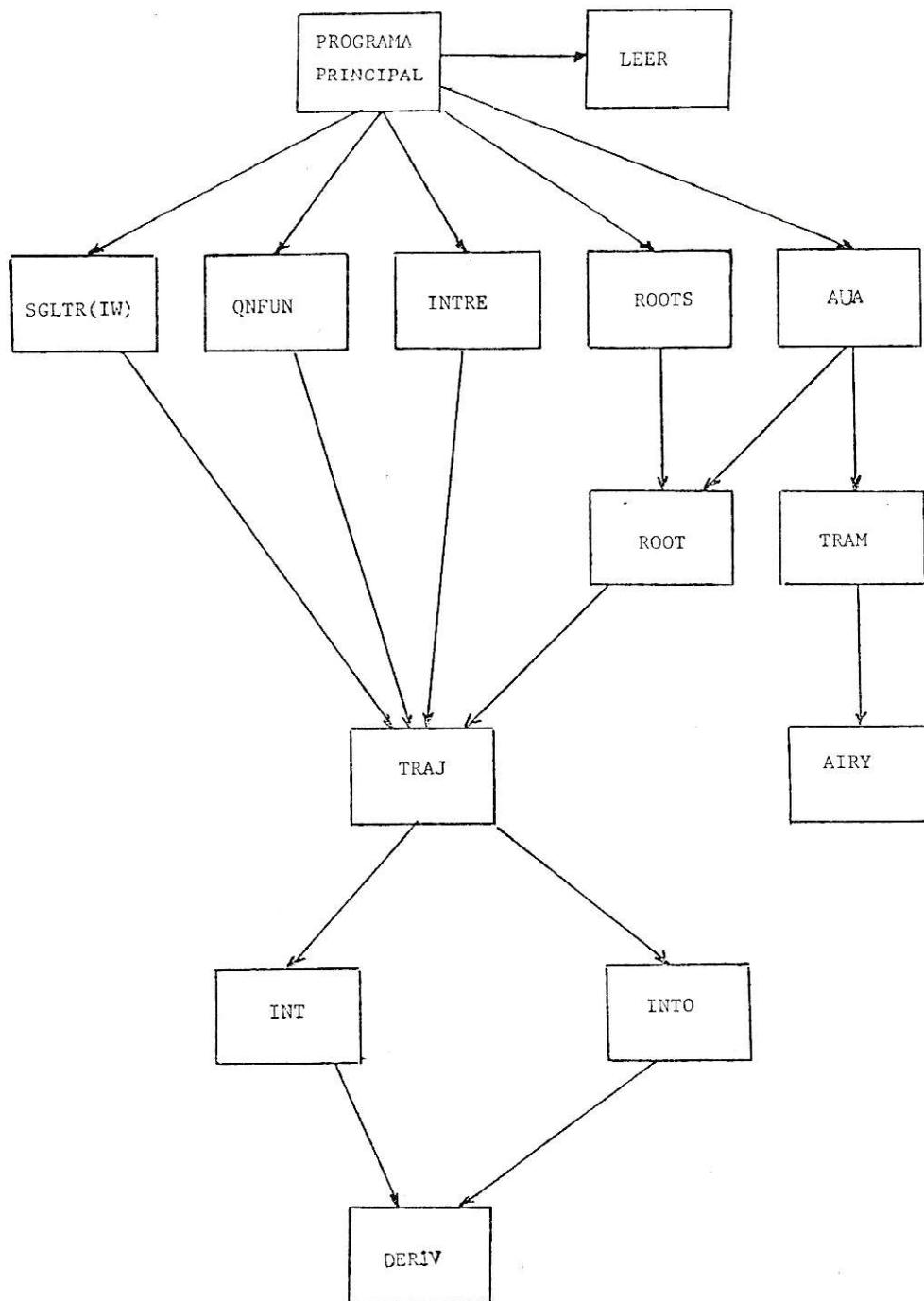


Diagrama en bloques del programa usado para calcular las distintas aproximaciones semiclásicas.

## Apéndice B.

## LISTADO DEL PROGRAMA CON TODAS SUS SUBRUTINAS.

```

C
C
C
C
C
C
ESTE PROGRAMA CALCULA TRAYECTORIAS CLASICAS
PARA COLISIONES DE ATOMOS SOBRE SUPERFICIES
CRISTALINAS Y LAS PROBABILIDADES DE TRANSI-
CION EN LA APROXIMACION SEMICLASICA UNIFORME
DE AIRY Y REPRESENTACION INTEGRAL.

COMPLEX XIB,Z(5),CI
CALL LFER(0)
500 WRITE(5,1000)
1000 FORMAT(IX,'OPTION ?'/
CLX,'1=SINGLE TRAJECTORY, TRAJECTORY IS NOT PRINTED'/
CLX,'2=SINGLE TRAJECTORY, TRAJECTORY IS PRINTED'/
CLX,'3=QUANTUM NUMBER FUNCTION'/
CLX,'4=ROOTS, XIB, DNUX AND DELTA ARE FOUND FOR A GIVEN NU'/
CLX,'5=TRANSITION PROBABILITIES USING AIRY UNIF. APPROX.'/
CLX,'6=START OVER WITH NEW BOMBARDING ENERGY, ANGLE AND BETA'/
CLX,'7=EVALUATE TRANSITION PROB. USING INTEGR. REPRES.'/
CLX,'8=CALL EXIT')
READ(1,1001) IOPT
1001 FORMAT(I1)
IF(IOPT.EQ.0) CALL EXIT
IF(IOPT.NE.1) GO TO 1
CALL SGLTR(0)
GO TO 500
1 IF(IOPT.NE.2) GO TO 2
CALL SGLTR(1)
GO TO 500
2 IF(IOPT.NE.3) GO TO 3
CALL QNFUN
GO TO 500
3 IF(IOPT.NE.4) GO TO 4
CALL ROOTS
GO TO 500
4 IF(IOPT.NE.5) GO TO 5
CALL AUA
GO TO 500
5 IF(IOPT.NE.6) GO TO 6
CALL LFER(1)
GO TO 500
6 IF(IOPT.NE.7) GO TO 7
CALL INTRE
GO TO 500
7 CALL EXIT
END

SUBROUTINE SGLTR(IW)
COMMON/DCS/ PXB,PZB,NC,NCE,A,PKO,PI,AJX
COMPLEX CI,Z(5),XIB,CNU,CPHAS
500 WRITE(5,1000)
1000 FORMAT(IX,'REAL(XIB)',2X,'IMAG(XIB)')
READ(1,1001) XIB
1001 FORMAT(2F10.0)
CALL TRAJ(XIB,Z,IW)
CNU=(Z(2)-PXB)*AJX
CPHAS=Z(5)
WRITE(5,1002) XIB,CNU,CPHAS
WRITE(6,1002) XIB,CNU,CPHAS
1002 FORMAT(IX,'XIB=',2(F8.4,1X),'CNU=',2(E10.3,1X),'CPHAS=',2(E10.3,1X)
C)
WRITE(5,1003)
1003 FORMAT(IX,'ANOTHER TRAJECTORY ? YES=1, NO=0 ')
READ(1,1004) ITR
1004 FORMAT(I1)
IF(ITR.EQ.1) GO TO 500
RETURN
END

```



```

SUBROUTINE RGOTS
COMPLEX XIG,XIR,DNJX,DELTA
500 WRITE(5,1000)
1000 FORMAT(1X,'NU',3X,'REAL(XIG)',1X,'IMAG(XIG)',9X,'(NU=99 RETURN)')
READ(1,1001) NU,XIGR,XIGI
1001 FORMAT(1X,12,3X,F10.0,1X,F10.0)
IF(NU.EQ.99) RETURN
XIG=CMPLX(XIGR,XIGI)
CALL ROOT(XIG,NU,XIR,DNUX,DELTA)
WRITE(5,1002) NU,XIR,DNUX,DELTA
WRITE(6,1002) NU,XIR,DNUX,DELTA
1002 FORMAT(1X,'NU=',12,5X,'XIB=',2X,2F10.4/11X,'DNUX=',1X,2F10.4/
C 11X,'DELTA=',2F10.4)
WRITE(5,1003)
1003 FORMAT(1X,'ANOTHER ROOT ? YES=1, NO=0')
READ(1,1004) I
1004 FORMAT(I1)
IF(I.EQ.1) GO TO 500
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE ROOT(CXIG,NU,CXIR,DNUX,DELTA)
COMMON/JND/ GAMMA0,DELTA0,BETA,Z0B
COMMON/DOS/ PKX,P<Z,NO,NCE,A,PK0,PI,AJX
COMPLEX Z(5),ZZ(5),ZZZ(5),CNU0,CNU1,CNU2,DELTA,DNUX
COMPLEX XIB,XIB1,XIB2,DXI
COMPLEX CXIG,CXIR,C1,Z1,Z2,Z3,Z4,Z5,Z6,Z7,Z8
DNUX=0.0
DELTA=0.0
CXIR=0.0
XIB=CXIG
6000 CONTINUE
DEL=0.01
CALL TPAJ(XIB,Z,0)
CNU0=AUX*(Z(2)-PKX)
WRITE(5,25) XIB,CNU0
25 FORMAT(1X,'XIB=',2E12.4,3X,'NU=',2E12.4)
WRITE(5,81)
81 FORMAT(1X,'CONTINUE WITH ROOT SEARCH ?'/1X,'(NO, START OVER=0; YES
C=1; CALL EXIT=2; ROOT OK=3)')
READ(1,82) LO
82 FORMAT(I1)
IF(LO.EQ.0) RETURN
IF(LO.EQ.2) CALL EXIT
IF(LO.EQ.1) GO TO 8000
CALL TRAJ(XIB+0.005,ZZ,0)
CNU1=AUX*(ZZ(2)-PKX)
CALL TRAJ(XIB-0.005,ZZZ,0)
CNU2=AUX*(ZZZ(2)-PKX)
DNJX=(CNU1-CNU2)/0.01
CXIR=XIB
DELTA=Z(5)
RETURN
8000 DXI=CMPLX(DEL,DEL)
XIB1=XIB+DXI
CALL TRAJ(XIB1,ZZ,0)
CNU1=AUX*(ZZ(2)-PKX)
XIB2=XIB+CONJG(DXI)
CALL TPAJ(XIB2,ZZZ,0)
CNU2=AUX*(ZZZ(2)-PKX)
C
C
C
LINEAR INTERPOLATION IN COMPLEX XIB PLANE
G1=AIMAG(CONJG(CNU0-CNU1)*(CNU0-FLOAT(NU)))
G2=AIMAG(CONJG(CNU2-CNU0)*(CNU0-CNU1))
G3=AIMAG(CONJG(CNU2-CNU0)*(CNU0-FLOAT(NU)))
Q=G1/G2
P=G3/G2
XIB=DEL*CMPLX(P+Q,P-Q)+XIB
GO TO 6000
END

```

```

      X00=REAL(X0(I))
      AM=CABS(Y4)
      PHA=AIMAG(Y4)
      PHB=REAL(Y4)
      PH=ATAN2(PHA,PHB)
      PH=PH*180./3.141596
      WRITE(5,88) X00,Y1,Y2,Y4,AM,PH
      WRITE(6,88) X00,Y1,Y2,Y4,AM,PH
83  FORMAT(1X,F6.3,4(2X,E12.4)/7X,4(2X,E12.4))
      F(I)=Y4
11  CONTINUE
      MMM=0
333  CONTINUE
      Y5=0.0
      Y6=0.0
      DO 15 NN=1,50
      N2=2*NN
      Y5=Y5+F(N2)
      N1=N2-1
      Y6=Y6+F(N1)
15  CONTINUE
      S=-F(1)+F(101)+4.0*Y5+2.0*Y6
      S=S*.010/3.0
      P=CABS(S)**2
      WRITE(5,1004) NU,S,P
      WRITE(6,1004) NU,S,P
1004 FORMAT(71X,'NU=',I3,5X,'S=',E11.4,1X,E11.4,5X,'P=',E11.4/)
      MMM=MMM+1
      IF(MMM.EQ.4) GO TO 50
      DO 898 II=1,101
      ASA=REAL(JAC(II))
      IF(ASA.GT.0.0) GO TO 898
      F(II)=C1*F(II)
898  CONTINUE
      GO TO 333
      END

```

```

SUBROUTINE DERIV(T,Y,DY)
COMMON/JNO/ GAMMA0,DELTA0,BETA,Z0
DIMENSION Y(10),DY(10)
COMPLEX C1,Z(5),W1,W2,W3,W4,W5,W6,W7,W8
Z(1)=CMPLX(Y(1),Y(2))
Z(2)=CMPLX(Y(3),Y(4))
Z(3)=CMPLX(Y(5),Y(6))
Z(4)=CMPLX(Y(7),Y(8))
Z(5)=CMPLX(Y(9),Y(10))
PI=3.141592654
W1=CEXP(DELTA0*(Z0-Z(3)))
W2=2.0*PI*Z(1)
W3=CSIN(W2)
W4=CCOS(W2)
W5=4.0*PI*BETA*W3*W1*W1*GAMMA0
W6=2.0*DELTA0*W1*(1.0-(1.0-2.0*BETA*W4)*W1)*GAMMA0
DY(1)=REAL(Z(2))
DY(2)=AIMAG(Z(2))
DY(3)=-0.5*REAL(W5)
DY(4)=-0.5*AIMAG(W5)
DY(5)=REAL(Z(4))
DY(6)=AIMAG(Z(4))
DY(7)=-0.5*REAL(W6)
DY(8)=-0.5*AIMAG(W6)
W7=-0.5*Z(1)*W5-0.5*Z(3)*W6
DY(9)=-REAL(W7)
DY(10)=-AIMAG(W7)
RETURN
END

```



```

C
C
C
SUBROUTINE AUA
THIS SUBROUTINE EVALUATES TRANSITION PROBABILITIES USING THE
AYRY UNIFORM APPROXIMATION
COMPLEX XIB(2),DNUX(2),DELTA(2)
COMPLEX Z1,Z2,Z3,XIG
3) WRITE(5,1000)
1000 FORMAT(1X,'NJ',4X,'REAL(XIG)',1X,'IMAG(XIG)')
READ(1,1001) NJ,XIG
1001 FORMAT(1X,I2,4X,2F10.0)
CALL ROOT(XIG,NJ,Z1,Z2,Z3)
IF(CABS(Z2).LT.0.00001) GO TO 30
XIB(1)=Z1
DNUX(1)=Z2
DELTA(1)=Z3
IF(ABS(AIMAG(Z2)).LT.0.00001) GO TO 31
XIB(2)=CONJG(Z1)
DNUX(2)=CONJG(Z2)
DELTA(2)=CONJG(Z3)
GO TO 50
31 WRITE(5,1003)
1003 FORMAT(7X,'REAL(XIG)',1X,'IMAG(XIG)',5X,'2ND ROOT')
READ(1,1004) XIG
CALL ROOT(XIG,NU,Z1,Z2,Z3)
1004 FORMAT(7X,2F10.0)
IF(CABS(Z2).LT.0.00001) GO TO 31
XIB(2)=Z1
DNUX(2)=Z2
DELTA(2)=Z3
5) WRITE(5,1005)
WRITE(6,1005)
1005 FORMAT(//1X,'NU',6X,'XIER',8X,'XIBI',7X,'DNUXR',7X,'DNUXI',7X,'DEL
CTAR',7X,'DELTAI//')
WRITE(6,1006) NU,XIB(1),DNUX(1),DELTA(1),XIB(2),DNUX(2),DELTA(2)
WRITE(5,1006) NU,XIB(1),DNUX(1),DELTA(1),XIB(2),DNUX(2),DELTA(2)
1006 FORMAT(1X,I2,2X,6E12.4//5X,6E12.4)
CALL TRAM(NU,XIB,DNUX,DELTA)
WRITE(5,1007)
1007 FORMAT(1X,'ANOTHER NU ? YES=1, NO=0')
READ(1,1008) III
1008 FORMAT(I1)
IF(III.EQ.1) GO TO 30
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE TRAM(NU,XIB,DNUX,DELTA)
COMPLEX XIB(2),DNJX(2),DELTA(2)
COMPLEX CI,DEL1,DEL2,AM1,AM2,ZZZ
CI=CMPLX(0.0,1.0)
PI=3.141592654
AM1=1.0/SQRT(CABS(DNJX(1)))
AM2=1.0/SQRT(CABS(DNJX(2)))
P1=CABS(AM1)**2
P2=CABS(AM2)**2
DEL1=DELTA(1)
DEL2=DELTA(2)
FFF=ABS(AIMAG(DELTA(1)))
IF(FFF.LT.0.00001) GO TO 50

```

CLASSICALLY FORBIDDEN TRANSITIONS

```

S=ABS(AIMAG(DEL1))
PPRIM=P1*EXP(-2.0*S)
PCL=0.0
DIFA=ABS(AIMAG(DEL2-DEL1))
XI=-(0.75*DIFA)**0.6666667
CALL AIRY(AI,BI,DAI,DBI,-XI)
XI2=SQRT(-XI)
R1=XI2*AI**2
PUNIF=4.0*PI*R1*P1
GO TO 60

```

CLASSICALLY ALLOWED TRANSITIONS

```

50 PCL=P1+P2
DIFA=REAL(DEL2-DEL1)
IF(DIFA.GT.0.0) GO TO 66
DIFA=-DIFA
ZZZ=XIB(1)
XIB(1)=XIB(2)
XIB(2)=ZZZ
ZZZ=DNJX(1)
DNJX(1)=DNJX(2)
DNUX(2)=ZZZ
ZZZ=DELTA(1)
DELTA(1)=DELTA(2)
DELTA(2)=ZZZ
60 CONTINUE
PPRIM=PCL+2.0*SQRT(P1*P2)*SIN(DIFA)
XI=(0.75*DIFA)**0.6666667
CALL AIRY(AI,BI,DAI,DBI,-XI)
XI2=SQRT(XI)
R1=XI2*AI**2
R2=DAI**2/XI2
O=PI*(R1+R2)
E=PI*(R1-R2)
PUNIF=PCL*O+2.0*SQRT(P1*P2)*E
WRITE(5,1000) P1,P2,DIFA
WRITE(6,1000) P1,P2,DIFA
1000 FORMAT(/11X,'P1=',E12.4,7X,'P2=',E12.4,5X,'DIFA=',E12.4
C)
60 WRITE(5,1001) NU,PCL,PPRIM,PUNIF
WRITE(6,1001) NU,PCL,PPRIM,PUNIF
1001 FORMAT(/1X,'NU=',I2,4X,'PCL=',E12.4,4X,'PPRIM=',E12.4,4X,'PUNIF=',
E12.4/)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE INT(X,DERI ,Y,F,T,SWPR
X )
COMMON /INTC/ IPMX,AREF,EMAX,SSSR,HFAC,SWAM,SWEX
COMMON /INTP/ HPR,XX,N,EUB,ELB,IP,IT,NRKS,SWIN
C
DIMENSION Y(1),F(1),T(8,1)
LOGICAL SWAM,SWEX,SWIN
LOGICAL SWPR
INTEGER HFAC
DOUBLE PRECISION T,HPR,XX
DOUBLE PRECISION D,H
EXTERNAL DERI
600) FORMAT (35H0 CANNOT DECREASE H BECAUSE OF HMIN. ,1PE16.8,I20)
C
1 CONTINUE
SWPR=.FALSE.
TEST=0.0
H=HPR/DBLE(FLDAT(IP*24))
IF ((NRKS .LT. 3) .OR. (.NOT. SWAM)) GO TO 200
C
100 ADAMS-MOULTON STEP.
CONTINUE
DO 109 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(4,I)=D
X 55.000*D-59.000*T(3,I)+37.000*T(2,I)- 9.000*T(1,I) ))
109 CONTINUE
X=SNGL(XX+24.000*H)
CALL DERI (X,Y,F)
DO 119 I=1,N
D=DBLE(F(I))
D=( T(5,I)+H*(
X 9.000*D+19.000*T(4,I)- 5.000*T(3,I)+ T(2,I) ))
T(6,I)=D
E=ABS(SNGL(D)-Y(I))/14.0
TEST=AMAX1(E/AMAX1(AREF,ABS(SNGL(D))),TEST)
119 CONTINUE
C
GO TO 300
C
200 ZONNEVELD STEP.
CONTINUE
DO 209 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(4,I)=D
1
X 12.000*D ))
209 CONTINUE
X=SNGL(XX+12.000*H)
CALL DERI (X,Y,F)
DO 219 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(6,I)=D
C
2
X 12.000*D ))
219 CONTINUE
CALL DERI (X,Y,F)
DO 229 I=1,N
D=DBLE(F(I))
T(7,I)=D
C
3
X 24.000*D ))
229 CONTINUE

```

```

X=SNGL (XX+24.000*H)
CALL DER1 (X,Y,F)
DO 239 I=1,N
  D=DBLE (F(I))
  T(8,I)=D
C
  4
  Y(I)=SNGL (T(5,I)+H*(
239 X 3.7500*T(4,I)+5.2500*T(6,I)+9.7500*T(7,I)-0.7500*D ))
  CONTINUE
  X=SNGL (XX+18.000*H)
  CALL DER1 (X,Y,F)
  DO 249 I=1,N
    D=DBLE (F(I))
    E=ABS (SNGL (H*(
X -16.000*T(4,I)+48.000*T(6,I)+48.000*T(7,I)+48.000*T(8,I)
X -128.000*D )))
C
  5
  D=( T(5,I)+H*(
X 4.000*T(4,I)+ 3.000*T(6,I)+ 8.000*T(7,I)+ 4.000*T(8,I)
X ))
  T(6,I)=D
  TEST=AMAX1 (E/AMAX1 (AREF,ABS (SNGL (D))),TEST)
249 CONTINUE
C
  BOTH ADAMS-MOULTON AND ZONNEVELD METHODS CONTINUE FROM HERE.
C
300 CONTINUE
  X=SNGL (XX+24.000*H)
  IF (TEST .LE. EUB) GO TO 310
  IF (IP*HFAC .GT. IPMX) GO TO 309
C
  REPEAT STEP WITH SMALLER H.
  NRKS=0
  IP=1P*HFAC
  IT=IT*HFAC
  DO 305 I=1,N
    Y(I)=SNGL (T(5,I))
    F(I)=SNGL (T(4,I))
305 CONTINUE
  GO TO 1
C
  CANNOT DECREASE H BECAUSE OF HMIN.
C
309 CONTINUE
  IF (.NOT. SWIN) GO TO 310
  PRINT 5000, X, IPMX
  SWIN=.FALSE.
C
310 CONTINUE
C
  ACCEPT CURRENT STEP.
C
  XX STILL HAS NOT BEEN CHANGED SINCE ENTRY.
  YY(XX) IS STILL IN T(5, ).
  F(YY) IS IN T(4, ).
C
  IT=IT+1
  XX=XX+HPR/DBLE (FLDAT (IP))
  NRKS=MIN0 (NRKS+1,4)
  DO 319 I=1,N
    D=T(6,I)
    T(5,I)=D
    Y(I)=SNGL (D)
319 CONTINUE
  X=SNGL (XX)
  CALL DER1 (X,Y,F)
  IF (IT .LT. IP) GO TO 320
C
  X IS A MULTIPLE OF HPRINT.
  SWPR=.TRUF.
  IT=IT-IP

```

```

C 320 CONTINUE
      IF (TEST .GE. ELB) GO TO 330
      IF (MOD(IP,HFAC)+MOD(IT,HFAC) .NE. 0) GO TO 330
C
C      PROCEED TO NEXT STEP WITH LARGER H, USING ZONNEVELD METHOD.
      NRKS=0
      IP=IP/HFAC
      IT=IT/HFAC
      RETURN
C
C 330 PROCEED TO NEXT STEP WITH SAME H.
      CONTINUE
      DO 339 I=1,N
      T(1,I)=T(2,I)
      T(2,I)=T(3,I)
      T(3,I)=T(4,I)
339 CONTINUE
      RETURN
      END

```

```

SUBROUTINE INTO(NO,X,DERI,Y,F,T,HPRO)
COMMON /INTC/ IPMX,AREF,EMAX,SSSR,HFAC,SWAM,SWEX
COMMON /INTP/ HPR,XX,N,EUB,ELB,IP,IT,NRKS,SWIN
DIMENSION Y(1),F(1),T(8,1)
LOGICAL SWAM,SWEX,SWIN
INTEGER HFAC
DOUBLE PRECISION T,HPRO,HPR,XX
EXTERNAL DERI

```

```

C
      IPMX=1024
      AREF=1.0
      EMAX=1.0E-4
      SSSR=100.0
      HFAC=2
      SWAM=.TRUE.
      SWEX=.TRUE.
C
      DO 1000 J=1,8
      DO 2000 I=1,N0
      T(I,J)=0.000
2000 CONTINUE
1000 CONTINUE
      HPR=HPRO
      XX=DBLE(X)
      N=N0
      EUB=EMAX
      ELB=EMAX/SSSR
      IP=1
      IT=0
      NRKS=0
      SWIN=SWEX
      CALL DERI (X,Y,F)
      DO 9 I=1,N
      T(5,I)=DBLE(Y(I))
9 CONTINUE
      RETURN
      END

```

```

C
SUBROUTINE ARY (AI,BI,DAI,DBI,X)
SUBROUTINE FOR REAL ARGUMENTS
C1=0.35502805387817
C2=0.2588194403792807
SPI=0.564189583547759
R15=0.165658066666657
R56=1.00-R15
R76=1.00+R16
R112=0.03333333333333
R512=0.416656656666666
R12=0.500000000000000
R712=R12+R112
R1312=1.000+R112
R1112=1.000-R112
PI=3.141592653589793
XMAX=6.5
XMIN=-5.5
EPS2=1.E-14
EPIX.LT.XMIN) GJ TJ 3
IF(X.LT.XMAX) GJ TJ 2
1 Z=(2.000/3.00)*(X)**(1.5)
DA=1.0
DB=1.0
DX=1.0
DDA=1.0
DD3=1.0
DDX=1.0
BI=1.0
DAI=1.0
DBI=1.0
T=0.0
T=T+1.0
10 TX=(2.00)*T*Z
DX=(T-R56)/(T-R16)/TX
IF(DX.GT.1.0) GJ TJ 40
DDX=(T+R16)/(T-R76)/TX
DA=-DA*DX
DB=D3*DX
DDA=-DDA*DDX
DD3=DD3*DDX
AI=AI+DA
BI=BI+DB
DAI=DAI+DDA
DBI=DBI+DD3
D2=D3*DA
D3=DDA*DDA
D4=DDR*DD3
IF(D2.GT.D1)D1=D2
IF(D3.GT.D1)D1=D3
IF(D4.GT.D1)D1=D4
IF(D1.GT.EPS2) GJ TJ 10
EE=EXP(-Z)
XX=X**(-0.25)
AI=(0.500)*SPI*XX*EE*AI
BI=((SPI*XX)/EE)*BI
DAI=-((0.500)*SPI*EE)/XX*DAI
DBI=(SPI/(XX*EE))*DBI
RETURN
2 CONTINUE
R=ABS(X)
MAX=(3.000)*(2.000)+R)
F=C1
G=C2*X
DF=(0.500)*X*X*C1
DG=C2
X3=X*X*X
AI=F-G
BI=F+G
DAI=DF-DG

```



REFERENCIAS.

- [1] W.H. Miller, J. Chem. Phys. 53, (1970), 1949; J. Chem. Phys. 53, (1970), 3578.
- [2] R.A. Marcus, Chem. Phys. Lett. 7 (1970), 525; J. Chem. Phys. 54, (1971), 3965.
- [3] W.H. Miller, Adv. Chem. Phys. 25, (1974), 69.
- [4] S. Levit, U. Smilanski y D. Pelte, Phys. Lett. 53B, (1974), 39.
- H. Massmann y J.D. Rasmussen, Nucl. Phys. A243, (1975), 155.
- M.W. Guidry, H. Massmann, R. Donangelo y J.O. Rasmussen, Nucl. Phys. A274, (1976), 183.
- M.J. Rhoades-Brown, R. Donangelo, M.W. Guidry y R.E. Neese, Phys. Rev. C24, (1981), 2747.
- [5] J.D. Doll, Chem. Phys. 3, (1974), 257; J. Chem. Phys. 61, (1974), 954.
- [6] R.J. Masel, R.P. Merril y W.H. Miller. Phys. Rev. B12 (1975), 5545.
- J. Vac. Sci. Technol. 13, (1976), 355.
- J. Chem. Phys. 65, (1976), 2690.
- J. Chem. Phys. 64, (1976), 45.
- [7] G. Ramírez, tesis de Licenciatura. Univ. de Chile (1981).
- H. Massmann, G. Ramírez, M. Rivas y G. Urzúa.
- Apuntes del curso "Tópicos especiales de la Física del Sólido" editado por R. Ferrer.

- [8] H. Goldstein  
"Classical Mechanics"  
Addison-Wesley (1950)
- [9] M. Abramowitz, I. Stegun.  
Handbook of Mathematical functions, Dover Publications  
Inc., New York, (1972).
- [10] R.A. Marcus, J. Chem. Phys. 55, (1971), 5636, J. Chem.  
Phys. 56 (1972), 311.
- [11] R. Donangelo, Ph. D. Thesis (1977), University of Cali-  
fornia, Berkeley.
- [12] G. Wolken Jr., J. Chem. Phys. 58, (1973), 3047.  
H. Chow y E.D. Thompson, Surf. Sci. 59, (1976), 225.
- [13] J.H. Weave. "Atom-surface potential information from  
Ion-energy atom-surface scattering", Preprint (1980).
- [14] C.C. Rankin y W.H. Miller, J. Chem. Phys. 55, (1971),  
3150.  
T.F. George y W.H. Miller, J. Chem. Phys. 56, (1972),  
5722.  
J.D. Doll, T.F. George y W.H. Miller, J. Chem. Phys.  
58, (1973), 1343.  
H. Massmann y K. Møhring, J. Chem. Phys. 66, (1977),  
5368.
- [15] J.R. Stine y R.A. Marcus. J. Chem. Phys. 59, (1973),  
5145.