



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Cálculo de la sección eficaz diferencial en una colisión
elástica de un electrón con un sistema de cinco moléculas de
agua

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA

por

Alejandra Sunem Hernández Pinzón

Asesorada por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Puebla Pue.
24 de junio de 2025



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Cálculo de la sección eficaz diferencial en una colisión
elástica de un electrón con un sistema de cinco moléculas de
agua

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA

por

Alejandra Sunem Hernández Pinzón

Asesorada por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Puebla Pue.
24 de junio de 2025

Título: Cálculo de la sección eficaz diferencial en una colisión elástica de un electrón con un sistema de cinco moléculas de agua

Estudiante: ALEJANDRA SUNEM HERNÁNDEZ PINZÓN

COMITÉ

Dr. Héctor Novales Sánchez
Presidente

Dr. Javier Miguel Hernández López
Secretario

Dra. Verónica Domínguez Benítez
Vocal

Dr. Fernando Moreno Barbosa
Vocal

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández
Asesor

Agradecimientos

Considero que los logros no son siempre propios, y en mi caso quiero agradecer enormemente a mi familia: mi madre, Raquel Pinzón; mi padre, Ramón Hernández; mi hermano, Jonatan Hernández; y a todos mis familiares. A pesar de la distancia, siempre me brindaron su amor, comprensión y apoyo incondicional, permitiéndome seguir mi propio camino con libertad y confianza. Agradezco a mi asesor, el Dr. Heber Zepeda, por su invaluable guía durante la investigación, sin la cual este trabajo no hubiera sido posible. Expreso también mi especial gratitud a Daniel Olmedo por sus palabras de ánimo en los momentos más desafiantes y su valiosa ayuda a lo largo de este proceso. Agradezco a mi amigo Javier Flores, compañero de estancias y de aprendizajes, con quien compartí valiosas experiencias. Quiero agradecer a Jesusomar Palma, por sus comentarios constructivos. Gracias a mis amigas, Samara, Ana, Gretel, Denisse, Dafne, Valeria y Vany; y a mis amigos, Luis y Carlos, por brindarme su apoyo, compañía y hacerme sentir como en casa. Finalmente, extendo mi reconocimiento a mis compañeras y compañeros de la carrera, así como a las y los profesores de la facultad, cuyas enseñanzas han sido la base sobre la cual he construido mi formación académica.

A cada una y cada uno de ustedes: mi más sincero agradecimiento.

Resumen

En el desarrollo de esta tesis, se estudia la interacción de dispersión al colisionar elásticamente un electrón con un sistema de cinco moléculas de agua, pues dada la abundancia de este elemento en el cuerpo humano y la capacidad de formar puentes de hidrógeno, en un principio es de vital interés para entender los efectos de radiación en tejidos biológicos. La radiación ionizante directa con electrones interactúa con el agua, generando radicales libres que dañan las células cancerosas (radiólisis). Sin embargo, como un primer caso para estudiar la ionización del agua, consideramos una dispersión elástica entre un electrón y un clúster de agua.

La sección eficaz diferencial (SED) permite conocer información crucial sobre la probabilidad de que ocurra una interacción de dispersión entre una partícula incidente con otra. En este caso, estudiamos la interacción de un electrón con un clúster de cinco moléculas de agua. Aunque con anterioridad se ha analizado esta dispersión electrón-agua utilizando métodos experimentales y teóricos con gran rigurosidad, el modelo a continuación presenta al sistema de una manera más factible sin considerar la estructura electrónica de los átomos y moléculas. En un principio, se propone el hamiltoniano del sistema como la suma de cuatro osciladores armónicos los cuales se consideran entre el oxígeno y el hidrógeno al que se une por puente de hidrógeno. Como aproximación, se considera a los hidrógenos como protones y al oxígeno con carga equivalente a la de dos electrones, por lo que el potencial considerado para que suceda dicha dispersión es un potencial coulombiano que experimenta el electrón con cada átomo de la molécula.

En teoría de dispersión se utiliza la primera aproximación de Bohr para definir la SED, en donde las integrales se simplifican gracias a la geometría de las moléculas y las distancias de interacción del potencial consideradas, obteniendo así una expresión matemática en términos de la energía de incidencia del electrón y el ángulo de dispersión de la partícula. De igual manera, se hizo un análisis análogo para una colisión positrón-agua con el fin de observar si existe alguna diferencia en cuanto al potencial coulombiano en la expresión final. Para una mejor visualización de la relación encontrada, se realizaron gráficos de la SED con respecto a la energía de incidencia para diferentes ángulos y la SED con respecto a los ángulos de dispersión, variando la energía de incidencia.

PALABRAS CLAVE: Sección eficaz diferencial, dispersión elástica, molécula de agua, puentes de hidrógeno.

Índice general

Resumen	VII
1. Introducción	1
1.1. Antecedentes	3
2. Marco teórico	5
2.1. Molécula de agua	5
2.1.1. Estructura molecular	5
2.1.2. Puentes de hidrógeno	7
2.2. Teoría de dispersión	8
2.2.1. Dispersión elástica	8
2.2.2. Dispersión inelástica	9
2.3. Formalismo clásico	10
2.4. Sección eficaz diferencial	11
2.5. Formalismo cuántico	12
2.5.1. Amplitud de dispersión	14
2.6. La primera aproximación de Born	16
3. Marco metodológico	17
3.1. La molécula de agua como oscilador armónico	17
3.2. Hamiltoniano del sistema	18
3.3. Colisión de un electrón	20
3.3.1. Definición de la masa reducida y la sección eficaz diferencial	20
3.3.2. Estados inicial y final del sistema	20
3.3.3. Potencial de interacción	20
3.3.4. Amplitud de dispersión del sistema	21
3.3.5. Resolución de integrales	22
3.3.6. Módulo de la amplitud de dispersión del sistema	23
3.4. Colisión de un positrón	23
4. Resultados y análisis	25
4.1. Gráfico de SED con respecto al ángulo de dispersión	25
4.2. Gráfico de SED con respecto a la energía de incidencia	27
5. Conclusiones y discusión	29
5.1. Perspectivas	30
A. Funciones de Green	31

Índice de figuras

2.1.	a) Átomo de hidrógeno y su configuración electrónica, b) Átomo de oxígeno y su configuración electrónica	6
2.2.	estructura de la molécula de agua	7
2.3.	Una molécula de agua puede tener 4 enlaces por puentes de hidrógeno	7
2.4.	Diagrama que ilustra el proceso de dispersión coherente. El fotón dispersado tiene la misma longitud de onda que el fotón incidente. No se transfiere energía [20] . . .	9
2.5.	Ilustración del efecto fotoeléctrico [20]	9
2.6.	Ilustración del efecto Compton [20]	10
2.7.	Ilustración del proceso de producción de pares [20]	10
2.8.	Dispersión clásica	11
2.9.	Dispersión en un ángulo sólido	12
2.10.	a) Ángulo entre los vectores de onda incidente y disperso \vec{k}_0 y \vec{k} . b) Ondas incidentes y dispersas: la onda incidente es una onda plana, $\phi_{inc}(r) = Ae^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}$, y la onda dispersa, $\phi_{sc}(r) = Af(\theta, \phi) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r}$, es una onda saliente.	14
3.1.	a) Estiramiento simétrico O-H, b) Estiramiento asimétrico O-H y c) Flexión H-O-H	17
3.2.	Diagrama del sistema	18
4.1.	Sección eficaz diferencial con respecto al ángulo de la partícula dispersada para energías hasta 80 eV. Los datos del eje y se presentan en escala logarítmica.	26
4.2.	Sección eficaz diferencial con respecto al ángulo de la partícula dispersada para altas energías hasta 500 eV.	27
4.3.	Sección eficaz diferencial con respecto a energía de la partícula incidente para bajas energías hasta 100 eV.	27
4.4.	Sección eficaz diferencial con respecto a energía de la partícula incidente para bajas energías hasta 500 eV.	28
4.5.	Sección eficaz diferencial con respecto a energía de la partícula incidente para altas energías hasta 20 MeV.	28

Capítulo 1

Introducción

El agua es una sustancia fundamental para la vida, presente tanto en los organismos vivos como en los ecosistemas. Además, es el componente más abundante en el planeta Tierra. La presencia cotidiana de este elemento en el día a día nos impide reflexionar sobre su naturaleza e importancia para la vida.

En el año 640 a.C. el filósofo Tales de Mileto propuso que el agua era el principio de todas las cosas, marcando el inicio de las explicaciones no mitológicas del universo.[1]. Desde la escuela filosófica de Aristóteles (384-322 a.C.) hasta el último tercio del siglo XVIII, el agua se consideró uno de los cuatro elementos fundamentales. En 1766, Cavendish identificó un gas al que llamó “aire inflamable”. Pues al quemar este gas en presencia de aire, observó la formación de agua. En 1774, Joseph Priestley descubrió un gas al que llamó “aire desflogisticado”, conocido actualmente como oxígeno, demostrando que este gas era esencial para la combustión y la respiración. En 1783, Antoine Lavoisier dio al “aire inflamable” de Cavendish el nombre por el que hoy conocemos: **hidrógeno** que significa en griego "generador de agua"[2]. En este mismo año, Cavendish y Lavoisier realizaron experimentos, de manera independiente, que demostraron que el agua no era un elemento indivisible, sino un compuesto formado por hidrógeno y oxígeno. Finalmente, en 1804, los científicos Louis Gay-Lussac y Alexander von Humboldt establecieron la fórmula química del agua, H_2O .

A lo largo de los años, el agua ha sido objeto de estudio en diversas disciplinas científicas, desde la química y la física, hasta la ingeniería, geografía y, en especial, la medicina nuclear. Adentrándonos en la física médica, el estudio de este elemento es importante en áreas como la imagenología y la radioterapia, dado que el agua constituye un gran porcentaje significativo en los tejidos biológicos del cuerpo humano. Para hablar de radioterapia, debemos introducir primero el concepto de radiación.

La radiación es la propagación y emisión de energía a través del espacio o un medio en forma de ondas electromagnéticas o partículas subatómicas. Dependiendo de su naturaleza, las podemos clasificar en radiación ionizante y no ionizante. La **radiación ionizante**, tiene suficiente energía para alterar la materia, liberando electrones de los átomos y moléculas; dentro de este tipo podemos encontrar los rayos X, gamma, partículas alfa (núcleos de helio) y partículas beta (electrones). Por otra parte, la **radiación no ionizante**, no tiene suficiente energía para ionizar átomos, como ondas de radio, luz visible o el infrarrojo. Estas interacciones podemos asociarlas a nivel clásico como un proceso en el que dos o más partículas interactúan, intercambiando o no energía y momento, es decir, choque de partículas. Estas colisiones pueden ser elásticas o inelásticas. En una colisión elástica, la energía cinética total del sistema y momento lineal se conserva; esto significa que no hay pérdida de energía en forma de calor, deformación, ionización o excitación interna de las partículas involucradas. En una colisión inelástica, parte de la energía

cinética se transforma en otras formas de energía, ionizando el sistema. Hay que resaltar que en la física médica se utilizan ambos tipos de radiación; sin embargo, hablaremos a continuación un poco de radiación ionizante.

Descubrimientos clave sentaron las bases para el uso de la radiación en la medicina: los rayos X (Wilhelm Conrad Roentgen 1895), la radiactividad (Henri Becquerel 1896) y, poco después, el aislamiento del polonio y el radio, por Marie y Pierre Curie en 1898, quienes demostraron una emisión de radiación aún más intensa que el uranio [3]. Ya entre 1896 y 1900, se tienen registros de las primeras aplicaciones terapéuticas. Poco después del hallazgo de los rayos X, los médicos comenzaron a explorar su uso para tratar enfermedades de la piel y tumores superficiales, lo que eventualmente dio origen a lo que hoy conocemos como radioterapia.

La radioterapia es un tratamiento médico que utiliza radiación ionizante para dañar el ADN celular, con el objetivo de eliminar células cancerosas que se encuentran en los tejidos biológicos, impidiendo su crecimiento y reproducción. Este tipo de terapia se aplica en el tratamiento de diversos tipos de cáncer y, en algunos casos, en enfermedades no malignas. La interacción de la radiación ionizante puede ocurrir de dos formas: de manera **directa** en donde se ven involucradas partículas cargadas como el electrón y el positrón; y de manera **indirecta** donde interactúan partículas neutras como el neutrón y el fotón. Sin embargo, se ha encontrado que la mayoría de las radiaciones ionizantes directamente son adecuadas para su uso en radioterapia de haz externo de electrones [3], ya que estos interactúan con los átomos absorbentes principalmente a través de interacciones de Coulomb con electrones orbitales atómicos que experimentan pérdida de colisión (ionización). Durante el proceso de ionización directa, estas partículas interactúan con el ADN, causando roturas en las cadenas, o bien, ionizando las moléculas de agua en los tejidos, produciendo radicales libres. Este último mecanismo es de particular interés para nuestra investigación, ya que nuestro enfoque de investigación se centra en el estudio de la molécula de agua, específicamente cinco de ellas.

Por otro lado, la radiólisis del agua es la descomposición de las moléculas de agua (H_2O) al ser expuestas a radiación ionizante. Este fenómeno genera radicales libres, definidos como átomos o moléculas altamente reactivas que tienen uno o más electrones no apareados en su capa externa [4]. Estos radicales son los encargados de generar roturas en las cadenas del ADN, eliminando las células cancerosas. Además, desempeñan un papel fundamental en la dosimetría (cálculo de la dosis de radiación) siendo un factor clave en los modelos de planificación de tratamientos en la distribución de la dosis en los tejidos [5].

En el proceso de radiólisis del agua en la radioterapia por haces de electrones, nos enfocamos en un mecanismo físico que permite estudiar las interacciones elásticas e inelásticas, la dispersión. Este análisis nos ayuda a determinar si ocurren excitaciones electrónicas, vibracionales o rotacionales.

La dispersión es un concepto ampliamente utilizado en diversas ramas de la física. Se trata de un proceso que describe cómo partículas subatómicas, átomos, moléculas e incluso ondas se desvían de sus trayectorias originales debido a interacciones químicas o físicas, las cuales están influenciadas por fuerzas externas. Este fenómeno no solo es relevante en el ámbito teórico-experimental, sino que también se manifiesta en situaciones de la vida cotidiana. Por ejemplo, los rayos del sol se dispersan al atravesar la atmósfera terrestre, lo que explica el característico azul del cielo. Asimismo, la dispersión es fundamental en contextos menos comunes, como en los aceleradores de partículas, donde se analiza cómo las partículas cambian su trayectoria al interactuar entre sí.

Dentro de este formalismo podemos calcular una cantidad que desempeña un papel crucial en la física de dispersión: la **sección eficaz diferencial**. La sección eficaz diferencial (SED) proporciona información crucial sobre la probabilidad de que ocurra una interacción específica entre una partícula incidente y un objetivo como un átomo, un núcleo o un sistema. Esta magnitud describe

cómo se distribuyen las partículas expulsadas en términos del ángulo y energía tras la interacción con el objetivo [6].

Retomando lo previamente mencionado, es posible determinar la sección eficaz diferencial de un electrón con una molécula de agua o con clústers de ella. Es decir, podemos calcular la probabilidad de que ocurra una interacción electrón-agua desde el enfoque de una colisión elástica. Pues para estudiar la ionización de la molécula de agua que da lugar a la radiólisis del agua, un primer paso es estudiar su interacción a través de una dispersión elástica, es decir, sin cambio ni transferencia de energía.

1.1. Antecedentes

Los primeros estudios de dispersión elástica de electrones con moléculas poliatómicas como el metano (CH_4), el agua (H_2O) y el sulfuro de hidrógeno (H_2S) se llevaron a cabo en la década de 1960-1970, empleando un método teórico basado en ecuaciones diferenciales y aproximaciones de Hartree-Fock [7], un método que permite calcular las funciones de onda de los estados ligados de la molécula de agua y que sigue vigente en la actualidad para este campo de estudio. Posteriormente, se llevaron a cabo investigaciones experimentales para determinar la sección eficaz diferencial de la molécula de agua en estado gaseoso, utilizando dos rangos de energía: primero para bajas energías que van desde los 4 eV hasta los 200 eV [8] seguidamente, para altas energías en el rango de 100 eV hasta 1000 eV [9]. Para ello, se empleó el método de haz cruzado, una técnica para estudiar interacciones con moléculas en estado gaseoso, debido a su capacidad para controlar la densidad y distribución del gas objetivo. Más adelante, nuevamente se realizaron experimentos con el agua en estado gaseoso con el fin de comparar estos resultados con un modelo teórico utilizando el método multicanal de Schwinger, el cual proporciona un marco teórico más preciso para problemas de dispersión en la mecánica cuántica, así como la inclusión de efectos de polarización de la molécula, calculando no solo la sección eficaz diferencial, sino también la sección eficaz integral y la sección eficaz de transferencia de momentos para un mejor análisis de los resultados [10]. En trabajos más recientes, se ha estudiado la dispersión de partículas en la molécula de agua, clusters y agregados de ella por medio de modelos teóricos y computacionales, especialmente en energías por debajo de 10 eV donde los efectos cuánticos son dominantes [11]. Incluyendo el método Dirac-Hartree-Fock que abarca efectos relativistas.

En este trabajo nos enfocaremos en estudiar una interacción elástica entre un electrón con un sistema de cinco moléculas de agua, pues gracias a su estructura molecular, la molécula de agua puede enlazarse con 4 moléculas más. Utilizando un modelo teórico basado en la aproximación de Born y la solución de la ecuación de Schrödinger, considerando solamente el potencial coulombiano que experimenta la partícula incidente con cada átomo de la molécula de agua, es decir, con el oxígeno y ambos hidrógenos, los cuales se consideran protones para mejor aproximación. Al ser un choque elástico, nuestro sistema (las cinco moléculas de agua) permanecerá en su estado base antes y después de la dispersión. Calcularemos y analizaremos la sección eficaz diferencial variando la energía de incidencia y ángulos de dispersión de la partícula. Considerando al electrón y al positrón como partículas incidentes e ignorando los efectos relativistas que pueden ocurrir durante el proceso.

Capítulo 2

Marco teórico

En este capítulo se presenta la base conceptual necesaria para comprender el desarrollo del trabajo de investigación.

2.1. Molécula de agua

2.1.1. Estructura molecular

A lo largo de los siglos XVIII y XIX, hallazgos científicos establecieron los fundamentos para la comprensión de la estructura molecular del agua que hoy conocemos. Sin embargo, fue en 1804 cuando Louis Gay-Lussac y Alexander von Humboldt determinaron la proporción exacta para generar una molécula de agua, pues descubrieron que dos volúmenes de hidrógeno reaccionan con un volumen de oxígeno, siendo así la fórmula química del agua H_2O . Actualmente, gracias a las técnicas de espectroscopía y difracción, se ha conseguido un conocimiento más detallado de la estructura de esta molécula, permitiendo determinar con precisión la distancia y el ángulo de separación entre cada átomo, los cuales profundizaremos a continuación.

En la molécula de agua, dos átomos de hidrógeno están unidos al átomo de oxígeno por medio de un enlace covalente; debido a su configuración electrónica, comparten pares de electrones para alcanzar el nivel de energía más estable. No obstante, más allá del enlace covalente, podemos indagar cómo sucede esta interacción y la razón de la estructura geométrica en forma de "V", estudiando primero a cada átomo de manera individual.

El átomo de hidrógeno, estudiado a gran detalle en mecánica cuántica, está conformado por un protón y un neutrón en su núcleo, con un electrón orbitando a su alrededor. El orbital en el que se encuentra su electrón es de nivel 1 y tipo S. Mientras que el oxígeno tiene 8 electrones orbitando a su alrededor, de los cuales 2 se encuentran en $1s$, 2 en $2s$ y 4 en $2p$ en su capa más externa, según la configuración electrónica (figura 2.1).

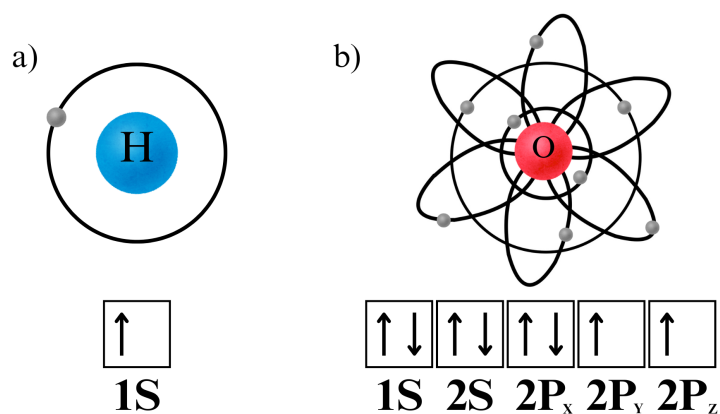


Figura 2.1: a) Átomo de hidrógeno y su configuración electrónica, b) Átomo de oxígeno y su configuración electrónica

Los últimos electrones del oxígeno en los orbitales $2p_y$ y $2p_z$ se dicen estar desapareados, los cuales se complementan con los electrones de los hidrógenos para llenar su nivel de energía en la molécula de agua. A pesar de ello, la estructura peculiar de la molécula en forma de "V" se debe a la hibridación de orbitales. Los orbitales híbridos son combinaciones matemáticas de los orbitales atómicos puros [12]. Dado que el átomo de oxígeno tiene 6 electrones en el segundo nivel de energía, se combina el orbital $2s$ con los tres orbitales $2p$, para crear cuatro nuevos orbitales, denominados orbitales híbridos sp^3 , los cuales se distribuyen en una geometría tetraédrica alrededor del núcleo del oxígeno.

Dos de estos orbitales híbridos sp^3 contienen pares de electrones no enlazantes, mientras que los otros dos orbitales, con solo un electrón, participan en la formación de los enlaces covalentes $O-H$, solapándose con los orbitales $1s$ de los dos átomos de hidrógeno, formando así la molécula de agua. Hay que notar que los ángulos de la forma tetrahédrica que se generan por los 4 orbitales híbridos del oxígeno son cercanos a $109,5^\circ$; sin embargo, la presencia de los pares electrónicos no enlazantes ocupa más espacio en los orbitales enlazados, generando una repulsión adicional sobre los enlaces $O-H$, reduciendo el ángulo hasta $104,5^\circ$ entre los hidrógenos y formando una distancia de enlace de $96pm$ entre el oxígeno y el hidrógeno, dada su distribución electrónica [13]. Aunque esta distancia puede variar muy insignificativamente dependiendo del estado en el que se encuentre [14].

Debido a esta estructura, la molécula de agua se le conoce como una molécula dipolar permanente (dos polos, uno en el oxígeno y el otro en los hidrógenos). A causa de la pérdida de electrones de los hidrógenos, éstos se cargan positivamente, obteniendo una carga $\delta+$ [15]. En cambio, el oxígeno se carga negativamente por ser más electronegativo que el hidrógeno, es decir, tiene la tendencia de atraer electrones hacia sí [12] obteniendo una carga $\delta-$ (fig 2.2).

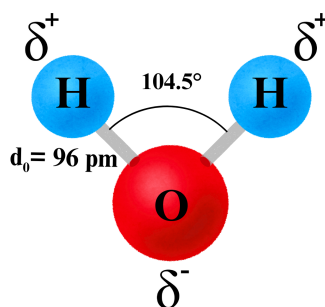


Figura 2.2: estructura de la molécula de agua

El momento dipolar (μ) para una sola molécula de agua es $1,855D$ y es obtenido dependiendo de la carga y distancia de separación de los centros de carga positiva y negativa, expresado en debyes (D). Esta propiedad facilita la participación en las interacciones con otras moléculas o iones polares, permitiendo que ocurran muchas reacciones en soluciones acuosas.

2.1.2. Puentes de hidrógeno

Hemos analizado hasta ahora la estructura de la molécula de agua de forma individual; sin embargo, el agua puede encontrarse en tres estados físicos: sólido, líquido y gaseoso; y no como una molécula aislada, sino formando un conjunto de ellas.

La polaridad de la molécula le permite interactuar con otras moléculas, por medio de una fuerza intermolecular. Esta fuerza ocurre cuando un hidrógeno cargado parcialmente positivo $\delta+$ que ya está unido covalentemente a un átomo, en este caso un oxígeno, es atraído por otro átomo electronegativo; puede ser otro oxígeno e inclusive un átomo de flúor o nitrógeno. Denominando a esta fuerza de atracción entre moléculas como **enlace por puente de hidrógeno**.

Una molécula de agua puede llegar a realizar 4 puentes de hidrógeno con otras moléculas de agua, que a su vez estas pueden enlazarse con otras 4 moléculas, cómo se ve en la figura 2.3 dónde las líneas punteadas representan los puentes de hidrógeno y las líneas continuas los enlaces covalentes O-H. Es por esta razón que en nuestro modelo, se estudia la interacción de dispersión con 5 moléculas de agua.

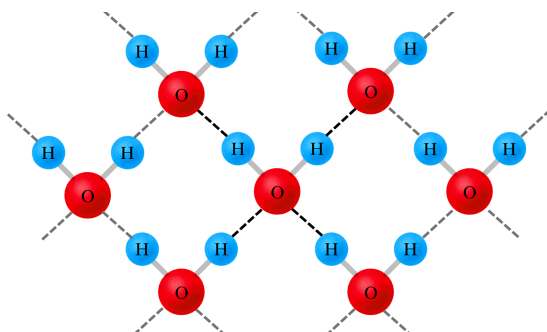


Figura 2.3: Una molécula de agua puede tener 4 enlaces por puentes de hidrógeno

Las distancias entre los puentes de hidrógeno en las moléculas de agua no son completamente constantes, sino que varían dependiendo de las condiciones físicas y químicas, como la presión y

la temperatura, pues para bajas temperaturas, las distancias son simétricas y organizadas, dando explicación a la estructura cristalina del hielo, mientras que a temperaturas altas, en estado líquido, se cortan y forman continuamente, y en estado gaseoso, se debilitan completamente, presentándose de manera individual.

Los enlaces por puente de hidrógeno existen ampliamente en la naturaleza, y no solo son dados para unir varias moléculas de agua. Particularmente, nos interesa su interacción con otras moléculas en estado líquido, ya que es en esta fase donde actúa como componente estructural de macromoléculas importantes dentro del ADN, como la doble hélice o la unión entre diferentes grupos, como proteínas y polisacáridos, entre otros [16].

2.2. Teoría de dispersión

A lo largo de los años, la humanidad ha buscado comprender la composición fundamental de la materia. Esta exploración ha trascendido el conocimiento a nivel atómico inicial, ampliándose gracias a los avances obtenidos mediante experimentos de dispersión. Desde el experimento pionero de Rutherford, que reveló que los átomos concentran masa y carga eléctrica en el núcleo (1911), hasta investigaciones más recientes donde se ha descubierto que más allá de los neutrones y protones existen partículas aún más pequeñas, denominadas quarks, que constituyen los bloques fundamentales de estas partículas subatómicas(1968).

La dispersión es un fenómeno físico que describe cómo partículas (subatómicas, átomos o moléculas) se desvían de sus trayectorias originales debido a interacciones químicas o físicas, influenciadas por fuerzas externas como el flujo del medio, la gravedad, la difusión térmica (movimiento browniano) o **campos electromagnéticos**. Este concepto es esencial en diversos campos, en ingeniería para la fabricación de concreto forzado con nanomateriales, mejorando sus propiedades estructurales [17]; la detección de sustancias mediante interrogación neutrónica en la seguridad; medición de humedad en suelos y granos en la agricultura [18]; crucial en tratamientos como la hadronterapia para la curación del cáncer en la medicina [19], entre otros.

En todos estos procesos de dispersión, la partícula o partículas interactuantes pueden experimentar transferencia o no de energía interna entre las partículas, las cuales se pueden clasificar como dispersión elástica e inelástica.

2.2.1. Dispersión elástica

Este proceso ocurre cuando no hay transferencia de energía interna entre las partículas involucradas, aunque la dirección de las partículas puede cambiar.

Algunos ejemplos de este tipo de dispersión ocurren en mecanismos de interacción de radiación electromagnética con la materia, como lo es la dispersión de neutrones y la dispersión coherente.

Dispersión por neutrones

Cuando un neutrón libre incide sobre un núcleo, puede ser dispersado sin que el núcleo se excite a un estado de mayor energía. Este caso es considerado una dispersión elástica, ya que la energía cinética total del neutrón y el núcleo permanece constante antes y después de la interacción.

Dispersión coherente

La dispersión coherente, también conocida como dispersión clásica o dispersión de Rayleigh, ocurre cuando una onda electromagnética induce la oscilación de un electrón, que a su vez reirra-

diará la energía a la misma frecuencia y longitud de onda que la radiación incidente (Fig 2.4). Como no hay transferencia de energía en el medio, el único efecto es la dispersión del fotón en ángulos pequeños.

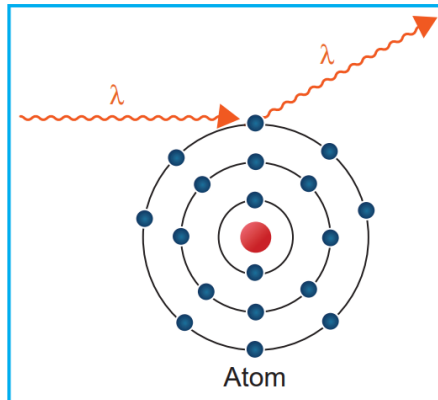


Figura 2.4: Diagrama que ilustra el proceso de dispersión coherente. El fotón dispersado tiene la misma longitud de onda que el fotón incidente. No se transfiere energía [20]

2.2.2. Dispersión inelástica

Este fenómeno ocurre cuando parte de la energía cinética del sistema se transforma en otra energía, como excitación interna, vibración o calor. Algunos ejemplos de estas interacciones son el efecto fotoeléctrico, dispersión de Compton y producción de pares.

Efecto fotoeléctrico

El efecto fotoeléctrico es un fenómeno en el que un fotón es absorbido por un átomo y, como resultado, transfiere toda su energía a un electrón orbital, que es expulsado (Fig 2.5). Esto deja al átomo en un estado excitado con una vacante en su capa electrónica. La vacante puede ser llenada por un electrón orbital externo con la emisión de un rayo X característico o bien existe la posibilidad de emisión de electrones Auger.

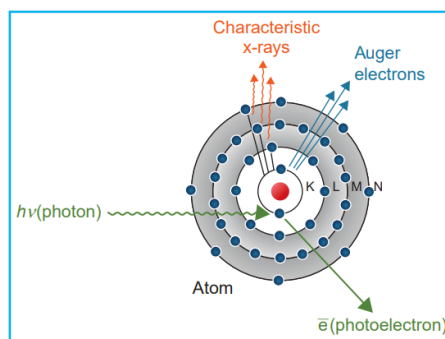


Figura 2.5: Ilustración del efecto fotoeléctrico [20]

Efecto Compton

En este proceso, un fotón de alta energía interactúa con un electrón atómico como si fuera un electrón “libre” ya que su energía de enlace es despreciable en comparación con la del fotón incidente. Durante la interacción, el electrón absorbe parte de la energía del fotón y es emitido en un ángulo θ (Fig. 2.6), mientras que el fotón con menor energía se dispersa en un ángulo ϕ .

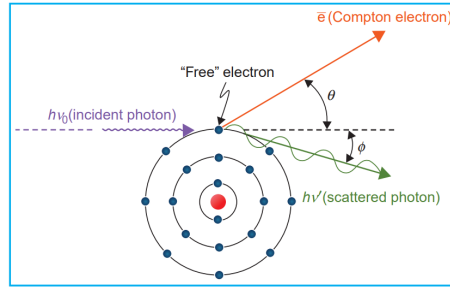


Figura 2.6: Ilustración del efecto Compton [20]

Producción de pares

Si la energía del fotón es superior a 1,02 MeV, el fotón puede interactuar con la materia a través del mecanismo de producción de pares. En este proceso (Fig 2.7), el fotón interactúa fuertemente con el campo electromagnético de un núcleo atómico y renuncia a toda su energía en el proceso de creación de un par formado por un electrón y un positrón. Debido a que la energía de masa en reposo del electrón es de 0,51 MeV, se requiere una energía mínima de 1,02 MeV para crear el par de electrones.

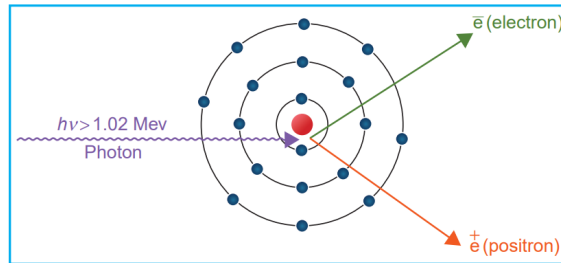


Figura 2.7: Ilustración del proceso de producción de pares [20]

2.3. Formalismo clásico

En mecánica clásica, Goldstein presenta la dispersión de partículas como un problema de fuerzas centrales. Sin embargo, a escala atómica, los efectos cuánticos pueden hacer que las predicciones clásicas sean inexactas, aunque muchas de ellas siguen siendo buenas aproximaciones. Dado que ambos enfoques describen el fenómeno de dispersión de manera similar, discutiremos y analizaremos ambos formalismos.

El problema de dispersión estudia la interacción de una partícula con un centro de fuerza fijo. A medida que la partícula se acerca al centro de fuerza, ésta se desviará de la trayectoria original, resultando en una trayectoria hiperbólica (Fig. 2.8). Denominamos parámetro de impacto b a la

distancia perpendicular entre la trayectoria inicial de la partícula y el eje z , que pasa por el centro de dispersión. Por otro lado, el ángulo de dispersión, θ representa la desviación angular entre la trayectoria inicial y final de la partícula tras la interacción. Dada la energía inicial E , el parámetro de impacto b y las fuerzas de interacción entre el centro de dispersión y la partícula, podemos calcular el ángulo de dispersión θ .

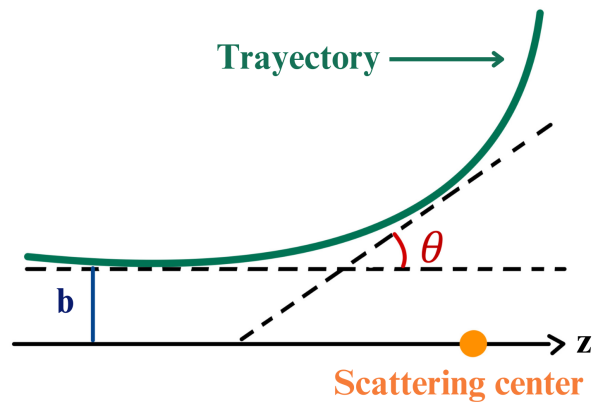


Figura 2.8: Dispersión clásica

2.4. Sección eficaz diferencial

Durante el proceso de dispersión, ya sea elástica o inelástica, podemos conocer qué tan probable es que ocurra esta interacción gracias a una expresión de suma importancia, la **sección eficaz diferencial (SED)**.

La partícula incidente a través de un área infinitesimal ($d\sigma$) se dispersa dentro de un ángulo sólido ($d\Omega$) (Fig. 2.9). Aquí $d\sigma$ representa el área de un rectángulo, con lados $bd\phi$ y db , mientras que el ángulo sólido $d\Omega$ se define como la razón entre un área proyectada sobre la superficie de esfera unitaria cuyos lados son $R\sin\theta d\phi$ y $Rd\theta$ y el cuadrado de su radio. Su unidad de medida es el estereorradián (**sr**).

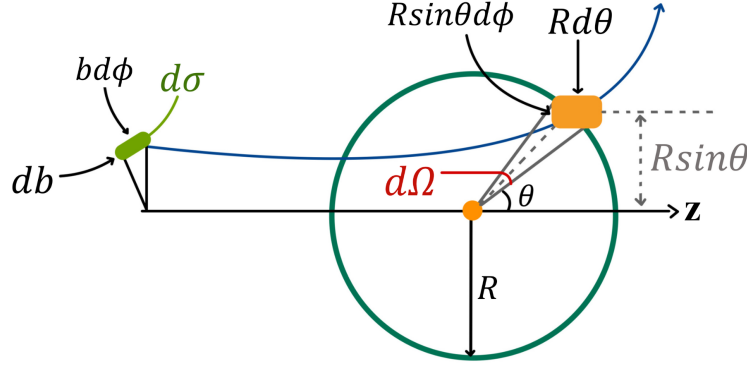


Figura 2.9: Dispersión en un ángulo sólido

Siendo entonces el diferencial de área

$$d\sigma = (bd\phi)(db), \quad (2.1)$$

y el ángulo sólido

$$d\Omega = \frac{(Rd\theta)(R\sin\theta d\phi)}{R^2} = \sin\theta d\theta d\phi, \quad (2.2)$$

Dividiendo 2.1 entre 2.2, obtenemos la sección eficaz diferencial definida por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|. \quad (2.3)$$

En realidad, cuando se realizan experimentos de dispersión, no se hace incidir una sola partícula, sino un conjunto de ellas a través de un haz incidente. Este haz se caracteriza especificando su intensidad J_{inc} (también denominada densidad de flujo), la cual representa el número de partículas que atraviesan una determinada área por unidad de tiempo.

De este modo, la sección eficaz diferencial puede definirse como la cantidad de partículas dispersadas dentro de un elemento de ángulo sólido $d\Omega$ en la dirección (θ, ϕ) por unidad de tiempo y por unidad de flujo incidente:

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{1}{J_{inc}} \frac{dN(\theta, \phi)}{d\Omega}. \quad (2.4)$$

Este formalismo no será de gran utilidad para nuestro sistema, puesto que estamos hablando a escalas atómicas; sin embargo, es importante analizarlo para poder comprender a nivel clásico cómo surge el ángulo sólido y así llevarlo al formalismo cuántico por medio de la densidad de flujo.

2.5. Formalismo cuántico

Para la dispersión cuántica, debemos tratar las cosas un poco diferentes. A nivel atómico, las partículas no colisionan de una forma literal, sino que experimentan interacciones electromagnéticas. En la mecánica cuántica, la función de onda es aquella que describe todo el estado en el que se encuentre nuestro sistema. Por ello, se considera el caso de una dispersión elástica entre dos partículas no relativistas sin espín de masas m_1 y m_2 .

Durante el proceso de dispersión, las partículas interactúan entre sí independientemente del tiempo. Podemos describir el sistema de dos partículas con estados estacionarios

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-iE_T t/\hbar}, \quad (2.5)$$

donde E_T es la energía total y $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{-\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_T \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (2.6)$$

$\hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ es el potencial que representa la interacción entre ambas partículas. En este caso, la interacción entre m_1 y m_2 depende solamente de la distancia relativa $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, es decir $\hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{V}(r)$, y podemos reescribir la ecuación (2.6) en el marco de referencia del centro de masa con solamente una partícula $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ que se mueve en el potencial $\hat{V}(r)$:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(r) + \hat{V}(r) \psi(r) = E \psi(r). \quad (2.7)$$

El problema de dispersión entre dos partículas se reduce a resolver la ecuación 2.7 cuya solución asintótica permite determinar la sección eficaz diferencial en el marco del centro de masa (CM). Estas soluciones permiten calcular la probabilidad de que una partícula se disperse en un ángulo sólido d_Ω en una dirección específica (θ, ϕ) [21].

En este formalismo, queremos tratar a las partículas incidentes como un paquete de ondas debido a la dualidad onda-partícula, el cual debe ser espacialmente grande para que la propagación durante la interacción no sea despreciable. Por lo tanto, representamos a la partícula incidente como una onda plana que viaja a lo largo del eje z .

$$\phi_{inc}(r) = A e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}. \quad (2.8)$$

Donde \vec{k}_0 es el vector de onda inicial con

$$k_0^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad (2.9)$$

y A es un factor de normalización. Después de la dispersión, la función de onda consta de una parte no dispersada que se propaga en la dirección de avance como una onda plana y una parte dispersada que se propaga a lo largo de alguna dirección (θ, ϕ) como una onda esférica; su amplitud depende de la dirección (θ, ϕ) a lo largo de la cual se detecta y, por lo tanto,

$$\phi_{sc}(r) = A f(\theta, \phi) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r}, \quad (2.10)$$

donde $f(\theta, \phi)$ se denomina **amplitud de dispersión**, \vec{k} es el vector de onda asociado con la partícula dispersada, y θ es el ángulo entre \vec{k}_0 y \vec{k} como se muestra en la figura 2.10.a.

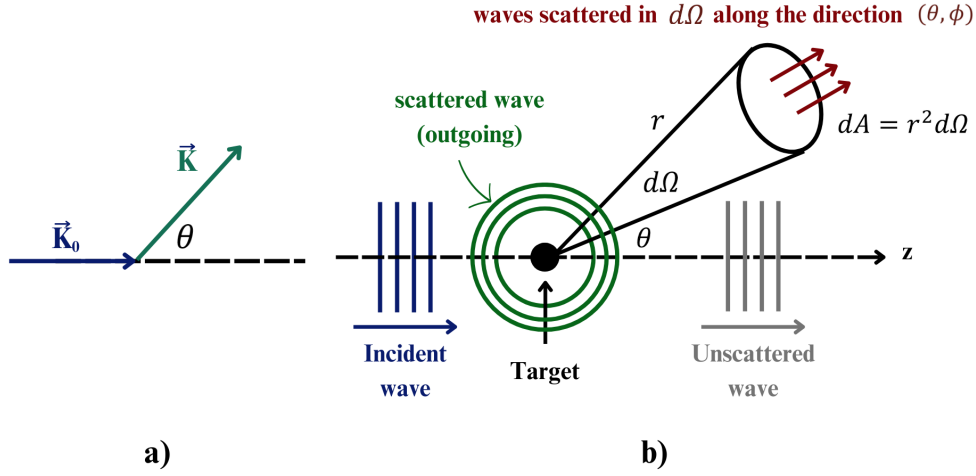


Figura 2.10: a) Ángulo entre los vectores de onda incidente y disperso \vec{k}_0 y \vec{k} . b) Ondas incidentes y dispersas: la onda incidente es una onda plana, $\phi_{inc}(r) = Ae^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}$, y la onda dispersa, $\phi_{sc}(r) = Af(\theta, \phi) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r}$, es una onda saliente.

Después de que se ha producido la dispersión (Figura 2.10.b), la onda total consiste en una superposición de la onda plana incidente (2.8) y la onda dispersa (2.10):

$$\Psi(\vec{r}) = \phi_{inc}(\vec{r}) + \phi_{sc}(\vec{r}) \simeq A \left[e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} \right], \quad (2.11)$$

donde A es un factor de normalización que se calculará a continuación en la siguiente sección junto con $f(\theta, \phi)$ y $d\sigma/d\Omega$ para mostrar que la sección eficaz diferencial viene dada en términos de la amplitud de dispersión.

2.5.1. Amplitud de dispersión

La amplitud de dispersión $f(\theta, \phi)$ juega un papel central en la teoría de la dispersión, ya que determina la sección eficaz diferencial [21]. Para ver esto, introduzcamos primero las densidades de flujo incidente y disperso.

$$\vec{J}_{inc} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\phi_{inc} \vec{\nabla} \phi_{inc}^* - \phi_{inc}^* \vec{\nabla} \phi_{inc}), \quad (2.12)$$

$$\vec{J}_{sc} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\phi_{sc} \vec{\nabla} \phi_{sc}^* - \phi_{sc}^* \vec{\nabla} \phi_{sc}), \quad (2.13)$$

sustituyendo 2.8 en 2.12 y 2.10 en 2.13 y tomando las magnitudes de las expresiones obtenidas, tenemos que

$$J_{inc} = |A|^2 \frac{\hbar k_0}{\mu}, \quad (2.14)$$

y

$$J_{sc} = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu r^2} |f(\theta, \phi)|^2. \quad (2.15)$$

Ahora bien, recordando que el número $dNA(\theta, \phi)$ de las partículas dispersas en un elemento de ángulo sólido $d\Omega$ en la dirección (θ, ϕ) pasan a través de un elemento de superficie $dA = r^2 d\Omega$ por unidad de tiempo, el cual está dado por:

$$dN(\theta, \phi) = J_{sc} r^2 d\Omega. \quad (2.16)$$

Cuando combinamos 2.15 con 2.16:

$$\frac{dN}{d\Omega} = J_{sc} r^2 = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} |f(\theta, \phi)|^2, \quad (2.17)$$

y ahora sustituyendo en 2.17 y 2.12 en 2.4

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{J_{inc}} \frac{dN}{d\Omega} = \frac{k}{k_0} |f(\theta, \phi)|^2. \quad (2.18)$$

Dado que el factor de normalización A no contribuye a la sección transversal diferencial, lo tomaremos igual a uno. Para la dispersión elástica, k_0 es igual a k ; por lo tanto, la ecuación 2.18 se reduce a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2. \quad (2.19)$$

Por lo tanto, el problema de determinar la sección eficaz diferencial $d\sigma/d\Omega$ se reduce al de obtener la amplitud de dispersión $f(\theta, \phi)$.

Para encontrar la amplitud de dispersión $f(\theta, \phi)$ debemos obtener la sección eficaz diferencial en el marco del centro de masa a partir de una forma asintótica de la solución de la ecuación de Schrödinger 2.7 que puede ser escrita de la siguiente manera:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r})\psi(\vec{r}). \quad (2.20)$$

La solución general a esta ecuación consiste en la suma de dos componentes: una solución general a la ecuación homogénea (que no es nada más que una onda plana incidente) y una solución particular a 2.20, la cual se puede expresar en términos de la función de Green:

$$\psi(\vec{r}) = \phi_{inc}(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r'. \quad (2.21)$$

Al resolver la función de Green, la amplitud de dispersión es:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d^3 r' = -\frac{\mu^2}{2\pi\hbar^2} \left| \langle \Phi | \hat{V} | \Psi \rangle \right|. \quad (2.22)$$

donde $\phi(\vec{r})$ es una onda plana, $\phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ y \vec{k} es el vector de onda dispersada; la integración con respecto a la variable r' se extiende al espacio.

Y la sección eficaz diferencial está dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} \hat{V}(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d^3 r' \right|^2 = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \langle \Phi | \hat{V} | \Psi \rangle \right|^2. \quad (2.23)$$

Vemos que la amplitud de dispersión sólo depende de θ y no de ϕ , pues existe cierta simetría cilíndrica.

2.6. La primera aproximación de Born

La primera aproximación de Born consiste en aproximar la función de onda dispersa por una onda plana, considerando que el potencial es lo suficientemente débil.

Reescribiendo la amplitud de dispersión y la sección eficaz diferencial en la primera aproximación, se obtiene la siguiente relación:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) d^3r \right|^2, \quad (2.24)$$

donde

$$\vec{q} = |\vec{k}_0 - \vec{k}|, \quad (2.25)$$

y $\hbar\vec{q}$ es el momento transferido.

Siendo para una dispersión elástica $|\vec{k}_0| = |\vec{k}|$:

$$q = |\vec{k}_0 - \vec{k}| = \sqrt{k_0^2 + k^2 - 2k_0k \cos\theta} = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

Capítulo 3

Marco metodológico

3.1. La molécula de agua como oscilador armónico

Cómo siguiente paso, abordaremos a la molécula de agua como un oscilador armónico, pues necesitamos estudiar su comportamiento vibratorio, asimilándolo a la hamiltoniana de este modelo.

La molécula de agua es considerada una molécula poliatómica, pues está conformada por 3 átomos, por lo que posee 9 grados de libertad: 3 de traslación, 3 de rotación y 3 vibracionales. Para analizar a profundidad la hamiltoniana de una molécula poliatómica, existen modelos más sofisticados y detallados que consideran la teoría de grupos para la simetría de la molécula y la estructura electrónica de estas. Sin embargo, para fines prácticos, los modos de vibración son los que nos permitirán considerar a la molécula de agua como un oscilador armónico. Pues en la molécula se pueden identificar los siguientes tipos de vibraciones fundamentales (figura 3.1) :

- **Estiramiento simétrico O-H:** Los dos enlaces OH se alargan y acortan simultáneamente.
- **Estiramiento asimétrico O-H:** Un enlace OH se alarga mientras el otro se acorta.
- **Flexión H-O-H:** Los hidrógenos se mueven hacia dentro y fuera de la molécula, alterando el ángulo HOH.

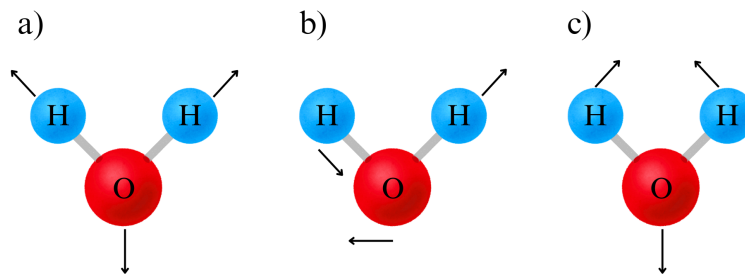


Figura 3.1: a) Estiramiento simétrico O-H, b) Estiramiento asimétrico O-H y c) Flexión H-O-H

Siendo la Hamiltoniana del oscilador armónico unidimensional:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2, \quad (3.1)$$

la cual será suficiente para estudiar nuestro sistema, considerando la distancia de los puentes de hidrógeno como una variable adaptable a cualquier estado en el que se encuentre la molécula de agua, dados los estiramientos que puedan ocurrir durante las vibraciones.

3.2. Hamiltoniano del sistema

Cómo primer paso, encontraremos la función de onda, la cual puede obtenerse por medio del enfoque de la solución directa del Hamiltoniano de Schrödinger.

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (3.2)$$

Donde \hat{H} es el operador Hamiltoniano, Ψ la ecuación de onda y E la energía del sistema.

Se considera un sistema de cinco moléculas de agua, como se muestra en la figura 3.2, fijando un oxígeno en el origen (O_1) de nuestro sistema de referencia. En este arreglo, las moléculas están conectadas por puentes de hidrógeno y se encuentran en su estado fundamental. Como aproximación, las moléculas se consideran como dos protones alrededor del oxígeno en lugar del átomo de hidrógeno, donde se considera la carga del protón como la carga total del átomo de hidrógeno ($Q_p = +e$) y el oxígeno con carga negativa $Q_O = -2e$, recordando que la molécula de agua es considerada una molécula dipolar.

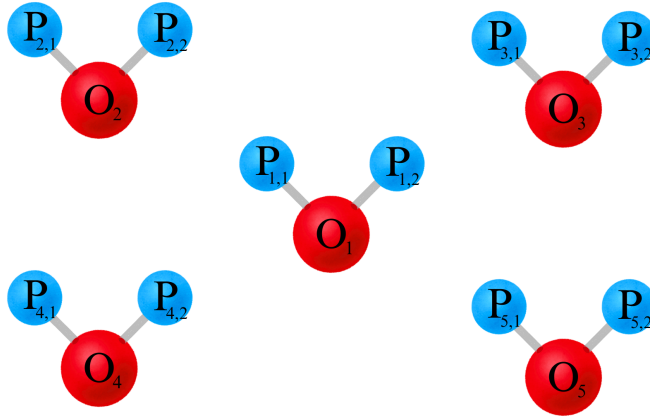


Figura 3.2: Diagrama del sistema

El Hamiltoniano total del sistema se expresa como la suma de los hamiltonianos entre el oxígeno central y el protón con el que se enlaza por puente de hidrógeno:

$$\hat{H} = \hat{H}_{O_2, P_{1,1}} + \hat{H}_{O_3, P_{1,2}} + \hat{H}_{O_4, P_{4,2}} + \hat{H}_{O_5, P_{5,1}}. \quad (3.3)$$

Cada protón vibra respecto al oxígeno de manera independiente a los demás protones y con la misma frecuencia de oscilación, por tanto, cada expresión se escribe como un oscilador armónico independiente:

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2M_{P_{1,1}}}\nabla_{P_{1,1}}^2 + \frac{1}{2}M_{P_{1,1}}\omega^2 r_1^2 - \frac{\hbar^2}{2M_{P_{1,2}}}\nabla_{P_{1,2}}^2 \\
& + \frac{1}{2}M_{P_{1,2}}\omega^2 r_2^2 - \frac{\hbar^2}{2M_{P_{4,2}}}\nabla_{P_{4,2}}^2 \\
& + \frac{1}{2}M_{P_{4,2}}\omega^2 r_3^2 - \frac{\hbar^2}{2M_{P_{5,1}}}\nabla_{P_{5,1}}^2 + \frac{1}{2}M_{P_{5,1}}\omega^2 r_4^2.
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Dónde $M_{P_{i,j}}$ es la masa de cada protón por estar posicionado el oxígeno en el origen.

Con:

\vec{r}_1 : Distancia de interacción del protón $P_{1,1}$ al oxígeno O_2 ,

\vec{r}_2 : Distancia de interacción del protón $P_{1,2}$ al oxígeno O_3 ,

\vec{r}_3 : Distancia de interacción del protón $P_{4,2}$ al oxígeno O_1 ,

\vec{r}_4 : Distancia de interacción del protón $P_{5,1}$ al oxígeno O_1 ,

Resolviendo cada una de estas Hamiltonianas por el método de separación de variables:

$$H_1\Psi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1) = E_1\Psi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1), \tag{3.5}$$

$$H_2\Psi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2) = E_2\Psi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2), \tag{3.6}$$

$$H_3\Psi_3(r_3, \theta_3, \varphi_3) = E_3\Psi_3(r_3, \theta_3, \varphi_3), \tag{3.7}$$

$$H_4\Psi_4(r_4, \theta_4, \varphi_4) = E_4\Psi_4(r_4, \theta_4, \varphi_4). \tag{3.8}$$

Entonces:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_{P_{1,1}}}\nabla_{P_{1,1}}^2 + \frac{1}{2}M_{P_{1,1}}\omega^2 r_1^2\right]\Psi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1) = E_1\Psi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1), \tag{3.9}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_{P_{1,2}}}\nabla_{P_{1,2}}^2 + \frac{1}{2}M_{P_{1,2}}\omega^2 r_2^2\right]\Psi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2) = E_2\Psi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2), \tag{3.10}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_{P_{4,2}}}\nabla_{P_{4,2}}^2 + \frac{1}{2}M_{P_{4,2}}\omega^2 r_3^2\right]\Psi_3(r_3, \theta_3, \varphi_3) = E_3\Psi_3(r_3, \theta_3, \varphi_3), \tag{3.11}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_{P_{5,1}}}\nabla_{P_{5,1}}^2 + \frac{1}{2}M_{P_{5,1}}\omega^2 r_4^2\right]\Psi_4(r_4, \theta_4, \varphi_4) = E_4\Psi_4(r_4, \theta_4, \varphi_4). \tag{3.12}$$

Cuya solución de cada una de las ecuaciones se divide en una solución radial: $R_{n,l}(r_j)$, que corresponde a los **polinomios de Hermite** y una solución angular: $Y_{l,m}(\theta_j, \varphi_j)$, donde esta última son los **armónicos esféricos** y l , n y m son los números cuánticos.

En términos generales, podemos escribir cada una de las ecuaciones como:

$$\Psi_{n,l,m}(r_j, \theta_j, \varphi_j) = R_{n,l}(r_j)Y_{l,m}(\theta_j, \varphi_j). \tag{3.13}$$

Y las soluciones completas del sistema serán el producto de las soluciones individuales. Siendo la eigenfunción del sistema:

$$\begin{aligned}
\Psi_{n,l,m}(r_1, \theta_1, \varphi_1; r_2, \theta_2, \varphi_2; r_3, \theta_3, \varphi_3; r_4, \theta_4, \varphi_4) \\
= R_{n,l}(r_1)Y_{l,m}(\theta_1, \varphi_1)R_{n,l}(r_2)Y_{l,m}(\theta_2, \varphi_2) \\
R_{n,l}(r_3)Y_{l,m}(\theta_3, \varphi_3)R_{n,l}(r_4)Y_{l,m}(\theta_4, \varphi_4).
\end{aligned} \tag{3.14}$$

3.3. Colisión de un electrón

En esta sección, calcularemos la expresión de la SED para una colisión elástica entre un electrón y un sistema de cinco moléculas de agua. Partimos de la eigenfunción del sistema ya obtenida en la ecuación (3.14), y utilizamos el formalismo de la mecánica cuántica para describir la interacción entre el electrón incidente y las moléculas de agua.

3.3.1. Definición de la masa reducida y la sección eficaz diferencial

Definimos la masa reducida μ del sistema como:

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \approx m_e,$$

donde m_p es la masa del protón de la molécula al ser más masiva que m_e , la masa del electrón incidente, podemos aproximar la masa reducida a sólo la masa del electrón m_e . La SED $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ se expresa en términos de la amplitud de dispersión $f(\theta)$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle \right|^2. \quad (3.15)$$

Aquí, Ψ_f y Ψ_i son los estados final e inicial del sistema, respectivamente, y \hat{V} es el potencial de interacción.

3.3.2. Estados inicial y final del sistema

Asumimos que el sistema de moléculas de agua es lo suficientemente masivo como para permanecer en su estado base después de la dispersión. Los estados inicial y final del sistema (electrón incidente más las moléculas de agua) están dados por una función de onda plana, respectivamente :

$$\Psi_i(\vec{r}_e, \vec{k}_0, \vec{r}^j) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_e} \Psi_{0,0,0}(\vec{r}^j), \quad (3.16)$$

$$\Psi_f(\vec{r}_e, \vec{k}, \vec{r}^j) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_e} \Psi_{0,0,0}(\vec{r}^j). \quad (3.17)$$

Donde $e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_e}$ y $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_e}$ son las funciones de onda del electrón incidente antes y después de la dispersión y $\Psi_{0,0,0}(\vec{r}^j)$ es la función de onda del estado base de las moléculas de agua. Estado base del oscilador armónico:

$$\Psi_{0,0,0}(r_i, \theta_i, \varphi_i) = R_{0,0}(r_i) Y_{0,0}(\theta_i, \varphi_i) \quad (3.18)$$

Con:

$$R_{0,0}(r_i) = \frac{2}{\sqrt{\sqrt{\pi}}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{M\omega r_i^2}{2\hbar}} \quad (3.19)$$

$$Y_{0,0}(\theta_i, \varphi_i) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (3.20)$$

3.3.3. Potencial de interacción

Analizando el potencial coulombiano presente, el electrón experimenta una fuerza atractiva con ambos protones:

$$-\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|}, \quad (3.21)$$

y de repulsión con el oxígeno:

$$\frac{2e^2}{r_e}. \quad (3.22)$$

Suponiendo que el oxígeno está en el origen y la posición del electrón incidente y los protones están dados por: \vec{r}_e y \vec{d}_0 respectivamente, siendo $|\vec{d}_0| \approx 96pm$.

La ecuación general del potencial de interacción está dada por

$$\hat{V}(\vec{r}') = -\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} + \frac{2e^2}{r_e}. \quad (3.23)$$

3.3.4. Amplitud de dispersión del sistema

La amplitud de dispersión $f(\theta)$ se calcula de la siguiente manera, dada la ecuación 2.24:

$$f(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \int d^3r' \Psi_{0,0,0}^*(\vec{r}') \left[-\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} + \frac{2e^2}{r_e} \right] \Psi_{0,0,0}(\vec{r}'). \quad (3.24)$$

Donde:

\vec{q} es el momento transferido por el electrón a la molécula (ecuación 2.25).

Reescribiendo la ecuación 3.24 con la función de onda del sistema (ecuación 3.14) tenemos:

$$\begin{aligned} \Rightarrow f(\theta) = & -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \\ & \left[-\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} + \frac{2e^2}{r_e} \right] \\ & \Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Distribuyendo:

$$\begin{aligned} \Rightarrow f(\theta) = & \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \left[\int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \right. \\ & \frac{2e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} \Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \\ & - \int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \\ & \left. \frac{2e^2}{r_e} \Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \right]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Vemos que las últimas integrales están con respecto a $d^3r'_1, d^3r'_2, d^3r'_3, d^3r'_4$ y la función $\frac{2e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|}$ y $\frac{2e^2}{r_e}$ no dependen de las coordenadas de las moléculas de agua, (r'), lo que permite factorizar esas funciones fuera de la integral sobre $\Psi_{0,0,0}(r'_i, \theta'_i, \varphi'_i)$.

$$\int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \frac{2e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|}$$

$$\Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) = \frac{2e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} \int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4)$$

$$\Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \quad (3.27)$$

y

$$\int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \frac{2e^2}{r_e}$$

$$\Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) = \frac{2e^2}{r_e} \int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4)$$

$$\Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \quad (3.28)$$

$$\Rightarrow f(\theta, \varphi) = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \left[\frac{2e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} \int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \right.$$

$$\Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4)$$

$$- \frac{2e^2}{r_e} \int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r'_3 d^3r'_4 \Psi_{0,0,0}^*(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4)$$

$$\left. \Psi_{0,0,0}(r'_1, \theta'_1, \varphi'_1; r'_2, \theta'_2, \varphi'_2; r'_3, \theta'_3, \varphi'_3; r'_4, \theta'_4, \varphi'_4) \right] \quad (3.29)$$

Las integrales sobre las coordenadas espaciales, r'_i se simplifican gracias a la propiedad de ortonormalidad de estos estados, siendo la integral:

$$\int d^3r' \Psi_{0,0,0}^*(\vec{r}') \Psi_{0,0,0}(\vec{r}') = 1.$$

Por lo tanto, la amplitud de dispersión se reduce a:

$$\Rightarrow f(\theta) = \frac{e^2\mu}{\pi\hbar^2} \left[\int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} - \int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \frac{1}{r_e} \right]. \quad (3.30)$$

3.3.5. Resolución de integrales

La segunda integral de la expresión (3.30) se resuelve realizando un cambio de coordenadas:

$$\int \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e}}{r_e} d^3r_e = \int_0^\infty r_e dr_e \int_0^\pi e^{iqr_e \cos\theta_e} \sin\theta_e d\theta_e \int_0^{2\pi} d\phi_e = \frac{4\pi}{q^2}. \quad (3.31)$$

Siendo la amplitud

$$\Rightarrow f(\theta) = \frac{e^2\mu}{\pi\hbar^2} \left[\int \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e}}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} d^3r_e - \frac{4\pi}{q^2} \right]. \quad (3.32)$$

La primera integral se resuelve de manera análoga a la anterior, utilizando un cambio de variable y la propiedad de las funciones exponenciales:

$$\frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e}}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} = \frac{e^{i\vec{q}\cdot|\vec{r}_e - \vec{d}_0|}}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}_0},$$

$$\int \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e}}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} d^3r_e = \int \frac{e^{i\vec{q}\cdot|\vec{r}_e - \vec{d}_0|}}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}_0} d^3r_e = e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}_0} \int \frac{e^{i\vec{q}\cdot|\vec{r}_e - \vec{d}_0|}}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} d^3r_e = e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}_0} \frac{4\pi}{q^2}. \quad (3.33)$$

Reduciendo la amplitud de dispersión de la siguiente manera:

$$\Rightarrow f(\theta) = \frac{e^2\mu}{\pi\hbar^2} \left(e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}_0} \frac{4\pi}{q^2} - \frac{4\pi}{q^2} \right) = \frac{4e^2\mu}{\hbar^2 q^2} \left(e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}_0} - 1 \right). \quad (3.34)$$

3.3.6. Módulo de la amplitud de dispersión del sistema

Calculando ahora el módulo de la amplitud de dispersión del sistema:

$$|f(\theta)|^2 = \left| \frac{4e^2\mu}{\hbar^2 q^2} \left(e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}_0} - 1 \right) \right|^2, \quad (3.35)$$

$$\Rightarrow |f(\theta)|^2 = \frac{16\mu^2 e^4}{\hbar^4 q^4} (e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}_0} - 1)(e^{-i\vec{q}\cdot\vec{d}_0} - 1), \quad (3.36)$$

$$|f(\theta)|^2 = \frac{32\mu^2 e^4}{\hbar^4 q^4} (1 - \cos(\vec{q}\cdot\vec{d}_0)), \quad (3.37)$$

Con $q = 2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})$ y $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$

$$|f(\theta)|^2 = \frac{32\mu^2 e^4}{\hbar^4 [2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})]^4} (1 - \cos(\vec{q}\cdot\vec{d}_0)), \quad (3.38)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{e^4}{2E^2 \sin^4(\frac{\theta}{2})} \left[1 - \cos \left(2 \left(\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} \right) \left(\sin(\frac{\theta}{2}) \right) \left(d_0 \cos \frac{\alpha}{2} \right) \right) \right]. \quad (3.39)$$

siendo θ el ángulo de dispersión del electrón, α el ángulo de separación entre cada protón en la molécula de agua y E la energía de incidencia del electrón.

3.4. Colisión de un positrón

Si hacemos colisionar un positrón con el sistema, ignorando los efectos relativistas, el positrón experimenta una fuerza de repulsión de Coulomb con los protones ($\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|}$) y de atracción ($\frac{-2e^2}{r_e}$) con el oxígeno.

Siendo la amplitud de dispersión:

$$f(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \int d^3r' \Psi_{0,0,0}^*(\vec{r}') \left[\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} - \frac{2e^2}{r_e} \right] \Psi_{0,0,0}(\vec{r}'). \quad (3.40)$$

Resolviendo análogamente al caso de un electrón,

$$f(\theta) = \frac{e^2\mu}{\pi\hbar^2} \left[\int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \frac{1}{r_e} - \int d^3r_e e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e} \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} \right], \quad (3.41)$$

$$\Rightarrow f(\theta) = \frac{e^2\mu}{\pi\hbar^2} \left[\frac{4\pi}{q^2} - \int \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_e}}{|\vec{r}_e - \vec{d}_0|} d^3r_e \right], \quad (3.42)$$

$$\Rightarrow f(\theta) = \frac{e^2 \mu}{\pi \hbar^2} \left(\frac{4\pi}{q^2} - e^{i\vec{q} \cdot \vec{d}_0} \frac{4\pi}{q^2} \right) = \frac{4e^2 \mu}{\hbar^2 q^2} \left(1 - e^{i\vec{q} \cdot \vec{d}_0} \right), \quad (3.43)$$

$$|f(\theta)|^2 = \left| \frac{4e^2 \mu}{\hbar^2 q^2} \left(1 - e^{i\vec{q} \cdot \vec{d}_0} \right) \right|^2. \quad (3.44)$$

Vemos que el resultado de la amplitud de dispersión para el positrón es el mismo que para el electrón.

$$\left| \left(1 - e^{i\vec{q} \cdot \vec{d}_0} \right) \right|^2 = \left| \left(e^{i\vec{q} \cdot \vec{d}_0} - 1 \right) \right|^2. \quad (3.45)$$

Por la propiedad de los números complejos, la sección eficaz diferencial será la misma que al hacer colisionar un electrón que un positrón.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{e^4}{2E^2 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \left[1 - \cos \left(2 \left(\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} \right) \left(\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right) \left(d_0 \cos \frac{\alpha}{2} \right) \right) \right]. \quad (3.46)$$

Capítulo 4

Resultados y análisis

Para mejor interpretación en este capítulo, se desarrolló un código que modela la interacción partícula-molécula basado en la expresión obtenida para simular la SED en función de la energía de incidencia y el ángulo de dispersión de la partícula. Este código permite graficar la SED en relación con ambos parámetros, facilitando su análisis y visualización.

De acuerdo con la ecuación 3.46, la sección eficaz diferencial depende solamente de la energía de incidencia y del ángulo de dispersión de la partícula. Pues la integral que describe la amplitud de dispersión se simplifica al no contemplar las distancias entre los puentes de hidrógeno que conectan una molécula de agua con otra.

Según hallazgos previos, se ha estudiado la dispersión elástica electrón-agua de forma teórica para energías desde 2.14 eV hasta 6 eV [22] y experimental para energías menores de 100 eV [10]. Dado que hay registros del cálculo de la SED para tres clústers de agua con energías hasta de 10 MeV donde se consideran los efectos relativistas [11], se propone estudiar la interacción hasta 500 eV, pues no se consideran estos efectos en nuestro estudio.

4.1. Gráfico de SED con respecto al ángulo de dispersión

En esta sección se grafica la SED con respecto al ángulo de dispersión variando de 0° a 360° para energías bajas, de 1 a 80 eV, pues este es el rango de energía reportado en investigaciones anteriores [23].

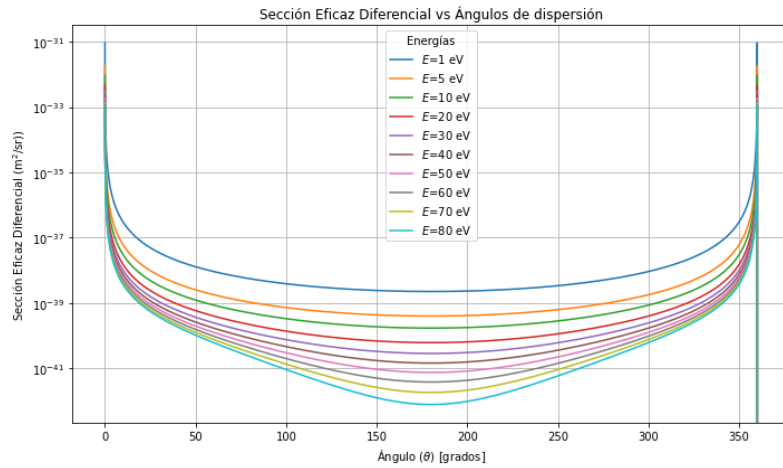


Figura 4.1: Sección eficaz diferencial con respecto al ángulo de la partícula dispersada para energías hasta 80 eV. Los datos del eje y se presentan en escala logarítmica.

En la figura 4.1 se observa que la SED presenta una forma simétrica en torno a los 180° , pues tiene máximos en ángulos pequeños (de 0° a 10°) y grandes (360°), con mínimos en la región central, entre 120° y 180° . Esto quiere decir que hay menos partículas dispersadas hacia atrás y más partículas dispersadas hacia adelante.

Esta tendencia general coincide cualitativamente con los datos experimentales [10] en los que se representan curvas de SED para energías bajas de 1 a 30 eV. Aunque para energías mayores de 30 eV, el modelo predice una caída más acentuada de la SED, lo cual no se ve tan pronunciado en investigaciones teóricas que trabajan con energías hasta 50 eV [24]. Para ambos casos, la magnitud de la SED en estos rangos de energías oscila con un **máximo** en ($\sim 10^{-21} m^2/Sr$) y **mínimo** de ($\sim 10^{-23} m^2/Sr$), mientras que, en el modelo propuesto, se observan máximos de ($\sim 10^{-31} m^2/Sr$) y mínimos de ($\sim 10^{-41} m^2/Sr$), es decir, existe una diferencia de hasta 13 órdenes de magnitud por debajo de los valores presentados en la literatura.

Analizando ahora la SED para altas energías a partir de 90 eV hasta 500 eV, el comportamiento de la SED empieza a oscilar a partir de 110 eV y se observan patrones de interferencia (figura 4.2). De igual manera, notamos que conforme la energía aumenta, los patrones de interferencia son más notorios.

4.2 Gráfico de SED con respecto a la energía de incidencia

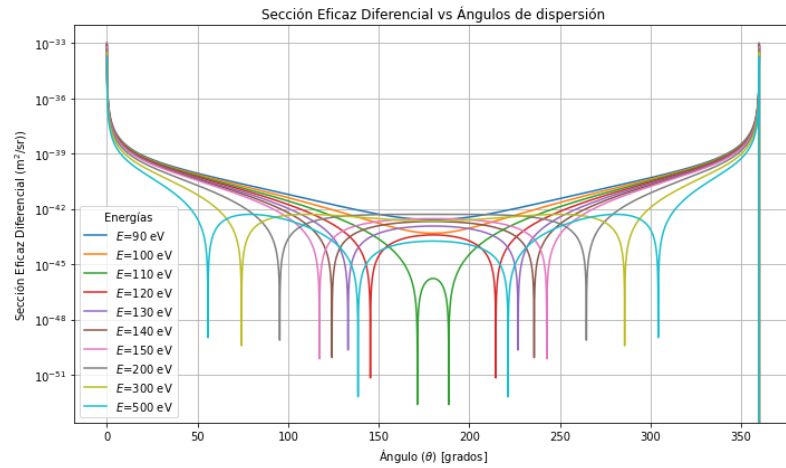


Figura 4.2: Sección eficaz diferencial con respecto al ángulo de la partícula dispersada para altas energías hasta 500 eV.

4.2. Gráfico de SED con respecto a la energía de incidencia

Graficando ahora la SED con respecto a la energía de incidencia de la partícula, con energías hasta 100 eV, podemos ver que casi un gran número de ellas se dispersa a 0° y la SED es alta. Por otro lado, se puede ver que hay más partículas que interactúan en ángulos pequeños, de 0° hasta 45° (figura 4.3).

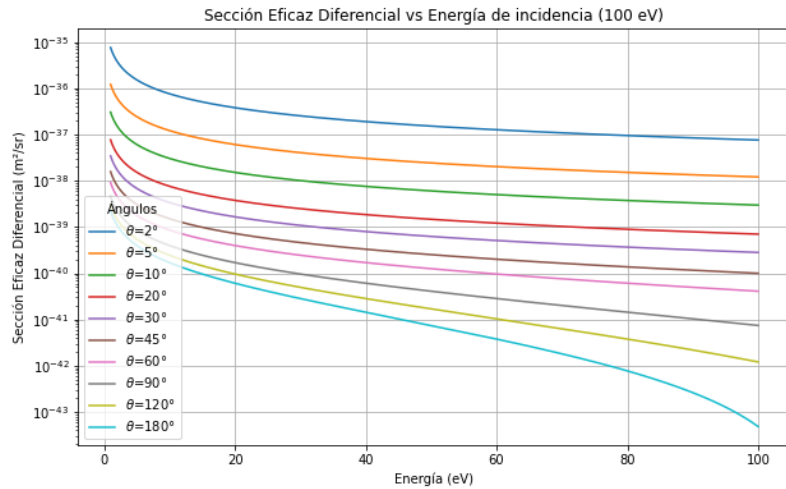


Figura 4.3: Sección eficaz diferencial con respecto a energía de la partícula incidente para bajas energías hasta 100 eV.

Para altas energías hasta 500 eV, se empieza a ver un comportamiento oscilatorio a partir de ángulos de 60° , 90° y 180° . Cada uno contiene puntos mínimos de SED con distintos rangos de energía.

4.2 Gráfico de SED con respecto a la energía de incidencia

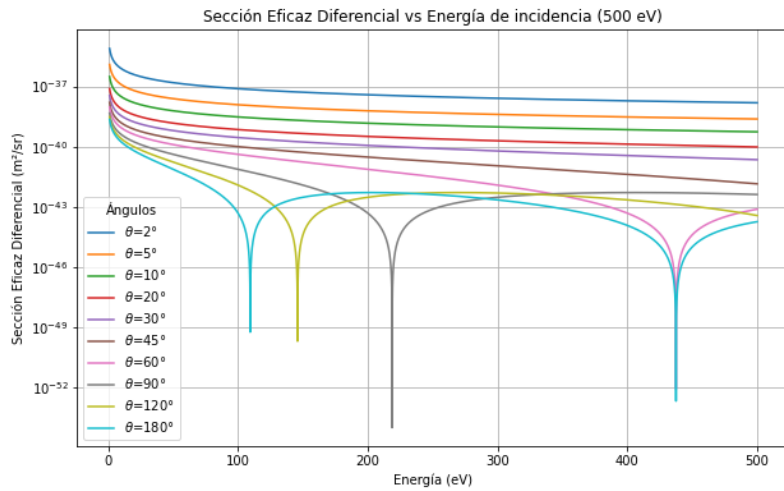


Figura 4.4: Sección eficaz diferencial con respecto a energía de la partícula incidente para bajas energías hasta 500 eV.

Graficando nuevamente, altas grandes energías, de 10 MeV, se observan patrones de interferencia más pronunciados, incluso para ángulos de dispersión bajos de 20° .

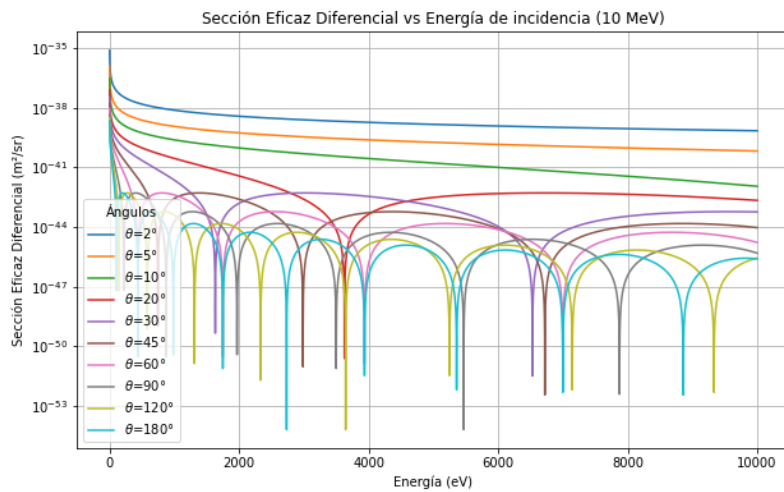


Figura 4.5: Sección eficaz diferencial con respecto a energía de la partícula incidente para altas energías hasta 20 MeV.

Capítulo 5

Conclusiones y discusión

En este estudio calculamos la sección eficaz diferencial al colisionar un electrón Y un positrón con un sistema de cinco moléculas de agua, considerando que cada molécula puede formar hasta cuatro enlaces por puente de hidrógeno. El modelo parte definiendo el estado del sistema con la ecuación de Schrödinger como la superposición de cuatro osciladores armónicos, bajo un potencial interacción coulombiano entre la partícula incidente (positrón o electrón) y los átomos que conforman la molécula. Para una mejor aproximación, se consideró a los hidrógenos como protones y al oxígeno con una carga equivalente a dos electrones. Al ser una dispersión elástica, consideramos al sistema lo suficientemente masivo, permaneciendo en su estado base antes y después de la interacción. Los estados inicial y final del sistema se definieron en función de una onda plana y se calculó la amplitud de dispersión, de la cual se deriva la SED. Al estar la función de onda en términos de las distancias de los puentes de hidrógeno y el potencial de interacción en términos de la distancia electrón-oxígeno y positrón-oxígeno, las integrales se simplifican utilizando la propiedad de ortogonalidad de la función de onda. Reduciendo la expresión como si fuera para una sola molécula.

Podemos observar que la primera representación matemática se deriva del modelo de Rutherford, el cual describe cómo una carga dispersa a otra por medio de una interacción coulombiana. A mayor energía, menor dispersión y gran parte de las partículas se dispersan en ángulos pequeños. En cambio, la segunda expresión representa un efecto oscilatorio; tener una función coseno dentro de la expresión introduce un efecto de interferencia, lo que significa que la dispersión no es uniforme. Cuanto mayor sea la energía o el ángulo, más osciladores habrá; estos patrones son visibles en energías a partir de 110 eV y ángulos mayores de 60° para energías de hasta 500 eV, ya que a mayores energías, se presenta la mecánica cuántica relativista, la cual no fue considerada en este estudio.

La relación encontrada para calcular la SED en la colisión elástica de un electrón con un sistema de cinco moléculas de agua es la misma que al hacer colisionar un positrón, debido a la equivalencia en las amplitudes de dispersión, lo que implica que ambos procesos siguen la misma relación matemática. Aunque en la actualidad no existen radioterapias que utilicen directamente positrones para el tratamiento del cáncer. Esta expresión depende de la geometría de las moléculas de agua, determinada por el ángulo de separación entre los átomos de hidrógeno, la energía de incidencia y el ángulo dispersado de la partícula.

Al comparar las magnitudes de las SED del modelo propuesto con los que existen en la literatura, se observan diferencias de hasta 13 órdenes de magnitud por debajo de los valores reportados. Esta diferencia sugiere incluir interacciones adicionales que permitan describir con mayor precisión el sistema físico. No obstante, la distribución angular concuerda con los resultados previos, presentando máximos en ángulos pequeños (0° - 10°) y grandes (360°) y un mínimo en regiones intermedias (entre 120° y 180°) como se muestra en la figura 4.1.

5.1. Perspectivas

Para futuros trabajos, se podría reescribir el potencial de Coulomb explícitamente entre las distancias de interacción con cada molécula del sistema y considerar osciladores armónicos acoplados para una mayor precisión del modelo. Adicionalmente, en una dispersión real, para procesos no elásticos, podría haber excitaciones vibracionales o rotacionales en las moléculas o inclusive un rompimiento de la estructura inicial que da origen a la radiólisis del agua, por lo que se tendría en consideración modificar la función de onda final del sistema.

Apéndice A

Funciones de Green

En este apartado se presenta el uso de la función de Green para resolver la ecuación de Schrödinger en el problema de dispersión. La función de Green $G(\vec{r} - \vec{r}')$ satisface la ecuación diferencial:

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{A.1})$$

la solución general para la función de onda $\Psi(\vec{r})$ se expresa en términos de la función de Green como:

$$\Psi(\vec{r}) = \Phi_{inc}(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G(\vec{r} - \vec{r}')V(\vec{r}')\Psi(\vec{r}')d^3r' \quad (\text{A.2})$$

donde:

- $\Phi_{inc}(\vec{r})$ es la onda incidente
- $G(\vec{r} - \vec{r}')$ es la función de Green del operador diferencial en la ecuación de Schrodinger
- $V(\vec{r}')$ es el potencial responsable de la dispersión

La función de Green se obtiene resolviendo su ecuación en el espacio de Fourier. Se parte de la representación:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \tilde{G}(\vec{q})d^3q \quad (\text{A.3})$$

Al sustituir en la ecuación diferencial, se obtiene que su transformada de Fourier es:

$$\tilde{G}(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2} \quad (\text{A.4})$$

lo que permite escribir la función de Green en el espacio real como una integral en el espacio de momentos.

Para resolver la integral, se usan coordenadas esféricas y se realiza un cambio de variable $x = \cos \theta$. Tras integrar sobre los ángulos, la función de Green toma la forma:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi 2i|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{qe^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}}{q^2 - k^2} dq \quad (\text{A.5})$$

Esta integral se resuelve cerrando el contorno en el plano complejo. Los polos están en $q = \pm k$, y dependiendo del contorno elegido, se obtiene:

$$G_+(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{A.6})$$

Esta solución representa una onda esférica saliente desde $r^{\vec{}}$. Entonces, la función de onda total se expresa como:

$$\Psi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}')\Psi(\vec{r}')d^3r' \quad (\text{A.7})$$

Bibliografía

1. Kirk GS, Raven JE y Schofield M. Los filósofos presocráticos: historia crítica con selección de textos. RBA Libros y Publicaciones, 2024.
2. Asensio P. Hidrógeno y pila de combustible. Obtenido de <http://www.fenercom.com/pdf/publicaciones/cuadernos-energias-renovables-paratodos-hidrogeno-y-pila-de-combustible> 2007.
3. Podgoršak EB et al. Radiation physics for medical physicists. Vol. 1. Springer, 2006.
4. Venturi M y D'Angelantonio M. Applications of radiation chemistry in the fields of industry, biotechnology and environment. Springer, 2017.
5. N° CDIT. 398, Determinación De La Dosis Absorbida En Radioterapia Con Haces Externos. Inf. téc. IAEA-TRS-398, Viena, 2005.
6. Leroy C y Rancoita PG. Principles of radiation interaction in matter and detection. World Scientific, 2011.
7. Gianturco F y Thompson D. The scattering of slow electrons by polyatomic molecules. A model study for CH₄, H₂O and H₂S. Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics 1980;13:613.
8. Danjo A y Nishimura H. Elastic scattering of electrons from H₂O molecule. Journal of the Physical Society of Japan 1985;54:1224-7.
9. Katase A, Ishibashi K, Matsumoto Y et al. Elastic scattering of electrons by water molecules over the range 100-1000 eV. Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics 1986;19:2715.
10. Khakoo M, Silva H, Muse J, Lopes M, Winstead C y McKoy V. Electron scattering from H₂O: Elastic scattering. Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics 2008;78:052710.
11. Triggiani F, Morresi T, Taioli S y Simonucci S. Elastic scattering of electrons by water: An ab initio study. Frontiers in Materials 2023;10:1145261.
12. De Ege Seyhan yJF. Química Orgánica: estructura y reactividad. Barcelona:Recerté print, 1997.
13. Kuhn H, Waldeck DH y Försterling HD. Principles of physical chemistry. John Wiley & Sons, 1999.
14. Aouchiche H, Champion C y Oubaziz D. Electron and positron elastic scattering in gaseous and liquid water: a comparative study. Radiation Physics and Chemistry 2008;77:107-14.
15. Sheng Meng Wang E. Water. Springer.
16. LOZANO TRUEL J et al. BIOQUIMICA Y BIOLOGIA MOLECULAR: PARA CIENCIAS DE LA SALUD. 2000.
17. Cruz Moreno DMA. Mejoramiento del efecto barrera en materiales endurecidos de cemento portland mediante una aplicación innovadora de nano-partículas de silicio. Tesis doct. Universidad Autónoma de Nuevo León, 2014.

BIBLIOGRAFÍA
BIBLIOGRAFÍA

18. Lerma TA, Combatt EM y Palencia MS. Efecto de la temperatura sobre coloides de suelos agrícolas mediante dispersión dinámica de la luz. *Revista de Ciencias Agrícolas* 2015;32:94-103.
19. Arteaga Niego ME y Plazas MC. Efectos físicos de la terapia de electrones en la piel. *MOMENTO-Revista de Física* 2005.
20. Khan FM y Gibbons JP. *Khan's the physics of radiation therapy*. Lippincott Williams & Wilkins, 2014.
21. Zettili N. *Quantum mechanics: concepts and applications*. 2009.
22. Gianturco F. Scattering of low-energy electrons from polyatomic targets: the water molecule example. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 1991;24:3837.
23. Itikawa Y y Mason N. Cross sections for electron collisions with water molecules. *Journal of Physical and Chemical reference data* 2005;34:1-22.
24. Okamoto Y, Onda K e Itikawa Y. Vibrationally elastic cross sections for electron scattering from water molecules. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 1993;26:745.