

Tesis de Posgrado

Fundamentación y utilización de aproximaciones clásicas en colisiones de iones con átomos

Reinhold Larsson, Carlos Oscar

1987

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Reinhold Larsson, Carlos Oscar. (1987). Fundamentación y utilización de aproximaciones clásicas en colisiones de iones con átomos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.

http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2073_ReinholdLarsson.pdf

Cita tipo Chicago:

Reinhold Larsson, Carlos Oscar. "Fundamentación y utilización de aproximaciones clásicas en colisiones de iones con átomos". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1987.

http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2073_ReinholdLarsson.pdf

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Tema de tesis

FUNDAMENTACION Y UTILIZACION DE APROXIMACIONES CLASICAS
EN COLISIONES DE IONES CON ATOMOS

Autor

Carlos Oscar Reinhold Larsson

Director de Tesis

Dr. Carlos Alberto Falcón

Lugar de trabajo:

Grupo de Colisiones atómicas

Instituto de Astronomía y Física de Espacio (CONICET)

Tesis presentada para optar al título de

Doctor en Ciencias Físicas

Noviembre 1987

- 2073 -
y.2

Expreso mi agradecimiento

al Dr. Carlos Falcón, director de esta tesis, por sus sugerencias y apoyo durante la realización de este trabajo.

al Dr. Jorge Miraglia por su apoyo, ideas y fructíferas discusiones.

a la Lic. Susana Blanco por su colaboración.

a mis compañeros del grupo de colisiones del IAFE M. Pacher, V. Rodriguez, A. González, L. Opradolce y M.S. Gravielle.

al Instituto de Astronomía y Física del Espacio y en especial al servicio de cómputo sin el cual no podría haber realizado este trabajo.

a los integrantes de los grupos de colisiones atómicas del Instituto de Física de Rosario y del Centro Atómico Bariloche, por su colaboración.

INDICE

	pag
RESUMEN	1
ABSTRACT	3
1 INTRODUCCION	5
2 FUNDAMENTOS	15
2-1 Interpretación hidrodinámica de la ecuación de Schrödinger	17
2-1-1 Especificación Euleriana	19
2-1-2 Comportamiento a altas velocidades del proyectil	22
2-1-2 Especificación Lagrangiana	23
2-2 La aproximación eikonal	28
2-3 La aproximación de Thomson	28
2-4 La aproximación de fluido clásico	30
2-4-1 Dinámica	32
2-4-2 Estado inicial	34
2-4-3 La función de onda de trayectorias clásicas	35
2-4-4 Desarrollos perturbativos	36
2-5 Cálculo de secciones eficaces	39
2-5-1 Proyección de la función de onda	39
2-5-2 El método de conteo de partículas	43
2-6 Aplicación a una colisión unidimensional	45
3 IMPLEMENTACION DE LA APROXIMACION CLASICA	51

3-1	Distribuciones iniciales	51
3-1-1	Blancos de un electrón	51
3-1-2	Blancos de dos electrones	57
3-2	Cálculo formal de secciones eficaces y leyes de escala	60
3-2-1	Ley de escala entre sistemas colisionantes con igual relación de cargas proyectil/blanco.....	62
3-2-2	Ley de escala entre dos conjuntos microcanónicos iniciales diferentes para el mismo sistema colisionante	63
3-2-3	Ley de escala entre una distribución inicial $f_i(E)$ y un conjunto microcanónico para el mismo sistema colisionante	64
3-3	Implementación numérica de la aproximación clásica: El método Monte Carlo de trayectorias clásicas (CTMC) ..	66
3-3-1	Generación de las condiciones iniciales electrónicas	66
3-3-2	Dinámica	68
3-3-3	Cálculo de probabilidades de transición y secciones eficaces	69
4	APLICACIONES	72
4-1	Secciones eficaces de ionización y captura electrónica en colisiones de iones multicargados con blancos de $H(1s)$ y $He^+(1s)$	72
4-2	Colisiones de iones multicargados con hidrógeno metaestable	76

4-3 Saturación de las secciones eficaces de excitación y ionización al aumentar la carga del proyectil	79
4-4 Colisiones de protones con He y Li ⁺	88
5 CONCLUSIONES y DESARROLLOS FUTUROS.....	95
APENDICE A: Unidades atómicas	101
APENDICE B: Equivalencia entre la formulación usual de la aproximación de Thomson y su formulación de parámetro de impacto	102
APENDICE C: Cálculo de las aproximaciones teóricas utilizadas en la colisión unidimensional de la sección 2-6.	105
ABREVIATURAS	109
REFERENCIAS	111
DESCRIPCION DE LAS FIGURAS	120
FIGURAS	131

RESUMEN

Esta tesis trata sobre los procesos de ionización y captura electrónica que ocurren como consecuencia de la colisión de un ion positivo pesado con un blanco formado por un núcleo pesado y un electrón activo. En el presente trabajo describiremos estos fenómenos mediante aproximaciones totalmente clásicas: los iones pesados proyectil y núcleo blanco son tratados como partículas clásicas, mientras que la función de onda asociada al electrón activo es tratada como un fluido clásico.

Se presenta una conexión original entre algunas aproximaciones clásicas de la teoría de colisiones y la mecánica cuántica. Esta conexión está basada en la interpretación hidrodinámica de la función de onda cuántica. Se precisan las aproximaciones cuánticas que conducen a una formulación semiclásica de los modelos de Thomson y Monte Carlo de trayectorias clásicas y se definen las funciones de onda asociadas a los mismos. Se hace una discusión acerca de los procedimientos que pueden ser utilizados para calcular secciones eficaces de dispersión. Se muestra que, si se integra la amplitud de transición por unidad de tiempo, se obtiene el correcto comportamiento de las secciones eficaces a altas energías de colisión.

También se presenta la implementación numérica del método

Monte Carlo de trayectorias clásicas. Se muestran distintas distribuciones iniciales que pueden utilizarse y se deducen, dentro del formalismo de la ecuación de Liouville, las leyes de escala asociadas a las secciones eficaces clásicas. Se indica cómo tomar muestras representativas de cada una de las posibles distribuciones iniciales a ser utilizadas.

El método Monte Carlo de trayectorias clásicas es utilizado para estudiar distintos sistemas colisionantes. Se presentan secciones eficaces totales de ionización y captura electrónica para colisiones de iones multicargados con blancos de $H(1s)$, $He^+(1s)$ y $H(2s)$ y se discute el rango de validez del método. Se muestra que, contrariamente a lo que predice la primera aproximación de Born, las secciones eficaces totales y simplemente diferenciales de ionización y excitación no aumentan indefinidamente con la carga del proyectil y se investiga la saturación de las mismas. También se estudian los sistemas $H^+ + He$ y $H^+ + Li^+$, los cuales involucran blancos de dos electrones, representando las interacciones mediante potenciales modelo y dentro del formalismo de electrones independientes. En todos los casos se obtiene un buen acuerdo con otros modelos teóricos y/o datos experimentales, salvo para la doble ionización de He.

ABSTRACT

This thesis deals with the ionization and electron-capture processes that take place as a consequence of the collision between a heavy positive ion and a target consisting in a heavy nucleus and an active electron. Completely classical approximations are used to describe these processes: the projectile and target-nucleus heavy ions are considered to be classical particles, while the wavefunction associated to the active electron is treated as a classical fluid.

A connection between quantum mechanics and some classical approximations is presented. This connection is based on the fluid-dynamical interpretation of the quantum wavefunction. The classical trajectory Monte Carlo and Thomson methods are derived as suitable approximations in a quantum mechanical formalism and the associated wavefunctions are defined. A discussion is made about the procedure to be used to calculate scattering cross sections. It is shown that if the transition amplitude per unit time is integrated, the correct behaviour of the cross sections at high collision energies is obtained.

The numerical implementation of the classical trajectory Monte Carlo method is also presented. Different initial distributions that may be used are shown and the scaling laws associated with the classical cross sections are deduced within

the Liouville equation formalism. The way to sample initial conditions representing different initial distributions is also shown.

The classical trajectory Monte Carlo method is employed to study different collision systems. Total ionisation and capture cross sections for fully stripped ions colliding with H(1s), He⁺(1s) and H(2s) targets are presented and the validity range of the classical approximation is discussed. It is shown that, contrarily to the predictions of the first Born approximation, total and single differential ionization and excitation cross sections are bound when the projectile charge is increased. The saturation of those cross sections is investigated. The systems H⁺+ He and H⁺+ Li⁺, which involve two-electron targets, are also studied by representing the interactions with model potentials and within the independent-electron formalism. Good agreement is found with other theoretical approximations and/or experimental data, except for double ionization of He.

1 - INTRODUCCION

La utilización de métodos clásicos para la descripción de colisiones entre partículas atómicas data de principios de siglo. En 1912 Thomson [1] calculó clásicamente secciones eficaces para el proceso de ionización de átomos por electrones y más tarde la teoría fue refinada por Thomas [2,3], Williams [4] y otros. Con el advenimiento de la mecánica cuántica, los métodos clásicos fueron dejados de utilizar hasta que, en la década del sesenta, Grynsinski [5-8], demostró que es posible calcular clásicamente y en forma muy simple secciones eficaces para los procesos de ionización y captura electrónica. Los resultados obtenidos alentaron a otros autores a continuar desarrollando la teoría, apareciendo numerosos trabajos en la misma década. Recopilaciones de los trabajos realizados en estos años fueron hechas por Burgess y Percival [9], McDowell y Coleman [10] (cap.3), Vriens [11], Bates y Kingston [12] y Percival y Richards [13].

En rasgos generales, los trabajos hasta aquí citados se encuadran en lo que se denomina la aproximación impulsiva clásica o bien la aproximación de encuentros binarios. Esta aproximación consiste en explicar los procesos de ionización o captura electrónica a partir de choques impulsivos entre el electrón y el proyectil o entre el electrón y el núcleo del blanco. Para el caso de ionización, se supone que el núcleo del

blanco es sólo un espectador durante la colisión y su interacción con las otras dos partículas sólo es 'conectada' al finalizar el choque, a efectos de analizar los estados finales resultantes. En los modelos más elaborados el núcleo blanco también determina la distribución inicial del electrón activo. La captura electrónica requiere la incorporación del blanco en el tratamiento de la dinámica de la colisión. En los modelos impulsivos esta reacción es explicada como un proceso de doble dispersión: el electrón primero colisiona con el proyectil y luego con el núcleo blanco. Esta segunda colisión hace posible que el electrón quede ligado al proyectil.

En el año 1966 se produce un nuevo avance en la utilización de métodos clásicos cuando Abrines y Percival [14,15] desarrollan un método basado en el tratamiento clásico del problema de tres cuerpos. Este modelo se conoce en la actualidad como método Monte Carlo de trayectorias clásicas (CTMC). Debido al esfuerzo de cómputo requerido casi no fue utilizado hasta 1977, cuando fue puesto en práctica por Olson y Salop [16]. Desde entonces, el método CTMC ha sido muy utilizado para calcular secciones eficaces totales de ionización y captura electrónica, obteniéndose notables acuerdos con resultados experimentales [17-44]. En los últimos años también se lo ha utilizado con igual éxito para el cálculo de secciones eficaces de ionización simplemente diferenciales [45-47,38] y doblemente diferenciales [48-50]. También se está utilizando

este método para estudiar colisiones en presencia de campos magnéticos fuertes [51] y colisiones con átomos exóticos [52,53]. En el presente también se está desarrollando un modelo clásico que tiene en cuenta la correlación electrónica para átomos con más de un electrón, el cual está basado en el análisis del problema de cuatro cuerpos [54-56].

En cuanto a la validez de la aproximación clásica, es muy poco lo que se ha investigado. Uno de los objetivos de la presente tesis es establecer una conexión entre algunas aproximaciones clásicas y la mecánica cuántica. En los trabajos de Abrines y Percival [15] y Percival y Richards [13,57] se sostiene que es posible establecer un principio de correspondencia generalizado, para el caso de que el electrón se encuentre en estados muy excitados (estados de Rydberg). Sin embargo, en la mayor parte de las aplicaciones de CTMC se estudian colisiones en las cuales el electrón se encuentra inicialmente en el estado fundamental del blanco. Como algunos autores reconocen, la razón por la cual el método CTMC es tan utilizado es que provee muy buenas secciones eficaces en la región de energías de colisión intermedias, donde es muy difícil usar un tratamiento cuántico o semiclásico. En lo que sigue se distinguirán tres rangos de energías: bajas, intermedias y altas, de acuerdo a que la velocidad del proyectil sea menor, comparable o mayor que el valor medio de la velocidad del electrón en su estado inicial.

El estudio de los procesos de ionización y captura electrónica por impacto de iones multicargados en la región de energías intermedias resulta de interés en conexión con aspectos prácticos del desarrollo de la fusión termonuclear controlada [58,59]. Como es sabido, las impurezas (iones multicargados) contenidas en un plasma de fusión Tokamak son responsables del enfriamiento del mismo. Estas impurezas colisionan con las partículas del plasma quitándoles sus electrones, luego de lo cual son deflectadas magnéticamente fuera del plasma, chocando con las paredes del contenedor. Como consecuencia de este choque, más impurezas son extraídas de las paredes, dificultando el calentamiento del plasma.

La región de energías intermedias es de tratamiento muy conflictivo en colisiones atómicas ya que la mayoría de las aproximaciones han sido desarrolladas para los casos límites de energías bajas o altas. Los problemas que aparecen en el rango de energías intermedias son que las probabilidades de transición son grandes y que es necesario describir simultáneamente los canales de ionización y captura electrónica. Los problemas se agravan aún más si la carga del proyectil se incrementa respecto de la del núcleo blanco. A energías intermedias existen pocas aproximaciones que provean secciones eficaces de ionización y captura electrónica por impacto de iones multicargados en buen acuerdo con datos experimentales. Dentro de estas

aproximaciones se encuentra el método CTMC.

A altas energías, las probabilidades de transición son pequeñas y por lo tanto pueden ser calculadas por medio de métodos perturbativos. Por otro lado, las probabilidades de captura son despreciables frente a las de ionización. Luego, las secciones eficaces de ionización pueden calcularse a partir de las probabilidades de transición al continuo del blanco. Sería incorrecto utilizar métodos perturbativos en la región de energías intermedias debido a que las probabilidades de transición son grandes. En general, los métodos perturbativos de altas energías no satisfacen la propiedad de unitariedad; es decir, la suma de todas las probabilidades de transición es distinta de uno. En la región de energías intermedias se observa que esta suma puede ser bastante mayor que uno, situación que se agrava cuando se aumenta la carga del proyectil. Un problema adicional de esta región energética es la importancia del canal de captura, razón por la cual no se puede suponer que la ionización consiste en transiciones al continuo del blanco. Esto es así debido a que existe un solapamiento no nulo (al finalizar la colisión) entre los estados ligados del proyectil y el continuo del blanco. Lo correcto sería decir que los estados de ionización corresponden a estados del continuo de la molécula proyectil-blanco. Existe una disputa sobre cuales métodos perturbativos logran una mejor descripción de los procesos que tienen lugar en la región de

energías intermedias. Entre los más exitosos para el proceso de ionización están las aproximaciones de Glauber [60], VPS generalizada [61], dipole close coupling [62], modified continuum distorted wave [63] y unitarised distorted wave [64].

El método más confiable para el estudio de los procesos de ionización y captura electrónica a energías intermedias es el de canales acoplados o close-coupling (ver [10] cap.4), que consiste en estudiar la evolución temporal de la función de onda desarrollando la misma en una cantidad finita de funciones de base. Originalmente, este método fue utilizado para el estudio de colisiones a bajas energías, utilizando bases de funciones consistentes en estados moleculares o bien estados atómicos centrados en el blanco y el proyectil. Formalmente, es posible extender el rango de validez de este método a la región de energías intermedias, si bien esto requiere la consideración de canales de ionización. Con ese propósito, y el de lograr una buena representación a pequeñas distancias internucleares, algunos autores han incluido estados centrados en el centro de masas proyectil-blanco como parte de la base en la cual se desarrolla la función de onda [65]. Otros autores han intentado utilizar un continuo 'discretizado' como parte de la base [66]. Entre los cálculos más exitosos de secciones eficaces de ionización mediante canales acoplados debe mencionarse el desarrollo de la función de onda en bases de pseudoestados [67,42-44]. El inconveniente que presenta el método de canales

acoplados es que frecuentemente es necesario utilizar una base demasiado grande para que las secciones eficaces converjan, lo que requiere un gran esfuerzo de cómputo.

En los últimos años también se han hecho intentos por integrar exactamente la ecuación de Schrödinger mediante métodos numéricos. Sin embargo, los autores que han seguido este camino se han encontrado con el problema de no poder discriminar en forma precisa las poblaciones de los distintos estados cuánticos finales. Los primeros trabajos fueron hechos con el método de diferencias finitas [68] o el de elementos finitos [69]. Sin embargo, estos métodos son insuficientes para estudiar el proceso de ionización debido a que deben utilizar una grilla de extensión finita. En 1984 fue propuesto un método numérico alternativo [70] denominado 'método de partícula', el cual provee una buena descripción del proceso de ionización, pero que presenta algunos problemas numéricos.

El éxito, no demasiado bien comprendido, del método CTMC ha impulsado la realización de este trabajo de tesis. Uno de los objetivos del mismo es dar los primeros pasos en el desarrollo de una conexión entre los métodos clásicos y la mecánica cuántica. En el capítulo 2 se muestra que los métodos CTMC y de Thomson pueden ser obtenidos de la mecánica cuántica a través de aproximaciones adecuadas en la interpretación hidrodinámica de la ecuación de Schrödinger [71]. Se muestra que el método CTMC

consiste en describir la evolución de la función de onda electrónica como si fuera un fluido clásico. Una vez hecha esta la conexión, es posible definir las funciones de onda asociadas a las aproximaciones clásicas. Como se muestra en el capítulo 2, los dos primeros órdenes de estas funciones de onda en potencias de la inversa de la velocidad del proyectil coinciden con los correspondientes cuánticos. Las funciones de onda clásicas son utilizadas en esta tesis para calcular probabilidades de transición en una colisión unidimensional. Este simple ejemplo muestra que, si se integran las amplitudes de transición clásicas por unidad de tiempo, se obtienen los correctos comportamientos de las secciones eficaces de excitación y captura electrónica a altas velocidades del proyectil. Por otro lado, se muestra que si se utiliza el conteo de partículas usual del método CTMC, se obtiene un comportamiento incorrecto de las secciones eficaces a altas energías.

En el capítulo 3 se describe la implementación numérica del método CTMC. En dicho capítulo se presentan distintas distribuciones iniciales utilizadas hasta el presente. Se desarrolla un método original para generar las condiciones iniciales electrónicas para el caso de potenciales generales y un conjunto inicial microcanónico [72,38]. Se enseña como tomar una muestra finita de condiciones iniciales de modo tal que represente correctamente la distribución inicial. También se

muestra la forma de calcular las secciones eficaces mediante el conteo de partículas y se deducen formalmente las leyes de escala asociadas a las mismas [71].

En el capítulo 4 se utiliza el método CTMC para estudiar distintos sistemas colisionantes. En las secciones 4-1 y 4-2 se presentan secciones eficaces totales de ionización y captura electrónica para colisiones de iones desnudos con $H(1s)$, $He^+(1s)$ y $H(2s)$ [73-75], calculadas con distintas distribuciones iniciales. Los resultados obtenidos son comparados con datos experimentales o/y otros cálculos teóricos. En la sección 4-3 se muestra que, contrariamente a lo que predice la primera aproximación de Born, las secciones eficaces de ionización y excitación no aumentan indefinidamente con la carga del proyectil, sino que parecieran saturar [76,74,47]. Este fenómeno es estudiado en detalle para el caso de colisiones de iones multicargados con $H(1s)$. Con este fin, se presentan secciones eficaces de ionización totales y simplemente diferenciales en función de la energía o el ángulo de los electrones emitidos, así como secciones eficaces de excitación a estados de Rydberg. En la sección 4-4 se estudian los sistemas $H^+ + He$ y $H^+ + Li^+$, que involucran blancos de dos electrones, representando las interacciones por medio de potenciales modelo y dentro del formalismo de electrones independientes [77,78,38]. Se presentan secciones eficaces totales de captura simple, ionización simple y ionización doble. En el caso de blancos de

1. **Implementar** un programa de desarrollo de recursos humanos que permita a la organización atraer, seleccionar, desarrollar y retener a los mejores talentos.

2. **Función de los recursos humanos** es el conjunto de actividades que se realizan para asegurar que la organización cuente con el personal necesario para cumplir sus objetivos.

3. **Analizar** la situación actual de la organización y determinar las necesidades de personal.

4. **Modelar** la estructura organizacional y determinar las funciones y responsabilidades de cada puesto.

5. **Recruitar** y seleccionar a los candidatos más adecuados para cada puesto.

6. **Desarrollar** a los empleados a través de programas de formación y desarrollo.

7. **Retener** a los empleados más valiosos de la organización.

8. **Modelar** la estructura organizacional y determinar las funciones y responsabilidades de cada puesto.

9. **Recruitar** y seleccionar a los candidatos más adecuados para cada puesto.

10. **Desarrollar** a los empleados a través de programas de formación y desarrollo.

11. **Retener** a los empleados más valiosos de la organización.

12. **Modelar** la estructura organizacional y determinar las funciones y responsabilidades de cada puesto.

13. **Recruitar** y seleccionar a los candidatos más adecuados para cada puesto.

14. **Desarrollar** a los empleados a través de programas de formación y desarrollo.

15. **Retener** a los empleados más valiosos de la organización.

2 FUNDAMENTOS

Como fue mencionado en la introducción, en la literatura científica no existe, hasta el presente, conexión formal alguna entre los métodos clásicos utilizados en colisiones atómicas y la mecánica cuántica. En este capítulo se desarrollará un camino para lograr dicha conexión [71]. Se demostrará que algunas aproximaciones clásicas pueden obtenerse a partir de la mecánica cuántica a través de aproximaciones apropiadas en la interpretación hidrodinámica de la ecuación de Schrödinger.

La sección 2-1 está dedicada a la interpretación hidrodinámica de la ecuación de Schrödinger. Se presenta la descripción Euleriana usual de la función de onda [79] y se desarrolla una descripción Lagrangiana original para la misma [71]. Se calculan las aproximaciones de primero y segundo orden para la densidad de probabilidad y el campo de velocidades cuánticos en potencias de $(1/v_p)$, siendo v_p la velocidad del proyectil incidente. Las secciones 2-2 y 2-3 muestran que los modelos eikonal y de Thomson pueden obtenerse como aproximaciones de altas energías en la descripción Lagrangiana de la función de onda. La sección 2-4 muestra que el método CTMC puede ser interpretado como una aproximación cuántica en la cual la función de onda electrónica es tratada como un fluido clásico. En las secciones 2-3 y 2-4 se introducen las funciones de onda asociadas a los modelos de Thomson y CTMC, las cuales

serán denotadas como TTW y CTW respectivamente. En estas secciones también se muestra que los primeros órdenes del desarrollo perturbativo en potencias de $(1/v_p)$ para la densidad de probabilidad espacial y el campo de velocidades asociados a TTW y CTW coinciden con sus correspondientes cuánticos.

Un problema muy conocido de las secciones eficaces clásicas para procesos directos es que las mismas no tienen el comportamiento asintótico correcto a altas velocidades del proyectil [10,11], el cual está dado por la primera aproximación de Born. Para salvar este inconveniente Percival y Richards [13,57] postularon una extensión del principio de correspondencia de Bohr, para el caso de colisiones que involucren estados muy excitados. Sin embargo, la mayor parte de las aplicaciones de CTMC estudian colisiones en las cuales el electrón se encuentra inicialmente en el estado fundamental del blanco. En este capítulo también se investigan las causas de este problema y se da una posible explicación de las mismas. En la sección 2-5 se discute la forma en que las secciones eficaces deberían ser calculadas y se hace notar que la falla de las aproximaciones clásicas a altas energías del proyectil se debe al método utilizado para calcular las mismas. Sin embargo, se observa que la aproximación clásica provee una buena función de onda a altas energías del proyectil y pequeñas distancias internucleares. En el caso de integrar la probabilidad de transición clásica por unidad de tiempo, se obtienen los

correctos comportamientos asintóticos de las secciones eficaces.

En la sección 2-6 se aplican las ideas de las secciones precedentes al caso de una colisión unidimensional. El objeto de esta sección es analizar la aplicabilidad de las funciones de onda CTW y TTW. Este tipo de análisis ya ha sido usado por varios autores [80-83]. La ventaja de una colisión unidimensional es que la ecuación de Schrödinger puede ser integrada numéricamente mediante la técnica de diferencias finitas. Luego, las aproximaciones pueden ser comparadas con resultados exactos. Debe notarse que el éxito de un determinado modelo en la descripción de una colisión unidimensional con potenciales de corto alcance, no implica un éxito equivalente en el tratamiento de problemas reales. Sin embargo, este modelo sencillo puede ser útil para revelar fallas en las aproximaciones.

2-1 INTERPRETACION HIDRODINAMICA DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER

En este capítulo se tratará la colisión de un ion pesado (proyectil) sin estructura que incide, con un parámetro de impacto \vec{b} y una velocidad \vec{v}_p , sobre un blanco consistente en un corazón pesado sin estructura y un electrón (ver fig.1).

Se considerarán aquellas colisiones para las cuales es

válida la aproximación semiclásica de parámetro de impacto (ver [10] cap.4 o [84] sec.III). Esta aproximación consiste en suponer que el movimiento de las partículas pesadas proyectil y núcleo blanco puede ser descrito clásicamente. También se utilizará la aproximación de trayectorias rectilíneas para los núcleos pesados, aunque casi no afecta al formalismo que describiremos en este capítulo. Esta aproximación consiste en suponer que el vector posición del proyectil está dado por $\vec{b} + \vec{v}_p t$ mientras que el núcleo blanco permanece en reposo. Las condiciones de validez de estas aproximaciones pueden resumirse en dos. Una primer condición es que la energía de colisión sea mucho mayor que la energía de ligadura del electrón en el blanco. Bajo esta condición es posible suponer que el movimiento relativo de los centros pesados prácticamente no es afectado por el electrón. La segunda condición está basada en el hecho de que, en el rango de energías intermedias y altas (e incluso entrando en la región de bajas energías), los parámetros de impacto bajo los cuales los procesos de ionización o captura electrónica son importantes tienen asociados ángulos de dispersión del proyectil muy pequeños (miliradianes). Como fue demostrado por McCarroll y Salin [85] para dicho rango de energías, el pasaje de un formalismo totalmente cuántico a la aproximación de parámetro de impacto sólo consiste en un cambio de coordenadas.

En definitiva, estudiaremos el movimiento de un electrón en

el potencial $U(\vec{r}, t) = U_T(\vec{r}) + U_P(\vec{r} - \vec{b} - \vec{v}_p t)$, donde \vec{r} es la posición del electrón y U_T y U_P son las interacciones del electrón con el núcleo del blanco y el proyectil respectivamente. La evolución de la función de onda electrónica estará dada por la ecuación de Schrödinger

$$i \hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + U(\vec{r}, t) \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad \dots(2.1)$$

donde m es la masa del electrón ($m=1$ u.a.).

La condición de contorno para la función de onda será

$$\Psi(\vec{r}, t) \xrightarrow[t \rightarrow -T]{} \phi_i(\vec{r}, t) = \varphi_i(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \quad \dots(2.2)$$

donde φ_i es un estado ligado del blanco con energía de ligadura E_i y $-T$ es un tiempo negativo que indica el comienzo de la colisión.

2-1-1 Especificación Euleriana

Como cualquier número complejo, la función de onda puede ser escrita de la siguiente forma

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{\rho(\vec{r}, t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{r}, t)} \quad \dots(2.3)$$

donde ρ (densidad de probabilidad) y S (fase de la función de onda) son funciones reales. Con esta substitución, la ecuación de Schrödinger (2.1) se transforma en las siguientes dos ecuaciones reales [79],

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0 \quad \dots(2.4)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} m v^2 + U_{\text{eff}} = 0 \quad \dots(2.5)$$

donde

$$U_{\text{eff}} = U(\vec{r}, t) + U_q(\vec{r}, t) \quad \dots(2.6)$$

$$U_q = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \quad \dots(2.7)$$

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla}_{\vec{r}} S / m \quad \dots(2.8)$$

Si se toma el gradiente en la ecuación (2.5), se obtiene la ecuación

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = - \vec{\nabla}_{\vec{r}} U_{\text{eff}} = - \vec{\nabla}_{\vec{r}} U - \vec{\nabla}_{\vec{r}} U_q \quad \dots(2.9)$$

donde d/dt denota al operador $(\partial/\partial t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}})$. La ecuación de Schrödinger (2.1) es equivalente a las ecuaciones (2.4) y (2.9). La función de onda (2.3) esta unívocamente determinada

por $\rho(\vec{r}, t)$ y $\vec{v}(\vec{r}, t)$, utilizando para la fase la expresión

$$S(\vec{r}, t) = S_i(\vec{r}, -T) + \int_{-T}^t dt \left(\frac{m}{2} v^2(\vec{r}, t) + U_{\text{eff}}(\vec{r}, t) \right) \dots (2.10)$$

Esta última expresión, que ya contiene la condición de contorno $S_i(\vec{r}, -T)$, es la forma integral de la ecuación (2.5).

Las ecuaciones (2.4) y (2.9) pueden ser interpretadas en términos de la mecánica clásica de los fluidos. $\rho(\vec{r}, t)$ y $\vec{v}(\vec{r}, t)$ pueden ser interpretados como los campos densidad y velocidad de un fluido, respectivamente. La ecuación (2.4) es idéntica a la ecuación de continuidad, mientras que (2.9) es semejante a la ecuación de Euler. Esta última ecuación sería completamente equivalente a la ecuación clásica de Euler para el movimiento de un fluido en el potencial $U(\vec{r}, t)$, si el potencial cuántico U_q fuera reemplazado por el tensor de esfuerzos (ver [86] p.137). Volveremos a tratar en detalle este punto en la sección 2-4, en la cual discutiremos la aproximación de fluido clásico.

El conocimiento de los campos $\rho(\vec{r}, t)$ y $\vec{v}(\vec{r}, t)$ se conoce en mecánica de los fluidos como especificación Euleriana ([86] p.61). En nuestro caso hablaremos de la especificación Euleriana de la función de onda. En la sección 2-1-3 se introducirá una especificación Lagrangiana con el objeto de deducir las aproximaciones eikonal y de Thomson. Sin embargo,

primero analizaremos el comportamiento asintótico a altas energías de los campos $\rho(\vec{r}, t)$ y $\bar{v}(\vec{r}, t)$, el cual será comparado con el obtenido con métodos clásicos.

2-1-2 Comportamiento a altas velocidades del proyectil

El objeto de esta sección es obtener series perturbativas para $\rho(\vec{r}, t)$ y $\bar{v}(\vec{r}, t)$ en potencias de la inversa de la velocidad del proyectil v_p . Estas series pueden ser obtenidas fácilmente si se trabaja con las formas integrales de las ecuaciones (2.4) y (2.9); es decir,

$$\rho(\vec{r}, z, v_p) = \rho_i(\vec{r}) - \frac{1}{v_p} \int_{-Z}^z dz' \left\{ \text{div} \left[\begin{array}{l} \rho(\vec{r}, z', v_p) \\ \bar{v}(\vec{r}, z', v_p) \end{array} \right] \right\} \dots (2.11)$$

$$\bar{v}(\vec{r}, z, v_p) = \bar{v}(\vec{r}, -T) - \frac{1}{v_p} \vec{\nabla}_r \left\{ \int_{-Z}^z dz' \left(\frac{m}{2} \bar{v}^2(\vec{r}, z', v_p) + U(\vec{r}, z') + U_q(\vec{r}, z', v_p) \right) \right\} \dots (2.12)$$

donde se ha utilizado $z=v_p t$, $Z=v_p T$ y se ha escrito explícitamente la dependencia de ρ y \bar{v} con v_p . Las series perturbativas pueden ser obtenidas reemplazando las expresiones anteriores dentro de las integrales en z' . Antes de hacer esto es conveniente notar que $\text{div}[\rho_i(\vec{r}) \bar{v}(\vec{r}, -T)]=0$ debido a que la densidad inicial es estacionaria. La misma condición se verifica si la función de onda inicial es real ya que, en este

caso, $v(\bar{r}, T) = 0$. En lo que sigue se trabajará bajo esta última hipótesis debido a que las funciones de onda hidrogenoides pueden ser elegidas reales. Otra propiedad a ser notada es que el orden cero del potencial cuántico es igual a

$$H_Q^{(0)}(\bar{r}) = E_i - U_T(\bar{r}) \quad \dots(2.13)$$

ya que el mismo debe ser calculado con la función de onda inicial, la cual es un autoestado del Hamiltoniano del blanco $H_T = -\hbar^2 \frac{\nabla_r^2}{2m} + U_T$.

Luego de tener en cuenta las consideraciones anteriores, se obtienen los siguientes dos primeros órdenes para la densidad y el campo de velocidades

$$\vec{v}^{(1)}(\bar{r}, z) = \vec{v}^{(2)}(\bar{r}, z) = -\frac{1}{m v_p} \vec{\nabla}_r \left(\int_{-Z}^z dz' U_p(z', \bar{r}) \right) \quad \dots(2.14)$$

$$\rho^{(1)}(\bar{r}) = \rho_i(\bar{r}) \quad \dots(2.15)$$

$$\rho^{(2)}(\bar{r}, z) = \rho_i(\bar{r}) - \frac{1}{v_p} \int_{-Z}^z dz' \operatorname{div} [\rho_i(\bar{r}) \vec{v}^{(1)}(\bar{r}, z')] \quad \dots(2.16)$$

2-1-3 Especificación Lagrangiana

La especificación Lagrangiana de un fluido consiste en conocer la historia dinámica de cada elemento de fluido. Si

denotamos por \vec{R}_0 la posición de un elemento de fluido al tiempo $t=-T$, el propósito de la especificación Lagrangiana es determinar la posición $\vec{R}(\vec{R}_0, t)$ de dicho elemento de fluido para todo tiempo t . Como será demostrado en esta sección, el conocimiento del campo $\vec{R}(\vec{R}_0, t)$ es suficiente para especificar la función de onda.

La velocidad de un elemento de fluido está dada por

$$\vec{V}(\vec{R}_0, t) = \frac{\partial \vec{R}(\vec{R}_0, t)}{\partial t} \quad \dots(2.17)$$

donde la derivada parcial ahora indica que \vec{R}_0 se mantiene constante. La relación que existe entre las especificaciones Lagrangiana y Euleriana es $\vec{V}(\vec{R}_0, t) = \vec{v}[\vec{R}(\vec{R}_0, t), t]$. En lo sucesivo escribiremos $\vec{R}(t)$ para denotar $\vec{R}(\vec{R}_0, t)$, con el objeto de simplificar la notación. Sin embargo, la dependencia de \vec{R} con \vec{R}_0 no debe ser olvidada. El campo $\vec{R}(t)$ puede ser obtenido de la ecuación de Euler (2.9), la cual adopta la siguiente forma en la presente representación

$$m \frac{\partial^2 \vec{R}}{\partial t^2} = - \vec{\nabla}_R U_{\text{eff}} [\vec{R}(t), t] \quad \dots(2.18)$$

La ecuación (2.4) indica la conservación de la probabilidad de cada elemento de fluido. Si $d^3R(t)$ y d^3R_0 denotan respectivamente el volumen que ocupa el mismo elemento de volumen en los tiempos t y $-T$, la ecuación de continuidad adopta

la siguiente forma en la presente representación

$$\mathcal{P}[\bar{R}(t), t] d^3 R(t) = \mathcal{P}_i(\bar{R}_0) d^3 R_0 \quad \dots(2.19)$$

o, lo que es lo mismo,

$$\mathcal{P}[\bar{R}(t), t] = \mathcal{P}_i(\bar{R}_0) / J[\bar{R}(t), t] \quad \dots(2.20)$$

donde J es el jacobiano de la transformación $\bar{R}(\bar{R}_0, t)$

$$J[\bar{R}(t), t] = \left| \frac{\partial \bar{R}(\bar{R}_0, t)}{\partial \bar{R}_0} \right| \quad \dots(2.21)$$

Para poder encontrar la función de onda todavía tenemos que encontrar una expresión para su fase S. Para ello notemos que la ecuación (2.5) puede ser escrita en la forma

$$\frac{dS(\bar{r}, t)}{dt} = \frac{1}{2} m \dot{v}^2(\bar{r}, t) - U_{\text{eff}}(\bar{r}, t) \quad \dots(2.22)$$

la cual se escribe en la representación Lagrangiana como

$$\frac{\partial S[\bar{R}(t), t]}{\partial t} = \frac{1}{2} m \dot{V}^2[\bar{R}(t), t] - U_{\text{eff}}[\bar{R}(t), t] \quad \dots(2.23)$$

Luego,

$$S[\bar{R}(t), t] = S_i(\bar{R}_0, -T) + \int_{-T}^t dt' \left(\frac{1}{2} m \dot{V}^2(t') - U_{\text{eff}}(t') \right) \quad \dots(2.24)$$

donde la integración sobre t' debe realizarse siguiendo la trayectoria del elemento de fluido considerado.

Si se tienen en cuenta las ecuaciones (2.21) y (2.24), se obtiene la siguiente expresión para la función de onda

$$\Psi[\bar{R}(t), t] = \phi_i(\bar{R}_0, -T) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \hat{S}[\bar{R}(t), t]}}{\sqrt{J[\bar{R}(t), t]}} \quad \dots(2.25)$$

donde $\hat{S} = S - S_i$. Esta última expresión nos muestra que la función de onda está completamente determinada por las trayectorias $\bar{R}(\bar{R}_0, t)$. En el caso de que se haga alguna aproximación al computar estas trayectorias, (2.25) nos permite encontrar una función de onda aproximada.

Con el objeto de resolver (2.18), Weiner y Askar [87] introdujeron un método numérico denominado 'particle method' y lo aplicaron a física del estado sólido [88,89]. En 1984 el mismo método fue desarrollado por Terlecki et al. [70] para estudiar colisiones de iones con átomos. Este método consiste en dividir la densidad en una cantidad finita de 'partículas de probabilidad' de modo tal que (2.18) se convierta en una cantidad finita de ecuaciones acopladas. Como estos autores observaron, la aplicación de este método a la integración numérica de la ecuación de Schrödinger proveería una descripción muy simple del proceso de ionización. Esto se debe al hecho de

que las secciones eficaces totales de ionización pueden ser calculadas a partir del número de partículas de probabilidad que son emitidas. Sin embargo, dichos autores se encontraron algunas complicaciones numéricas.

En las siguientes tres secciones se analizarán las posibilidades de encontrar aproximaciones para $\bar{R}(t)$. La principal dificultad que se presenta al tratar de resolver (2.18) es que el movimiento de todos los elementos de fluido se encuentra acoplado a través del potencial cuántico U_q . Esta dificultad podría ser salvada si se encontrara una aproximación 'razonable' para U_q . A altas energías, una aproximación 'razonable' pareciera ser el cálculo de U_q con la función de onda asociada a algún método de alta energía: primera apr. de Born, eikonal, métodos de onda distorsionada, etc.. Como se verá en la sección 2-3, si las funciones de onda asociadas a la primera aproximación de Born o la aproximación eikonal son utilizadas para calcular U_q , se obtiene como resultado la aproximación de Thomson. Con este propósito, en la siguiente sección se introduce la aproximación eikonal, la cual puede ser obtenida fácilmente en la presente descripción.

2-2 LA APROXIMACION EIKONAL

A altas energías del proyectil, se sabe que la función de onda casi no cambia en el transcurso de la colisión. Por lo tanto, una aproximación de altas energías razonable pareciera ser que cada elemento de fluido permanezca en reposo; es decir, $\bar{R}(\bar{R}_0, t) = \bar{R}_0$. Luego, el jacobiano (2.21) es igual a uno y la densidad de probabilidad no cambia respecto de la inicial. De este modo, el potencial cuántico (2.7) permanece igual a su valor inicial (2.13). Si esta aproximación es usada en (2.25), la función de onda resultante es

$$\Psi(\bar{R}, t) = \varphi_i(\bar{R}) e^{-\frac{i}{\hbar} \left[E_i t + \int_{-T}^t U_p(\bar{R}, t') dt' \right]} \quad \dots(2.26)$$

Esta aproximación para la función de onda es conocida como aproximación eikonal (ver p.ej. [90]). Como puede verse, esta aproximación coincide con la primera corrección a la función de onda en potencias de $(1/v_p)$ calculada en la sección 2-1-2.

2-3 LA APROXIMACION DE THOMSON

Si el potencial cuántico es aproximado por (2.13), la ecuación (2.18) se transforma en

$$\square \frac{\partial^2 \bar{R}}{\partial t^2} = - \bar{\nabla}_R U_p[\bar{R}(t), t] \quad \dots(2.27)$$

Luego, los elementos de fluido se moverán en el campo del potencial del proyectil. Esta hipótesis es equivalente a la aproximación impulsiva clásica mencionada en la introducción ([10] p.85). Como los elementos de fluido están inicialmente en reposo, la ecuación (2.27) nos conducirá a la aproximación de Thomson (ver [10] p.89). En realidad, se ha obtenido una formulación de parámetro de impacto para la aproximación de Thomson. En el apéndice B se muestra que la presente formulación es equivalente a la usual.

Notemos ahora que si las trayectorias $\tilde{R}(t)$ de Thomson son utilizadas en la expresión (2.25), se obtiene una aproximación cuántica para la función de onda. Dicha aproximación será llamada función de onda de trayectorias de Thomson (TTW). Esta aproximación también puede ser formulada en la descripción Euleriana de la sección 2-1-1, pero es más difícil calcular la función de onda. Sin embargo, esta formulación es muy útil para encontrar series perturbativas en potencias de $(1/v_p)$. Estas series pueden ser obtenidas fácilmente si se reemplaza la aproximación de Thomson para el potencial cuántico en las expresiones integrales (2.11) y (1.12). Haciendo esta substitución, se obtiene que la aproximación de Thomson reproduce los dos primeros órdenes cuánticos en potencias de $(1/v_p)$ para la densidad y el campo de velocidades.

En esta sección se ha obtenido la aproximación de Thomson como una primera corrección a la aproximación eikonal. Una nueva aproximación puede ser obtenida si el potencial cuántico es calculado con la función de onda de Thomson. Esta nueva función de onda será una segunda corrección a la aproximación eikonal. Este procedimiento define un método iterativo para encontrar aproximaciones para la función de onda en el cual la nueva solución es obtenida calculando en potencial cuántico con la función de onda anterior. Es difícil asegurar si este procedimiento convergerá a la función de onda exacta. Como veremos en la sección 2-6, el cálculo de un segundo orden iterativo sugeriría dicha convergencia a altas energías de colisión.

2-4 LA APROXIMACION DE FLUIDO CLASICO

CTMC es un método numérico para calcular la evolución temporal de una distribución clásica $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ en el espacio de las fases. Este método consiste en dividir la distribución $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ en una cantidad finita de elementos. Las ecuaciones de movimiento para cada uno de estos elementos son las ecuaciones de Hamilton (ver [91] cap.7)

$$\left. \begin{aligned} \frac{d r_i}{d t} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = p_i / m \\ \frac{d p_i}{d t} &= - \frac{\partial H}{\partial r_i} = - \frac{\partial U}{\partial r_i} \end{aligned} \right\} \quad i=1,2,3 \quad \dots(2.28)$$

donde el Hamiltoniano H está dado por

$$H(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{P^2}{2m} + U_T(\vec{r}) + U_P(\vec{r} - \vec{b} - \vec{v}_p t) = \frac{P^2}{2m} + U(\vec{r}, t) \quad \dots(2.29)$$

Una propiedad muy importante de los elementos de volumen del espacio de las fases es que el movimiento de cada uno no está acoplado al de los demás. Luego, la integración temporal para cada elemento puede ser realizada independientemente.

Los cálculos usuales realizados con CTMC no suponen la aproximación de parámetro de impacto con trayectorias rectilíneas para el proyectil y el núcleo blanco. Sin embargo, esta hipótesis es totalmente válida en el rango de energías donde CTMC es utilizado. Como parte de este trabajo se ha verificado que se obtienen las mismas secciones eficaces totales y diferenciales electrónicas con o sin la aproximación de parámetro de impacto.

La implementación del método CTMC será postergada para el capítulo 3. En esta sección estudiaremos la evolución temporal de la distribución $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ y mostraremos que es posible obtener

una conexión con la mecánica cuántica.

2-4-1 Dinámica

La evolución temporal de una distribución clásica en el espacio de las fases está dada por la ecuación de Liouville ([92], [91] sec.8-8):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = L(t) f \quad \dots(2.30)$$

donde el operador de Liouville $L(t)$ está dado por

$$L(t) = \overline{\nabla}_r H(t) \overline{\nabla}_p - \overline{\nabla}_p H(t) \cdot \overline{\nabla}_r$$

$$L(t) = \overline{\nabla}_r U(t) \overline{\nabla}_p - \frac{\overline{p}}{m} \overline{\nabla}_r \quad \dots(2.31)$$

Como veremos a continuación, es posible hacer una comparación entre las mecánicas clásica y cuántica si se trabaja en el espacio de configuraciones. Multiplicando la ecuación de Liouville por 1 y \overline{p} respectivamente e integrando sobre todo \overline{p} se obtiene (ver [93] p.409)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \overline{v}) = 0 \quad \dots(2.32)$$

$$m \frac{d\overline{v}}{dt} = - \overline{\nabla}_r U(\overline{r}, t) - \frac{1}{\rho} \overline{\nabla}_r \cdot \mathbb{P} \quad \dots(2.33)$$

donde la densidad ρ , la velocidad media \bar{v} y el tensor de esfuerzos \mathbb{P} están dados por las siguientes integrales sobre todo \bar{p}

$$\rho(\bar{r}, t) = \int d^3\bar{p} f(\bar{r}, \bar{p}, t) \quad \dots(2.34)$$

$$m \int d^3\bar{p} \bar{p} f(\bar{r}, \bar{p}, t) \quad \dots(2.35)$$

$$m \int d^3\bar{p} p_i p_j f(\bar{r}, \bar{p}, t) \quad \rho m v_i m v_j \quad \dots(2.36)$$

Como se observó en la sección 2-1, la ecuación de Schrödinger (2.1) es equivalente a (2.4) y (2.9). Ahora observemos que estas ecuaciones son muy parecidas a (2.32) y (2.33). La única diferencia entre estas ecuaciones es que el papel del potencial cuántico en la ecuación (2.9) ha sido reemplazado por el tensor de esfuerzos. Del mismo modo que la aproximación de Thomson fue obtenida calculando el potencial cuántico con la función de onda eikonal, la aproximación clásica puede ser pensada como un modelo cuántico que hace uso de la siguiente hipótesis

$$\bar{\nabla}_r U_q \cong \frac{1}{\rho} \bar{\nabla}_r \cdot \mathbb{P} \quad \dots(2.37)$$

Por lo tanto, consideraremos que la aproximación de fluido clásico consiste en reemplazar el campo de velocidades y la

densidad de probabilidad cuántica por sus correspondientes valores clásicos (2.34) y (2.35).

2-4-2 Estado inicial

Como estamos trabajando en la 'representación coordinada' de la función de onda, el estado inicial clásico f_i debe proveer la correcta densidad de probabilidad de la posición al comienzo de la colisión. En el capítulo 3 se describe cómo es posible cumplir esta condición.

En la literatura científica pueden encontrarse dos tipos de cálculos clásicos: (i) los que utilizan una distribución clásica inicial que reproduce la densidad cuántica del impulso para estados l_s a través de un conjunto microcanónico y (ii) los que parten de una distribución inicial que reproduce la densidad cuántica de la posición. De aquí en adelante utilizaremos respectivamente las abreviaturas CTMCM y CTMCR para distinguir estos dos casos. De acuerdo a lo dicho en el párrafo anterior, la presente conexión solamente servirá para fundamentar el método CTMCR y no debería ser invocada para el caso de CTMCM.

Al igual que en mecánica cuántica, la densidad inicial debe ser estacionaria en ausencia del potencial del proyectil. Para satisfacer esta condición f_i no debe depender del tiempo; es

decir, $f_i = f_i(\bar{r}, \bar{p})$. Además, f_i debe cumplir con la ecuación de Liouville asociada al Hamiltoniano del blanco. Luego, el gradiente del tensor de esfuerzos al comienzo de la colisión puede ser obtenido de (2.33)

$$\frac{1}{\rho_i} \bar{\nabla}_r \cdot \bar{P}_i = - \bar{\nabla}_r U_T \quad \dots(2.38)$$

Por lo tanto, la aproximación (2.37) es una identidad al comienzo de la colisión (ver (2.13)).

2-4-3 La función de onda de trayectorias clásicas

La definición de una función de onda clásica no es tan simple como en el caso de la aproximación de Thomson. El problema yace en la definición de la fase de la función de onda dada por (2.10), la cual requiere una expresión absoluta para el potencial cuántico. Hasta el presente no contamos con una aproximación clásica para U_q sino para su gradiente. Para obtener U_q deberíamos llevar a cabo una integración curvilínea de la ecuación (2.37) a lo largo de un camino $\bar{r}'(\lambda)$. Un defecto de la aproximación clásica es que esta integración no conduce a una solución única debido a que el resultado está definido a menos de una constante espacial y además depende del camino $\bar{r}'(\lambda)$ elegido. La constante espacial puede ser elegida de modo tal de reproducir el valor inicial del potencial cuántico, dado

por (2.13). Teniendo en cuenta (2.28), se obtienen las siguientes posibles definiciones para el potencial cuántico

$$U_q \cong E_i - U_T(\vec{r}_q) + \int_{\vec{r}_q}^{\vec{r}} d\vec{r}'(\lambda) \frac{1}{f(\vec{r}', t)} \vec{\nabla}_{\vec{r}'} \cdot \vec{P}(\vec{r}', t) \quad \dots(2.39)$$

donde \vec{r}_q es un punto inicial arbitrario para el camino $\vec{r}'(\lambda)$.

Las presentes ambigüedades en la definición de la fase de la función de onda están relacionadas con el hecho de que, contrariamente a lo que sucede en mecánica cuántica, el campo clásico de velocidades $\vec{v}(\vec{r}, t)$ no es un campo potencial; es decir, $\vec{v}(\vec{r}, t)$ no puede ser escrito como el gradiente de un campo escalar. Sin embargo, en la sección 2-4-4 se mostrará que este problema desaparece a altas velocidades del proyectil. Más aún, en la sección 2-6 veremos que, para el caso de una colisión unidimensional, diferentes definiciones de la fase de la función de onda proveen las mismas probabilidades de transición a altas velocidades del proyectil.

2-4-4 Desarrollos perturbativos

Los procedimientos para encontrar soluciones formales o series perturbativas para la ecuación de Liouville (2.30) son muy parecidos a los utilizados en mecánica cuántica para el caso

de la ecuación de Schrödinger. En forma análoga a mecánica cuántica, es posible definir un operador de evolución o un marco de interacción para obtener series perturbativas (ver p.ej.[94] cap.13). Las razones por las cuales pueden ser utilizados los métodos cuánticos son que el operador de Liouville (2.31) es un operador lineal y que la ecuación de Liouville (2.30) es muy parecida a la ecuación de Schrödinger. Por simple reemplazo, es posible verificar que las siguientes expresiones son soluciones formales de la ecuación de Liouville (2.30)

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = e^{-\int_{-\tau}^t dt' L(t')} f_i(\vec{r}, \vec{p}) \quad \dots(2.40)$$

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f_i(\vec{r}, \vec{p}) + \int_{-\tau}^t dt' L(t') f(\vec{r}, \vec{p}, t') \quad \dots(2.41)$$

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f_i(\vec{r}, \vec{p}) + \int_{-\tau}^t dt' e^{L_{\tau}(t-t')} W_p(t') f(\vec{r}, \vec{p}, t') \quad \dots(2.42)$$

donde el operador de Liouville del blanco L_{τ} y la perturbación W_p están dados por

$$W_p(t) = \overline{\nabla}_{\vec{r}} U_p(\vec{r}, t) \cdot \overline{\nabla}_{\vec{p}} \quad \dots(2.43)$$

$$L_{\tau} = L(t) - W_p(t) \quad \dots(2.44)$$

Como la distribución inicial f_i es estacionaria, ésta satisface la ecuación $L_{\tau} f_i = 0$.

La expresión (2.42) puede ser útil para encontrar series perturbativas en potencias del potencial del proyectil. Sin embargo, es muy difícil evaluar el operador $\exp[L_T \cdot (t-t')] W_p(t')$. La expresión (2.41) es útil para obtener una serie perturbativa en potencias de $(1/v_p)$. Notemos que $L(t)$ solamente depende de v_p a través de $U_p(\vec{r}-\vec{v}_p t-\vec{b})$. Si hacemos el cambio de variables $z=v_p t$, la dependencia en v_p puede ser explícitamente escrita como sigue

$$f(\vec{r}, \vec{p}, z, v_p) = f_i(\vec{r}, \vec{p}) + \frac{1}{v_p} \int_{-Z}^z dz' L(z') f(\vec{r}, \vec{p}, z', v_p) \dots(2.45)$$

donde $Z=v_p T$. La serie perturbativa que estamos buscando puede ser obtenida reemplazando esta última expresión para $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ en la integral en z' . Los primeros órdenes en potencias de $(1/v_p)$ son los siguientes

$$f^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}) = f_i(\vec{r}, \vec{p}) \dots(2.46)$$

$$f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}, z) = f_i(\vec{r}, \vec{p}) + \frac{1}{v_p} \int_{-Z}^z dz' W_p(z') f_i(\vec{r}, \vec{p}) \dots(2.47)$$

$$f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}, z) = f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}, z) + \frac{1}{v_p^2} \int_{-Z}^z dz' L(z') \left(\int_{-Z'}^{z'} dz'' W_p(z'') f_i(\vec{r}, \vec{p}) \right) \dots(2.48)$$

donde hemos usado la propiedad $L f_i = W_p f_i$. Los primeros

órdenes para $\psi(\vec{r}, t)$ y $\bar{v}(\vec{r}, t)$ pueden ser calculados usando estas últimas expresiones y las definiciones (2.34) y (2.35). Integrando por partes y utilizando las propiedades: (i) $v(\vec{r}, -T)=0$ y (ii) $[p^2 f_i(\vec{r}, \vec{p})]$ tiende a cero cuando \vec{p} tiende a infinito, es posible obtener expresiones cerradas para ψ y \bar{v} . Después de algo de álgebra, se llega al resultado de que los dos primeros órdenes para ψ y \bar{v} en potencias de $(1/v_p)$ coinciden con los correspondientes ordenes cuánticos (2.14), (2.15) y (2.16).

Notemos ahora que los dos primeros órdenes para $\bar{v}(\vec{r}, t)$ son campos potenciales. Luego, las ambigüedades discutidas en la sección 2-4-3 acerca de la definición de la fase de la función de onda desaparecen a altas velocidades del proyectil.

2-5 CALCULO DE SECCIONES EFICACES

2-5-1 Proyección de la función de onda

El estado inicial $\phi_i(\vec{r}, t)$ dado en (2.2) satisface la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo asociada al Hamiltoniano del blanco $H_T = H - U_p$. Supongamos que queremos calcular, para un tiempo dado $+T$ (que indica el final de la colisión), la amplitud de transición a un estado final $\phi_f(\vec{r}, t)$ que satisface la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

asociada a un Hamiltoniano final H_f . Como es bien sabido, la amplitud de transición está dada por las siguientes expresiones (ver [10] ap.4.1, [84] sec.III)

$$A_{if}(\bar{b}) = \langle \Phi_f(+T) | \Psi(+T) \rangle \quad \dots(2.49)$$

o bien

$$A_{if}(\bar{b}) = \delta_{if} + \int_{-T}^{+T} dt' \frac{d}{dt'} \langle \Phi_f(t') | \Psi(t') \rangle \\ \delta_{if} - \frac{i}{\hbar} \int_{-T}^{+T} dt' \langle \Phi_f(t') | U_f(t') | \Psi(t') \rangle \quad \dots(2.50)$$

donde $U_f = H - H_f$. La expresión (2.49) es la proyección de la función de onda sobre el estado Φ_f , mientras que (2.50) calcula la integral de la amplitud de transición por unidad de tiempo. En el caso de un proceso directo Φ_f proviene de un autoestado del Hamiltoniano del blanco:

$$\Phi_f(\vec{r}, t) = \Phi_f(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_f t} \quad \dots(2.51)$$

$$H_f = H_T \quad U_f = U_P \quad \dots(2.52)$$

Por otro lado, si se quiere estudiar un proceso de captura, Φ_f provendrá de un autoestado del Hamiltoniano del proyectil, el cual deberá estar multiplicado por un factor de traslación para que cumpla la ecuación de Schrödinger dependiente de tiempo asociada a H_f

$$\Phi_f(\vec{r}, t) = \Phi_f(\vec{r} - \vec{b} - \vec{v}_p t) e^{-\frac{i}{\hbar} [E_f + \frac{1}{2} m v_p^2] t} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{v}_p \vec{r}} \dots (2.53)$$

$$H_f = H_p \quad U_f = U_T \quad \dots (2.54)$$

En el caso de trabajar en la representación Lagrangiana, una expresión equivalente a (2.50) es

$$A_{if}(\vec{b}) = \delta_{if} - \frac{i}{\hbar} \int d^3 R_0 \Phi_i(\vec{R}_0, -T) \int_{-T}^{+T} dt' \left(\Phi_f[\vec{R}(t'), t'] U_f[\vec{R}(t'), t'] \sqrt{J[\vec{R}(t'), t']} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{S}[\vec{R}(t), t]} \right) \dots (2.55)$$

Si Ψ es la solución exacta de la ecuación de Schrödinger (2.1), las expresiones (2.49) y (2.50) son equivalentes. Sin embargo, este no es el caso si se utiliza una función de onda aproximada. Por ejemplo, la primera aproximación de Born (que consiste en aproximar Ψ por Φ_i) no produce ninguna transición si es utilizada en (2.49). La diferencia que existe entre (2.49) y (2.50) es que, mientras (2.49) requiere una función de onda precisa al final de la colisión, (2.50) solamente necesita una buena aproximación para pequeñas distancias internucleares, donde tiene lugar la colisión. Esta es la razón por la cual los métodos cuánticos de altas energías son usados generalmente en (2.50).

Como se mostró en 2-3 y 2-4, CTW y TTW contienen en forma exacta los primeros dos órdenes de la función de onda en

potencias de $(1/v_p)$. Esta propiedad es suficiente para asegurar que, si las mismas son utilizadas en (2.50), proveerán los correctos comportamientos a altas energías del proyectil de las secciones eficaces asociadas a procesos directos; es decir, excitación o ionización directa. En realidad, solamente es necesario que contengan un primer orden. Sin embargo, este no es el caso para el proceso de captura electrónica debido al factor de traslación contenido en Φ_p . Como es bien sabido [95], para que un modelo determinado reproduzca el comportamiento asintótico de las secciones eficaces de captura a altas velocidades del proyectil, es necesario que el mismo contenga exactamente el primer orden de la función de onda en potencias de U_p ; es decir, una segunda aproximación de Born. En el presente trabajo no ha sido posible manipular la ecuación (2.42) para investigar este punto. Sin embargo, los cálculos realizados para el caso de la colisión unidimensional de la sección 2-6 indicarían que CTW también provee el correcto comportamiento de las secciones eficaces de captura a altas energías. La presente discusión indicaría que CTW es una buena función de onda a altas energías y pequeñas distancias internucleares.

Sería muy interesante analizar, desde un punto de vista formal, que sucedería si TTW y CTW fueran utilizadas en las expresiones (2.50) o (2.55). Lamentablemente, un cálculo de CTW en tres dimensiones es intratable debido a la cantidad de

partículas de probabilidad que sería necesario considerar para obtener una función de onda precisa. Más aún, esta función de onda debería ser usada luego para calcular la integral cuádruple (2.50). Por estas razones, en la sección 2-6 se hará un análisis del comportamiento de CTW pero para el caso de una colisión unidimensional. Un cálculo de TTW en tres dimensiones es más simple que para CTW. Sin embargo, es posible deducir que, para el caso de potenciales de largo alcance, TTW depende del origen de la colisión $-T$. Esto se debe a que las partículas de probabilidad se apartan del blanco una distancia proporcional a $\log(v_p T)$ antes de que ocurra la colisión. Si se toma el límite $T \rightarrow \infty$, se obtiene que las partículas se apartan una distancia infinita respecto del blanco antes de que el proyectil se acerque al mismo.

2-5-2 El método de conteo de partículas

En el caso de querer calcular secciones eficaces totales y no querer discriminar entre las probabilidades de transición a distintos estados, es posible utilizar un método diferente al anterior. Este método consiste en contar el número de partículas de probabilidad que terminan la colisión bajo una determinada situación física. Es decir, el número de partículas que son emitidas y se alejan del proyectil y del blanco, el número de partículas que permanecen ligadas al blanco o el

número de partículas que son capturadas. Este tipo de análisis ha sido utilizado por Terlecki et al.[70] para calcular probabilidades de ionización o captura en el caso de la integración numérica de la ecuación de Schrödinger. El conteo de partículas es también el método usual utilizado por CTMC, pero con la diferencia de que se lleva a cabo en el espacio de las fases. Sin embargo, es fácil probar que si el conteo se realiza en el espacio de configuraciones, se obtienen las mismas probabilidades de ionización o captura electrónica. En el capítulo 3 se explica cómo debe llevarse a cabo el conteo de partículas. En esta sección nos limitaremos a discutir la validez del mismo.

En el caso de contar con la función de onda exacta, el método de conteo de partículas provee las mismas secciones eficaces totales que (2.49) y (2.50). Sin embargo, es difícil determinar bajo qué condiciones dicho conteo puede dar buenas estimaciones de las secciones eficaces, si sólo se cuenta con una función de onda aproximada como CTW. El primer punto a ser notado es que CTW no es una buena función de onda para grandes tiempos debido al hecho de que su evolución está determinada por la ecuación de Liouville en lugar de la ecuación de Schrödinger. Luego, el método de conteo de partículas proveerá buenas estimaciones de las secciones eficaces solamente en el caso de que la situación final de las partículas de probabilidad pueda ser decidida a distancias internucleares no muy grandes, donde

se supone que CTW describe bastante bien a la función de onda. Esta situación puede llegar a tener lugar a energías intermedias del proyectil. Sin embargo, este no es el caso de altas energías de colisión, puesto que las partículas de probabilidad de baja energía son emitidas cuando el proyectil ya se ha alejado de las inmediaciones del blanco. Probablemente esta sea la razón por la cual los métodos clásicos no contienen el correcto comportamiento asintótico a altas energías del proyectil. Como veremos en la figura 17, las principales diferencias entre CTMCM y la primera aproximación de Born tienen lugar en la región de bajas energías de los electrones emitidos. Este resultado coincide con las conclusiones precedentes, ya que estos electrones son los que necesitan más tiempo para abandonar al blanco.

2-6 APLICACION A UNA COLISION UNIDIMENSIONAL

Esta sección está destinada a analizar el comportamiento de las funciones de onda introducidas en las secciones anteriores en el caso de una colisión unidimensional. Se utilizarán unidades atómicas a lo largo de la misma (ver apéndice A). Los potenciales del proyectil y del blanco estarán dados por

$$U_T = - \frac{Q_T}{2 [\cosh(x)]^2} \quad \dots(7.1)$$

$$U_P = \frac{Q_P}{2 [\cosh(x-v_P t)]^2} \quad \dots(7.2)$$

donde x denota la posición del electrón referida al centro del blanco. Los estados ligados que corresponden a este tipo de potenciales pueden ser obtenidos de la ref.[96]. Se utilizará $Q_P=Q_T=15/4$ de modo tal que los pozos blanco y proyectil tengan sólo dos estados ligados, los cuales están dados por

$$\varphi_1 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{[\cosh(x)]^{3/2}} \quad \dots(7.3)$$

$$\varphi_2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sinh(x)}{[\cosh(x)]^{3/2}} \quad \dots(7.4)$$

cuyas energías de ligadura son $\epsilon_1=-(9/8)a.u.$ y $\epsilon_2=-(1/8)a.u.$, respectivamente.

Se considerará el caso en el que el electrón está inicialmente ligado al pozo blanco en el estado φ_1 y se calcularán las probabilidades de excitación y captura mediante (2.50) o (2.55). Las aproximaciones que utilizaremos para la función de onda son la primera de Born (B1), la eikonal (EIK), CTW, TTW y el segundo orden iterativo (I2) discutido en la sección 2-3, el cual consiste en calcular el potencial cuántico con TTW. También se calcularán probabilidades de transición mediante el usual conteo de partículas CTMCR. Los resultados provenientes de las aproximaciones anteriores serán comparados

con las probabilidades de transición exactas, las cuales se pueden obtener mediante la técnica de diferencias finitas [81]. A continuación presentaremos los resultados obtenidos. En el apéndice C se describe como pueden ser calculadas las aproximaciones anteriores.

Las figuras 2 y 3 muestran el cociente entre las probabilidades aproximadas y las exactas para los procesos de excitación y captura electrónica respectivamente, como una función de la velocidad del proyectil. La velocidad cuadrática media del electrón en su estado inicial es $\sqrt{\langle v^2 \rangle} = 0.75 \text{ a.u.}$. Luego, los cálculos presentados en las figuras corresponden a un rango de energías intermedias-altas, en el cual se supone que las aproximaciones son válidas.

Con el objeto de estudiar la ambigüedad mencionada en la sección 2-4-3 acerca de la definición de la fase de CTW, la integral curvilínea (2.39) fue llevada a cabo con dos puntos iniciales x_q distintos (ver detalles en apéndice C). El primer valor es $x_q = -20 \text{ a.u.}$, el cual está muy alejado de la región de colisión y el segundo es $x_q = 0 \text{ a.u.}$. Estas dos elecciones son denotadas por $\text{CTW}(-\infty)$ y $\text{CTW}(0)$, respectivamente. Como puede verse en las figuras 2 y 3, la ambigüedad desaparece a altas velocidades del proyectil, ya que ambas definiciones producen las mismas probabilidades de transición. Sin embargo, debe notarse que, a medida que la velocidad disminuye, empiezan a

aparecer diferencias significativas entre $CTW(-\infty)$ y $CTW(0)$.

Como puede verse en la figura 2, todas las teorías predicen el comportamiento asintótico de altas energías de las probabilidades de excitación. Sin embargo, puede observarse en la figura 3 que solamente I2 y CTW parecen proveer buenas probabilidades de captura a altas velocidades del proyectil. Los resultados obtenidos con I2 sugieren que el procedimiento iterativo mencionado en la sección 2-3 para encontrar aproximaciones para la función de onda convergería a la solución exacta, a altas energías de colisión. El éxito de CTW indicaría que la misma contiene una aproximación todavía mejor que los primeros dos órdenes en potencias de $(1/v_p)$, deducidos en la sección 2-4. Recordemos que TTW también contiene los dos primeros órdenes en potencias de $(1/v_p)$, pero, como puede verse en la figura 3, dicha aproximación no describe apropiadamente el proceso de captura.

En la figura 3 también se puede observar que el usual método CTMCR provee buenos resultados a energías intermedias. Sin embargo, las probabilidades de captura obtenidas con dicho método se hacen muy pequeñas a medida que se aumenta la velocidad del proyectil.

Un aspecto interesante que también puede ser estudiado en la presente aplicación es qué sucede si las probabilidades de

transición son calculadas por medio de (2.49) con CTW. Si este análisis es llevado a cabo, se observa que la probabilidad de excitación oscila y tiende a cero cuando la distancia internuclear tiende a infinito. El origen de las oscilaciones es que, en las inmedicaciones del blanco, la distribución final no obedece la ecuación de Schrödinger del blanco sino la ecuación de Liouville del blanco. Luego, la probabilidad de encontrar al electrón en un estado cuántico determinado no tiene porqué ser constante. El decrecimiento de la probabilidad puede deberse a los términos disipativos contenidos en el tensor de esfuerzos (ver p.ej.[93] p.409). Estos términos pueden provocar que la distribución final sea estacionaria y por lo tanto, que sólo dependa de las constantes de movimiento asociadas al blanco. En el presente caso, la única constante de movimiento es la energía. Si la distribución final sólo depende de la energía, entonces tendrá simetría par y por lo tanto tendrá un solapamiento nulo con el estado excitado Ψ_2 debido a que el mismo tiene simetría impar. En el caso de hacer un análisis similar para la captura al estado Ψ_2 , se obtienen las mismas conclusiones.

La discusión hecha en este último párrafo nos permite concluir que CTW es una función de onda incorrecta al final de la colisión y por lo tanto no debe ser utilizada para calcular probabilidades de transición a un estado cuántico particular. Esta conclusión se contrapone con los intentos de algunos autores (ver p.ej.[35]) de obtener probabilidades de transición

The first part of the document discusses the importance of maintaining accurate records of all transactions. It emphasizes that every entry should be supported by a valid receipt or invoice. This ensures transparency and allows for easy verification of the data.

In addition, the document outlines the procedures for handling discrepancies. If there is a difference between the recorded amount and the actual amount received or paid, it is crucial to investigate the cause immediately. This could be due to a clerical error, a missing receipt, or a fraudulent transaction.

The final section provides a summary of the key points discussed. It reiterates the need for diligence and attention to detail in all financial reporting. By following these guidelines, the organization can ensure the integrity and accuracy of its financial records.

The document concludes with a statement of approval from the relevant authority. It is signed and dated as follows:

Approved: _____
 Date: _____

The document is prepared in accordance with the applicable accounting standards and regulations.

This document is confidential and should be handled accordingly.

For further information, please contact the accounting department.

Thank you for your attention and cooperation.

Sincerely,
 [Name]

[Title]

[Address]

[Phone Number]

[Email Address]

[Website]

[Footer Information]

3 - IMPLEMENTACION DE LA APROXIMACION CLASICA

Este capítulo está destinado a mostrar cómo puede ser implementado el método CTMC. En la sección 3-1 se describen las distribuciones clásicas iniciales que son utilizadas comúnmente. La sección 3-2 está destinada a mostrar como deberían ser calculadas las secciones eficaces en caso de conocer la solución exacta de la ecuación de Liouville y encontrar las leyes de escala asociadas a las mismas. Por último, en la sección 3-3 se describe cómo puede ser integrada numéricamente la ecuación de Liouville mediante el método de Monte Carlo.

3-1 Distribuciones iniciales

3-1-1 Blancos de un electrón

Comenzaremos describiendo las distribuciones iniciales usuales para átomos de un solo electrón y un potencial de interacción coulombiano $U_T = Z_T/r$, donde Z_T es la carga del núcleo blanco. Luego discutiremos el caso de dos electrones.

En todos los cálculos realizados hasta el presente con el método CTMC se han considerado colisiones en las cuales el electrón está inicialmente en estados cuánticos de simetría s . Si bien sólo analizaremos las distribuciones correspondientes al átomo de hidrógeno, las conclusiones de esta sección son válidas

para átomos hidrogenoides.

Como vimos en la sección 2-4-2, la distribución inicial clásica debe ser estable para que las secciones eficaces no dependan del origen temporal de la colisión. Para que esto suceda, la distribución inicial sólo puede depender de las constantes de movimiento asociadas al Hamiltoniano del blanco. En el caso de un átomo clásico estas constantes son la energía E , el momento angular al cuadrado ($w=L^2$) y cada una de las componentes del momento angular. Los problemas de blancos en estados de simetría s poseen además simetría esférica y por lo tanto, la distribución inicial solo puede depender de E y w . Si la distribución inicial $f_i(E, w)$ es elegida de modo tal de dar una buena descripción de las densidades cuánticas de la posición $\rho_r(\vec{r})$ y del impulso $\rho_p(\vec{p})$, entonces debería satisfacer las siguientes ecuaciones integrales

$$\begin{aligned} \rho_r(\vec{r}) &= \int d^3 p \quad f_i(E, w) \\ &= \frac{2\pi}{r} \int_{-z_T/r}^0 dE \int_0^{2mr(rE+z_T)} dw \frac{f(E, w)}{\sqrt{2mr(rE+z_T) - w}} \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \rho_p(\vec{p}) &= \int d^3 r \quad f_i(E, w) \\ &= \frac{16\pi m^3 z_T^2}{p} \int_{-\infty}^0 dE (p^2 - 2mE)^{-3} \int_0^{\frac{4m^2 z_T^2 p^2 / (p^2 - 2mE)^2}{\sqrt{\frac{4m^2 z_T^2 p^2}{(p^2 - 2mE)^2} - w}}} dw \frac{f(E, w)}{\sqrt{\frac{4m^2 z_T^2 p^2}{(p^2 - 2mE)^2} - w}} \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde se ha impuesto la condición $f_{\vec{r}}(E, w) = 0$ si $E > 0$. En los trabajos realizados hasta el presente no se han encontrado soluciones para estas ecuaciones. En su lugar, se ha supuesto que la distribución inicial sólo depende de E . Bajo esta condición, las ecuaciones (3.1) y (3.2) se transforman en

$$\int_r(\vec{r}) = 4 \tilde{\pi} \int_{-Z_T/r}^0 dE f(E) \sqrt{2m(E - Z_T/r)} \quad \dots(3.3)$$

$$\int_p(\vec{p}) = 64 \tilde{\pi} m^4 Z_T^3 \int_{-\infty}^0 dE \frac{f(E)}{(p^2 - 2mE)^2} \quad \dots(3.4)$$

Sin embargo, como fue demostrado por Cohen [37], estas dos ecuaciones integrales no pueden ser satisfechas simultáneamente.

En su trabajo original, Abrines y Percival [14] suponían que la conexión entre los métodos clásicos y la mecánica cuántica debía llevarse a cabo en la 'representación impulso' de la función de onda. Luego, la distribución clásica inicial debía reproducir la densidad cuántica del impulso; es decir, debía cumplirse (3.4). Estos autores encontraron que dicha condición es satisfecha, para el caso de blancos en el estado $1s$, por el conjunto microcanónico

$$f_M(E - E_i) = k(E_i) \delta(E_i - E) \quad \dots(3.5)$$

donde δ denota la delta de Dirac, E_i es la energía de

ligadura del estado inicial cuántico y k es una constante de normalización $\langle k(E_i) = E_i^{5/2} / (\tilde{\pi}^3 Z_T^3 \sqrt{2} m^{3/2}) \rangle$. Si la distribución (3.5) es introducida en las ecuaciones integrales anteriores, se obtiene que, para estados $1s$, (3.4) es satisfecha exactamente mientras que (3.3) no. Esta última diferencia puede observarse en la figura 4. Como puede verse en los trabajos [73] y [75], estos resultados no pueden extenderse a blancos en el estado $2s$ (ver fig.5). En este último caso, se observa que el conjunto microcanónico (3.5) no satisface ni (3.3) ni (3.4).

La conexión entre los métodos clásicos y la mecánica cuántica descrita en el capítulo 2 fue llevada a cabo en la 'representación coordenada' de la función de onda. Luego, la distribución clásica inicial debía reproducir la densidad cuántica inicial de la posición. El primer intento por reproducir la densidad de la posición fue hecho por Eichenauer et al. [31], quienes obtuvieron una solución aproximada por medio de una distribución de Wigner cortada. Más tarde, Hardie y Olson [35] obtuvieron una mejor solución a través de una combinación lineal de una cantidad finita de conjuntos microcanónicos. Esta idea fue generalizada más tarde por Cohen [37], quien obtuvo una solución exacta de la ecuación (3.3) para blancos $H(1s)$. Este último autor observó que la ecuación (3.3) es una ecuación de Volterra de primer tipo y que se puede transformar en una ecuación integral de Abel (ver [97]). Si se hacen las substituciones $x=1/r$, $y=-E$ y $g(y)=f_r(E)=f_r(-y)$, la

distribución $f_r(E)$ puede ser obtenida de las siguientes expresiones [37,75]

$$g(y) = \frac{1}{\tilde{n}} \frac{d}{dy} \int_0^y dz \frac{G(z)}{\sqrt{y-z}} + \frac{2}{\tilde{n}} \int_0^y dz \sqrt{y-z} \frac{d^2 G(z)}{dz^2} \quad \dots(3.6)$$

$$\text{donde } G(x) = \frac{1}{2\tilde{n}\sqrt{2}} \frac{d}{dx} \int_r (1/x) \quad \dots(3.7)$$

Cohen encontró que, para estados 1s, la solución (3.6) puede expresarse en términos de las funciones de Whittaker [98]. En el caso de estados 2s (3.6) fue evaluada numéricamente por Blanco et al.[75]. En la figura 6 se encuentran dibujadas las densidades de probabilidad de la energía de ligadura encontradas por estos autores, las cuales están relacionadas con la distribución $f_r(E)$ a través de:

$$\rho(E) = \int d^3 r' d^3 p' f_r(E') \delta(E-E') + \int d^3 r' d^3 p' (f_r(E)/k(E)) f_M(E-E') \quad \dots(3.8)$$

$$f_r(E) / k(E) \quad \dots(3.9)$$

Como puede verse en dicha figura, las densidades de probabilidad que provienen de utilizar (3.6) pueden tomar valores negativos. En el caso de H(1s) Cohen [37] obtuvo una

cantidad total de probabilidad negativa despreciable, igual a 0.2%. Sin embargo, Blanco et al.[75] obtuvieron, para el caso de H(2s), una probabilidad negativa total igual a 19.4%. Esto muestra que, para el caso de H(2s), no es posible encontrar una distribución radial que dependa únicamente de E y que reproduzca exactamente $\int_r (r)$. Luego, debería intentarse encontrar una solución del tipo $f_i(E,w)$ que satisfaga (3.1). Con el objeto de salvar la dificultad anterior, Blanco et al.[75] impusieron la condición $f_r(E)=0$ para los casos en que $f_r(E)$ fuera negativa y renormalizaron esta distribución con un factor (1/1.194). Si el valor medio de la energía es calculado con las soluciones exactas (3.6), se obtienen los mismos resultados que en el caso de estados cuánticos; es decir $\langle E \rangle = -0.5a.u.$ o $-0.125a.u.$ para H(1s) o H(2s) respectivamente. La renormalización y el corte realizados por Blanco et al.[75] trae aparejado un corrimiento de $\langle E \rangle$ de $-0.125a.u.$ a $-0.15a.u..$

Las figuras 4 y 5 muestran las densidades de probabilidad de la posición y del impulso para blancos H(1s) y H(2s) respectivamente. Las curvas dibujadas en dichas figuras corresponden a las densidades cuánticas y las que provienen de un conjunto microcanónico o las distribuciones $f_r(E)$ de Cohen [37] y Blanco et al.[75]. Como puede observarse, el conjunto microcanónico provee una descripción bastante mala de la densidad de la posición para H(1s) y las densidades de la posición y del impulso para H(2s). Por otro lado, el uso de una

distribución $f_r(E)$ provee una buena descripción de las densidades de la posición y el impulso para H(1s) y de la densidad de la posición para H(2s), aunque una mala descripción de la densidad del impulso para H(2s).

3-1-2 Blancos de dos electrones

Casi todos los cálculos clásicos y cuánticos realizados hasta el presente estudian el problema de más de un electrón en base al problema de un solo 'electrón activo' y asumiendo el modelo de electrones independientes [77,78]. El efecto de los electrones pasivos es tenido en cuenta a través de potenciales centrales estáticos. Es decir, se supone que el electrón activo interactúa a través de un potencial $U_T(r)$ con lo que se denomina el 'corazón del blanco', el cual está formado por el núcleo blanco y los electrones pasivos. En esta sección analizaremos el caso de un átomo de dos electrones en el estado $1s^2$. El potencial U_T será representado o bien por un potencial efectivo coulombiano U_{ef} o bien por un potencial modelo U_{mod} , dados por:

$$U_{ef} = - \frac{Z_{ef}}{r} \quad \dots(3.10)$$

$$U_{mod} = - \frac{Z_T}{r} + \left\langle \Psi_{s_2(1s^2)}(\vec{r}') \left| \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right| \Psi_{s_2(1s^2)}(\vec{r}') \right\rangle \\ \frac{1}{r} \left(Z_T - 1 + (1 + Z_{ef} e^{-2Z_{ef}r}) \right) \quad \dots(3.11)$$

donde Z_T es la carga del núcleo blanco, $Z_{ef} = Z_T - (5/16)$ y $\psi_{SZ}(4s^2; \vec{r})$ es la función de onda single-zeta (SZ) correspondiente al átomo en cuestión [99].

En la mayor parte de los cálculos llevados a cabo hasta el presente con CTMC, se utilizaron potenciales del tipo (3.10). La razón de este hecho es que solamente se conocía el método descrito por Abrines y Percival [14] para tomar muestras de la distribución inicial, el cual es válido únicamente para potenciales coulombianos. En 1984 fue propuesto un método alternativo [72,38] que es más simple que el anterior y además es válido para potenciales generales. Este método será presentado en la sección 3-3-1. Sin conocimiento del anterior, en 1985 fue propuesto otro método más [40], intentando generalizar el método de Abrines y Percival, aunque haciendo algunas aproximaciones.

Como veremos a continuación, U_{mod} provee una mejor descripción del átomo blanco que U_{ef} . Un primer punto a ser notado es que solamente U_{mod} tiene el correcto comportamiento a grandes o pequeñas distancias:

$$U_{mod}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} - \frac{(Z_T - 1)}{r} \quad \dots(3.12)$$

$$U_{mod}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} - \frac{Z_T}{r} \quad \dots(3.13)$$

Un segundo punto en favor de U_{mod} surge al analizar las densidades de probabilidad iniciales. En las figuras 7 y 8 se encuentran dibujadas las densidades de probabilidad cuánticas de la posición y el impulso del átomo de helio [99], las cuales se comparan con las que resultan de utilizar un conjunto microcanónico y los potenciales U_{mod} y U_{ef} . La energía de ligadura del electrón activo es tomada igual a menos el potencial de ionización simple del átomo de helio $E_1 = -0.904 \text{ a.u.}$. Como es posible observar en la figura 7, ninguno de los dos potenciales provee la densidad de la posición correcta. Por otro lado, solamente U_{mod} provee una buena descripción de la densidad del impulso (ver fig.8). En el caso de utilizar una distribución inicial $f_r(E)$ como la descrita en 3-1-1, se obtienen las mismas conclusiones que en dicha sección para el caso de blancos H(1s).

Un último punto en favor de U_{mod} es el siguiente. El valor medio clásico de la energía de ligadura del átomo de helio puede ser calculado suponiendo que la distribución inicial de dos electrones es el producto de dos conjuntos microcanónicos (electrones independientes). Los valores que resultan para la energía total electrónica en los casos de U_{ef} y U_{mod} son respectivamente $E_{el} = -1.71 \text{ a.u.}$ y $E_{el} = -2.84 \text{ a.u.}$ (ver [72,38]). Este último valor está bastante de acuerdo con el valor experimental, $E_{el} = -2.94 \text{ a.u.}$

En los dos últimos párrafos particularizamos la discusión al caso del átomo de helio. Las conclusiones obtenidas son igualmente válidas para otros átomos con dos electrones en el estado $1s^2$. Sin embargo, las diferencias entre utilizar U_{mod} o U_{ef} se hacen cada vez mas pequeñas cuando la carga del núcleo blanco se incrementa.

3-2 Cálculo formal de las secciones eficaces y leyes de escala.

Como mencionamos en la seccion 2-5-2, las secciones eficaces totales de ionización o captura pueden ser calculadas mediante un conteo de la cantidad de partículas de probabilidad del espacio de las fases que terminan ligadas al blanco o al proyectil. Las energías de ligadura de una partícula de probabilidad respecto al blanco y al proyectil están dadas respectivamente por

$$E_T = \frac{p^2}{2m} + U_T(\vec{r}) \quad \dots(3.14)$$

$$E_p = \frac{(\vec{p} - m\vec{v}_p)^2}{2m} + U_p(\vec{r} - \vec{b} - \vec{v}_p t) \quad \dots(3.15)$$

Al finalizar la colisión, se observa que cada partícula se encuentra en una de las siguientes situaciones:

$$E_T > 0 \text{ y } E_p > 0 \Rightarrow \text{ la partícula ha sido ionizada } \dots(3.16)$$

$$E_p < 0 \text{ y } E_T > 0 \Rightarrow \text{ la partícula ha sido capturada } \dots(3.17)$$

$$E_p > 0 \text{ y } E_T < 0 \Rightarrow \text{ la partícula permanece ligada al blanco } \dots(3.18)$$

En el supuesto caso de que alguna partícula se encuentre en la situación $E_T < 0$ y $E_p < 0$, es necesario continuar la integración temporal hasta que se defina en (3.16), (3.17) o (3.18).

Supongamos que $f(\vec{r}, \vec{p}, T, \vec{v}_p, \vec{b})$ es la distribución resultante al finalizar la colisión para el caso de un proyectil incidente con velocidad \vec{v}_p y parámetro de impacto \vec{b} . Formalmente y de acuerdo al método de conteo de partículas, las probabilidades de que el electrón sea ionizado, capturado o permanezca en el blanco pueden obtenerse integrando $f(\vec{r}, \vec{p}, T, \vec{v}_p, \vec{b})$ en las regiones R_i , R_c o R_e del espacio de las fases que cumplen las condiciones (3.16), (3.17) o (3.18), respectivamente

$$P_{i,c,e}(\vec{b}, \vec{v}_p) = \int_{R_i, R_c, R_e} d^3 r \, d^3 p \, f(\vec{r}, \vec{p}, T, \vec{v}_p, \vec{b}) \dots(3.19)$$

Las secciones eficaces totales se obtienen integrando (3.19) en los parámetros de impacto. Este tipo de expresión es muy útil para deducir las leyes de escala que explicaremos a continuación. Al llevar a cabo un cambio de escala, las energías (3.14) y (3.15) se ven alteradas en un factor multiplicativo positivo. Sin embargo, es posible observar que

los recintos de integración R_i , R_c y R_e permanecen inalterados, debido a que los signos de las energías de ligadura no cambian. Antes de deducir leyes de escala debemos notar que las mismas son únicamente válidas para los casos en que las interacciones U_T y U_p sean potenciales coulombianos

3-2-1 Ley de escala entre sistemas colisionantes con igual relación de cargas proyectil/blanco

Supongamos que Z_p y Z_T son las cargas del proyectil y del núcleo blanco. El objeto de esta sección es encontrar una ley de escala entre dos sistemas colisionantes distintos con cargas Z_p, Z_T o cargas Z'_p, Z'_T , los cuales guardan la relación $\theta = Z'_p/Z_p = Z'_T/Z_T$ y se encuentran inicialmente en el mismo estado cuántico. Por ejemplo, la ley de escala que hallaremos relaciona las secciones eficaces de los sistemas $H^+ + He^+(1s)$, $He^{2+} + Be^{3+}(1s)$, etc..

Sean $f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, Z_p, Z_T)$ y $f(\vec{r}', \vec{p}', t', \vec{v}'_p, \vec{b}', Z'_p, Z'_T)$ las soluciones de la ecuación de Liouville (2.30) para los sistemas con cargas Z_p, Z_T o Z'_p, Z'_T , respectivamente. Haciendo los cambios de escala $\vec{r}' = \vec{r} \theta$, $\vec{p}' = \vec{p}/\theta$ y $t' = t \theta$ en la ecuación de Liouville, se obtiene:

$$\begin{aligned} f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, Z_p, Z_T) &= f(\vec{r}', \vec{p}', t', \vec{v}'_p, \vec{b}', Z'_p, Z'_T) \\ &= f(\vec{r} \theta, \vec{p}/\theta, t \theta, \vec{v}_p/\theta, \vec{b} \theta, Z_p, Z_T) \quad (3.20) \end{aligned}$$

Introduciendo esta expresión en (3.19) se obtiene la siguiente relación entre las probabilidades de transición para ambos sistemas

$$P(\vec{b}, \vec{v}_p, Z_p, Z_T) = P(\vec{b}, \vec{v}_p, Z_p, Z_T) = P(\vec{b} \theta, \vec{v}_p/\theta, Z_p, Z_T) \quad \dots(3.21)$$

Si integramos esta probabilidad en el parámetro de impacto \vec{b} obtenemos la siguiente relación entre las secciones eficaces:

$$\sigma(\vec{v}_p, Z_p, Z_T) = \theta^{-2} \sigma(\vec{v}_p/\theta, Z_p, Z_T) \quad \dots(3.22)$$

Como puede verse, las leyes de escala (3.21) y (3.22) son las mismas que se obtienen en forma exacta en la mecánica cuántica bajo el formalismo de parámetro de impacto.

3-2-2 Ley de escala entre dos conjuntos microcanónicos iniciales diferentes para el mismo sistema colisionante.

El objeto de esta sección es encontrar una ley de escala entre las secciones eficaces que provienen de utilizar dos conjuntos microcanónicos con energías de ligadura E_i o E'_i , las cuales guardan la relación $\theta = E_i/E'_i$.

Sean $f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, E_i)$ y $f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, E'_i)$ las soluciones de la ecuación de Liouville (2.30) para ambos casos. Haciendo los

cambios de escala $\vec{r}' = \vec{r}/\theta$, $\vec{p}' = \vec{p} \theta^{1/2}$ y $t' = t/\theta^{3/2}$, se llega al siguiente resultado:

$$\begin{aligned} f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, E_i) &= \theta^{-3/2} f(\vec{r}', \vec{p}', t', \vec{v}_p, \vec{b}', E_i) \\ &= \theta^{-3/2} f(\vec{r}/\theta, \vec{p} \theta^{1/2}, t/\theta^{3/2}, \vec{v}_p \theta^{1/2}, \vec{b}/\theta, E_i) \dots (3.23) \end{aligned}$$

El factor $\theta^{-3/2}$ entre $f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, E_i)$ y $f(\vec{r}', \vec{p}', t', \vec{v}_p, \vec{b}', E_i)$ es el jacobiano del cambio de variables de (\vec{r}, \vec{p}) a (\vec{r}', \vec{p}') y su presencia se debe a que la integral de $f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, E_i)$ en las variables (\vec{r}, \vec{p}) tiene que ser igual a uno. Introduciendo esta expresión en (3.19) se obtiene la siguiente relación

$$P(\vec{b}, \vec{v}_p, E_i) = P(\vec{b}', \vec{v}_p, E_i) = P(\vec{b}/\theta, \vec{v}_p \theta^{1/2}, E_i) \dots (3.24)$$

Si integramos esta probabilidad en el parámetro de impacto \vec{b} , obtenemos la siguiente relación entre las secciones eficaces:

$$\sigma(\vec{v}_p, E_i) = \theta^2 \sigma(\vec{v}_p \theta^{1/2}, E_i) \dots (3.25)$$

3-2-3 Ley de escala entre una distribución inicial $f_i(E)$ y un conjunto microcanónico para el mismo sistema colisionante.

El objeto de esta sección es mostrar que las secciones eficaces que se obtienen al utilizar una distribución inicial $f_i(E)$ pueden obtenerse a partir de las que provienen de un conjunto microcanónico $f_M(E-E_i)$. Sean $f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b})$ y

$f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, E_i)$ las soluciones de la ecuación de Liouville (2.30) con las condiciones iniciales $f_i(E)$ y $f_M(E-E_i)$, respectivamente. Utilizando las expresiones (3.8) y (2.40) se obtiene

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}) = e^{\int_{-\tau}^t dt' L(t')} f_i(E) + \int dE_i \mathcal{P}(E_i) e^{\int_{-\tau}^t dt' L(t')} f_M(E-E_i) + \int dE_i \mathcal{P}(E_i) f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}, E_i) \quad \dots(3.26)$$

Si ahora usamos la propiedad (3.23), obtenemos

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t, \vec{v}_p, \vec{b}) = \int dE \mathcal{P}(E) \theta^{-3/2} f(\vec{r}/\theta, \vec{p} \theta^{1/2}, t/\theta^{3/2}, \vec{v}_p \theta^{1/2}, \vec{b}/\theta, E_i) \quad (3.27)$$

$$\text{donde } \theta = \theta(E) = E_i/E \quad \dots(3.28)$$

Introduciendo esta expresión en (3.19) se obtiene la siguiente relación entre las probabilidades de transición

$$P(\vec{b}, \vec{v}_p) = \int dE \mathcal{P}(E) P\left(\vec{b} \frac{E}{E_i}, \vec{v}_p \sqrt{\frac{E_i}{E}}, E_i\right) \quad \dots(3.29)$$

Si integramos esta probabilidad en el parámetro de impacto \vec{b} obtenemos la siguiente relación entre las secciones eficaces:

$$\sigma(\vec{v}_p) = \int dE \mathcal{P}(E) \left(\frac{E_i}{E}\right)^2 \sigma\left(\vec{v}_p \sqrt{\frac{E_i}{E}}, E_i\right) \quad \dots(3.30)$$

3-3 Implementación numérica de la aproximación clásica:

El Método Monte Carlo de trayectorias clásicas (CTMC)

El método CTMC consiste en tomar una muestra finita de partículas del espacio de las fases que represente la distribución inicial e integrar las ecuaciones de movimiento de cada una por separado. Llamaremos historia al proceso de elegir las condiciones iniciales para una partícula e integrar sus ecuaciones de movimiento.

3-3-1 Generación de las condiciones iniciales electrónicas

En el caso de un conjunto microcanónico, la elección de las condiciones iniciales consiste en elegir al azar una cantidad finita de puntos (\vec{r}, \vec{p}) de la variedad $E_i = \frac{p^2}{2m} + U_T(r)$. Para ello es conveniente definir un conjunto de cinco coordenadas independientes en dicha variedad, tal que la densidad de probabilidad asociada a las mismas sea uniforme. Generar un punto al azar en la variedad significa elegir al azar cada una de estas cinco variables en sus respectivos intervalos y luego escribir los vectores \vec{r} y \vec{p} en función de las mismas. Para la generación de números al azar generalmente se cuenta con funciones especiales incluidas dentro de las bibliotecas FORTRAN actuales. Un cambio de coordenadas adecuado para potenciales

generales es pasar de las variables (\vec{r}, \vec{p}) a otras $(E_i, \mu, \nu_r, \nu_p, \varphi_r, \varphi_p)$, definido por

$$p = \sqrt{2 m [E_i - U_T(r)]} \quad \dots(3.31)$$

$$\mu(r) = \int_0^r dr \, m r^2 \left(2 m [E_i - U_T(r')] \right)^{1/2} \quad \dots(3.32)$$

$$\left. \begin{aligned} x &= r \left(1 - \nu_r^2 \right)^{1/2} \cos \varphi_r \\ y &= r \left(1 - \nu_r^2 \right)^{1/2} \text{sen } \varphi_p \\ z &= r \nu_r \\ p &= p \left(1 - \nu_p^2 \right)^{1/2} \cos \varphi_p \\ p &= p \left(1 - \nu_p^2 \right)^{1/2} \text{sen } \varphi_p \\ p &= p \nu_p \end{aligned} \right\} \quad \dots(3.33)$$

donde las variables $\nu_r, \nu_p, \varphi_r, \varphi_p$ son las que definen las direcciones de los vectores \vec{r} y \vec{p} . Como fue demostrado en los trabajos [72,38], las nuevas variables tienen distribución uniforme en los intervalos

$$\mu \in [0, \mu(r_0)] \quad \varphi_r \in [0, 2\pi] \quad \varphi_p \in [0, 2\pi] \quad \dots(3.34)$$

$$\nu_r \in [-1, 1] \quad \nu_p \in [-1, 1]$$

donde r_0 es la raíz de la ecuación $E_i - U_T(r) = 0$.

En el caso de que la distribución inicial sea del tipo $f_0(E)$ (no siendo $f_0(E)$ una delta de Dirac), pueden seguirse los procedimientos habituales para tomar muestras de distribuciones [100,37]. Las direcciones de los vectores \vec{r} y \vec{p} también están uniformemente distribuidas, pero para los módulos hay que seguir un procedimiento diferente:

- (i) Se generan r y p al azar respectivamente en los intervalos $(0, r_{\max})$ y $(0, p_{\max})$, siendo r_{\max} y p_{\max} valores tales que la distribución $f_0(E)$ se anula o se hace muy pequeña.
- (ii) La función $G(r,p) = 16 \pi^2 r^2 p^2 f_0(E)$ se evalúa en los valores r y p anteriores y se compara con un número aleatorio g , generado en un intervalo $(0, G_{\max})$, donde G_{\max} es el máximo valor que puede tomar de $G(r,p)$.
- (iii) Sólo son aceptados los valores r,p que cumplen la condición $G(r,p) > g$.

3-3-2 Dinámica

Una vez elegidas las condiciones iniciales para una determinada historia, se resuelven las ecuaciones de Hamilton (2.28) asociadas a la misma. La integración de estas ecuaciones se debe llevar a cabo numéricamente, lo cual se puede lograr

satisfactoriamente mediante el método de Runge-Kutta-Gill a cuarto orden [101] con un paso externo (ver detalles en [72] ap.2). La integración de las ecuaciones de movimiento se detiene cuando las energías de ligadura (3.14) y (3.15) se estabilizan y la partícula se decide por (3.16), (3.17) o (3.18). La posición inicial del proyectil debe ser elegida de modo tal que la situación final de las partículas no dependa de la misma.

3-3-3 Cálculo de probabilidades de transición y secciones eficaces

Luego de haber considerado $N(\vec{b})$ historias, para un parámetro de impacto \vec{b} fijo, las probabilidades de transición (3.19) pueden evaluarse como

$$P_{i,c,e}(\vec{b}) = \frac{N_{i,c,e}}{N(b)} \quad \dots(3.35)$$

donde N_i, N_c y N_e son la cantidad de veces que ocurren (3.16), (3.17) o (3.18), respectivamente. Como la cantidad de historias que se llevan a cabo es finita, la expresión anterior posee el siguiente error estadístico (ver detalles en [72])

$$\text{Error}(P_{i,c,e}(\vec{b})) = P_{i,c,e}(\vec{b}) \sqrt{\frac{(N(b) - N_{i,c,e})}{N(b) N_{i,c,e}}} \quad \dots(3.36)$$

Para el cálculo de secciones eficaces totales pueden

seguirse dos procedimientos. Uno de ellos es integrar (3.35) en el parámetro de impacto. Sin embargo, es mejor utilizar otro método. el objeto de obtener un menor error estadístico [72] Este método consiste en llevar a cabo N historias como las anteriores pero eligiendo el parámetro de impacto del proyectil de modo tal que reproduzca un flujo uniforme de partículas incidentes. Si b_{\max} es un parámetro de impacto arriba del cual los procesos de captura y ionización son despreciables, la condición anterior es satisfecha eligiendo b^2 uniformemente y al azar en el intervalo $[0, b_{\max}^2]$. Bajo estas condiciones, se obtienen las siguientes secciones eficaces

(i) Secciones eficaces totales de ionización σ_i o captura σ_c

$$\sigma_{i,c} = \frac{N_{i,c}}{N} \tilde{\pi} b_{\max}^2 \quad \dots(3.37)$$

donde N_i y N_c son la cantidad total de partículas ionizadas o capturadas, de acuerdo a (3.16) o (3.17), respectivamente.

(ii) Secciones eficaces de ionización simplemente diferenciales en función del ángulo o de la energía de los electrones emitidos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N_{\Omega}}{N \Delta\Omega} \tilde{\pi} b_{\max}^2 \quad \dots(3.38)$$

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{N_{\epsilon}}{N \Delta\epsilon} \tilde{\pi} b_{\max}^2 \quad \dots(3.39)$$

donde N_{Ω} y N_{ϵ} denotan el número de partículas emitidas que son detectadas en los intervalos de ángulo sólido o energía $[\Omega - \Delta\Omega/2, \Omega + \Delta\Omega/2]$ y $[\epsilon - \Delta\epsilon/2, \epsilon + \Delta\epsilon/2]$, respectivamente.

Los errores estadísticos asociados a las secciones eficaces (3.37), (3.38) y (3.39) se calculan en forma análoga a (3.36).

4 - APLICACIONES

En este capítulo se presentará una recopilación de los resultados obtenidos mediante el método CTMC en los trabajos [38,47,71-76]. Se presentarán los resultados que provienen de utilizar o bien un conjunto microscópico inicial $f_M(E_i - E)$, o bien una distribución inicial $f_V(E)$ como los descritos en la sección 3-1. Estas dos aproximaciones serán denotadas como CTMCM o CTMCR respectivamente. Como se mostró en el capítulo 2, es posible encontrar una conexión simple entre CTMCR y la mecánica cuántica. Sin embargo, esto no implica que CTMCR sea una mejor aproximación que CTMCM. Como veremos a continuación, mientras CTMCR describe mejor el proceso de captura electrónica, CTMCM describe mejor el proceso de ionización.

4-1 Secciones eficaces de ionización y captura electrónica en colisiones de iones multicargados con blancos de H(1s) y He⁺(1s)

La ley de escala (3.22) nos permite presentar las secciones eficaces totales como una función del cociente Z_p/Z_T . En esta sección eligiéremos $Z_T=1$ y estudiaremos el comportamiento de las secciones eficaces para varios valores de Z_p . Los resultados que se obtengan para $Z_p=1/2$ y $Z_p=1/3$ serán comparados con los datos experimentales u otras teorías correspondientes a los

sistemas $H^+ + He^+(1s)$ y $H^+ + Li^{2+}(1s)$, respectivamente. Los resultados para $Z_p \gg 1$ serán comparados con los datos experimentales existentes para las colisiones de iones totalmente desnudos con blancos de $H(1s)$.

En la figura 9 se presentan secciones eficaces totales de ionización para colisiones de iones totalmente desnudos con $H(1s)$. Como puede verse en dicha figura, CTMCM parece dar una mejor estimación de las secciones eficaces que CTMCR. Cohen [37] comparó sus resultados teóricos a bajas energías con los datos experimentales de Fite et al. [105] y concluyó que CTMCR mejora a CTMCM en dicho rango. Sin embargo, los recientes resultados obtenidos por Shah y Gilbody [104] indican todo lo contrario. En la misma figura puede verse que ni CTMCM ni CTMCR son capaces de reproducir el comportamiento asintótico de las secciones eficaces de ionización a altas energías del proyectil. Este problema puede observarse mejor en la figura 11, donde CTMCM es comparado con las aproximaciones clásicas de Thomson y BE y la aproximación cuántica B1 para ionización directa, para el sistema $H^+ + H(1s)$. Como puede observarse en dicha figura, solamente B1 predice el comportamiento de las secciones eficaces de ionización a altas energías de colisión. Como es bien sabido [10-13], las secciones eficaces clásicas para procesos directos se comportan como $1/E$ a altas energías, mientras que el correcto comportamiento es $(\text{Const} + \ln E)/E$, el cual está dado por B1.

Con el objeto de analizar el rango de validez de las secciones eficaces de ionización obtenidas con CTMCM, en la figura 10 se analiza la dependencia de las mismas con la carga del proyectil, para cuatro energías de colisión. Las teorías de primer orden B1 y BE, las cuales predicen un comportamiento Z_p^2 , también se encuentran dibujadas. Como es esperado [10,13], CTMCM tiende a BE a altas energías o pequeñas cargas. De acuerdo a otros autores (ver p.ej.[41]), el método CTMCM debería dar buenos resultados cuando v_p esta en el rango $v_0 < v_p < 3 v_0$, donde v_0 es la velocidad de Bohr del electrón en su estado inicial ($v_0 = 1a.u.$ para $H(1s)$). Sin embargo, como puede verse en las figuras 9 y 10, el rango de validez de CTMCM también depende del valor que tome Z_p . A 25keV/amu ($v_p = 1a.u.$) CTMCM es válido solamente cuando $Z_p < 1$ (es decir, para los sistemas $H^+ + He^+$ y $H^+ + Li^{2+}$). A medida que se incrementa la energía de colisión, CTMCM se vuelve válido para valores más grandes de Z_p . Para 400keV/amu ($v_p = 4a.u.$) CTMCM es válido hasta $Z_p = 6$ y probablemente para cargas más grandes. Un aspecto más que contradice al rango de validez dado por Willis et al.[41] es que CTMCM pareciera dar buenos resultados para $v_p < 1a.u.$, si Z_p es menor que uno.

En la figura 12 se presentan secciones eficaces totales de captura desde $H(1s)$ por impacto de iones multicargados. Como puede verse en dicha figura, el comportamiento de las secciones

eficaces es totalmente distinto al caso de ionización. En primer lugar, puede observarse que CTMCR mejora a CTMCM a bajas energías de colisión. Por otro lado, la dependencia del rango de validez de estas aproximaciones con la carga del proyectil también es diferente. En cuanto a los resultados para $Z_p=1/2$, puede observarse que ni CTMCM ni CTMCR reproducen los datos experimentales. Una conclusión similar fue obtenida por Ermolaev y McDowell [42] para el sistema $H^+ + Li^{2+}$, al comparar CTMCM con cálculos de canales acoplados. Con el objeto de analizar el rango de validez de las secciones eficaces de captura, en la figura 13 se encuentran dibujadas las mismas como una función de la carga del proyectil, para cuatro energías de colisión. Contrariamente al proceso de ionización, CTMCR es válido a bajas energías únicamente para grandes valores de Z_p . Cuando se incrementa la energía de colisión CTMCR se vuelve válido para valores mas pequeños de Z_p .

Las presentes secciones eficaces totales obtenidas con CTMCR y CTMCM para el sistema $H^+ + H(1s)$ coinciden con las halladas por Cohen [37] y Banks et al.[17]. Sin embargo, se han encontrado algunas diferencias entre los resultados obtenidos con CTMCM y los hallados originalmente por Olson y Salop [16]. La razón de estas discrepancias puede ser la mencionada por Cohen [32] y Peach et al.[40], quienes encontraron un error en el método utilizado originalmente por Olson y Salop para tomar muestras de condiciones iniciales. El comportamiento de las

secciones eficaces obtenidas con CTMCK para colisiones con $H(1s)$ es similar al hallado por Hardie y Olson [35], quienes intentaron reproducir la densidad inicial de la posición mediante una combinación lineal de una cantidad finita de conjuntos microcanónicos. En cuanto a los resultados obtenidos con CTMCM para blancos de $He^+(1s)$, también debemos notar que existen grandes diferencias con los obtenidos por Olson [23]. En particular, se ha observado que los resultados obtenidos por este autor para el sistema $He^{++} + He^+(1s)$ no satisfacen la ley de escala (3.22) con sus propios resultados para el sistema $H^+ + H(1s)$.

4-2 Colisiones de iones multicargados con hidrógeno metaestable

Los estados metaestables son producidos por colisiones en plasmas astrofísicos y de laboratorio y siempre sobreviven pequeñas poblaciones debido a su largo tiempo de decaimiento. La importancia de estos estados es que los mismos pueden afectar la dinámica del plasma (a pesar de que sus poblaciones sean pequeñas) debido a que las secciones eficaces asociadas a los mismos son grandes. Este hecho puede verse claramente a través de la ley de escala (3.25), si representamos los blancos $H(1s)$ y $H(2s)$ mediante dos conjuntos microcanónicos con energías de ligadura $E_i = -0.5a.u.$ y $E_i = -0.125a.u.$, respectivamente. De acuerdo a dicha ley de escala, la relación entre las secciones

eficaces de ionización y captura electrónica desde H(1s) y H(2s) por impacto de un mismo proyectil es:

$$\sigma^{2s}(v_p) = 16 \sigma^{1s}(2v_p) \quad \dots(4.1)$$

Luego, es posible afirmar que los valores máximos de las secciones eficaces asociadas a H(2s) serán alrededor de 16 veces más grandes que para H(1s).

En el caso de tratar con blancos de H(2s) es difícil determinar cuales son las regiones de energía del proyectil altas, bajas o intermedias. Esto se debe a que las velocidades media, cuadrática media y más probable del electrón son bastante diferentes: están entre 0.181a.u. y 0.5a.u. (ver fig.5). Es decir, la región de energías intermedias estará alrededor de 0.82-6.25 keV/amu.

En la figura 14 se presentan los resultados obtenidos mediante CTMCR y CTMCM para el sistema $H^+ + H(2s)$. A bajas energías, los resultados clásicos están bastante de acuerdo con los cálculos teóricos obtenidos por Blanco et al.[127] mediante MCC. A energías intermedias y altas se hace una comparación con cálculos teóricos obtenidos mediante ACC con factores de traslación [73] y los que resultan de utilizar las aproximaciones eikonal y OBK [90]. El desacuerdo entre los resultados clásicos y los obtenidos con ACC a energías

intermedias puede deberse a que estos últimos no tienen en cuenta acoplamientos con estados del continuo. A modo de ejemplo, a una energía del proyectil de 25keV la sección eficaz de ionización es 5 veces más grande que la de captura [73]. Hasta el presente, no existen resultados experimentales para colisiones con blancos H(2s). En su lugar se presentan los datos experimentales para la reacción $H^+ + Li \rightarrow H + Li^+$ [124-126]. Cuando la energía del protón incidente es de algunos keV la captura se produce predominantemente desde Li(2s), cuya velocidad orbital $\sqrt{\langle v^2 \rangle} = 0.64 \text{ a.u.}$ [128], es bastante parecida a la de H(2s) ($\sqrt{\langle v^2 \rangle} = 0.5 \text{ a.u.}$). Los resultados clásicos parecieran seguir a los experimentos. Sin embargo, esta comparación no debe tomarse como conclusiva. A bajas energías, no es correcto comparar con los resultados de blancos de Li ya que el estado Li(2s) no es resonante con H(n=2). Por otro lado, la presencia de los dos electrones de la capa K del Li juegan un papel importante a altas energías.

En la figura 15 se encuentran dibujados los resultados obtenidos mediante CTMCR y CTMCM para las secciones eficaces totales de captura electrónica desde H(2s) por impacto de H^+ , He^{2+} , Li^{3+} y C^{6+} . Un primer punto a ser notado es que las secciones eficaces no son muy sensitivas a la distribución inicial utilizada, salvo a altas energías. A bajas energías, los resultados clásicos están bastante de acuerdo con los resultados obtenidos mediante MCC por Blanco et al. [127] para

proyectiles H^+ y Blanco et al. [75] para proyectiles He^{2+} . Sin embargo, a estas energías, es posible observar grandes diferencias entre los resultados clásicos para proyectiles He^{2+} , Li^{3+} y C^{6+} y los que provienen de utilizar la aproximación L-Z. La razón de ésta discrepancia es que la aproximación L-Z no tiene en cuenta todos los estados que juegan un rol importante en la colisión (p.ej. desprecia la captura resonante; ver [75]). A energías altas e intermedias, los resultados clásicos son comparados con los que provienen de la aproximación eikonal [90] y los obtenidos mediante ACC [73] para proyectiles H^+ .

4-3 Saturación de las secciones eficaces de excitación y ionización al aumentar la carga del proyectil

Es de interés en colisiones ion-atomo estudiar la dependencia de las secciones eficaces de excitación y ionización con la carga del proyectil Z_p . Las teorías de primer orden como la primera aproximación de Born (B1) o el modelo clásico de encuentro binario (BE) predicen una dependencia Z_p^2 [10]. Estas teorías deberían dar buenos resultados cuando la perturbación debida al proyectil es pequeña. Sin embargo, cuando dicha perturbación aumenta es necesario recurrir a teorías que contengan los siguientes órdenes perturbativos debidos al potencial del proyectil. Como se ha observado al analizar la figura 10, tanto los experimentos como CTMCM se apartan bastante de la ley Z_p^2 para el caso de las secciones eficaces de

ionización. Veremos en esta sección, las secciones eficaces diferenciales de ionización sufren apartamientos aún mayores.

En recientes experimentos se ha observado que las secciones eficaces de excitación sufren grandes apartamientos de la ley Z_p^2 al aumentar la carga del proyectil [131,132]. En forma teórica y con un gran esfuerzo de cómputo Brendlé et al. [131,132] encontraron, mediante un principio variacional de Schwinger (SCHW), que las secciones eficaces de excitación saturan exactamente al aumentar la carga del proyectil. Se entiende por saturación que, para una dada velocidad del proyectil, las secciones eficaces tienden a una constante cuando Z_p tiende a infinito. Este trabajo motivó algunas investigaciones experimentales que se están llevando a cabo actualmente con el objeto de analizar la dependencia de las secciones eficaces diferenciales de ionización con la carga del proyectil [133,134]. El fenómeno de 'saturación' también ha sido observado recientemente [73] mediante la aproximación eikonal simétrica (SE)[135]. Con saturación entre comillas se quiere decir que el fenómeno observado se asemeja a una saturación, pero no en forma exacta. En la figura 16 se presentan los resultados obtenidos por estos autores, los cuales son comparados con datos experimentales de excitación a estados $2p$, $3p$ de Fe^{24+} ($1s^2$) por impacto con iones multicargados, a una energía de 400MeV de Fe^{24+} . Como puede observarse en dicha

figura. SE SCHW están de acuerdo con los experimentos y se apartan de la ley Z_p^2 predicha por B1. Debido a la falta de datos experimentales, los resultados obtenidos con CTMCM para excitación a estados de Rydberg serán comparados con los que provienen de utilizar la aproximación SE.

La figura 17 muestra secciones eficaces simplemente diferenciales $d\sigma/d\epsilon$ como función de la energía de los electrones emitidos para el caso de ionización de H(1s) por impacto de iones multicargados, a velocidades del proyectil $v_p=2$ y 5a.u.. De acuerdo a las figuras 9 y 11, el caso $v_p=5$ a.u. (625keV/amu) estaría fuera del rango de validez de CTMCM (habría que corregir en un 30% la sección eficaz total). Por otro lado, podemos asegurar que en el caso $v_p=2$ a.u. (100keV/amu) CTMCM está dentro del rango de validez hasta $Z_p=3$ y probablemente para cargas aún mayores. El motivo por el cual se incluyen los resultados para $v_p=2$ y 5a.u. es que, como veremos al analizar las figuras 20 y 21, los mismos contienen dos mecanismos distintos por los cuales se puede producir la 'saturación' de las secciones eficaces. Como puede verse claramente en la figura 17, cuando Z_p aumenta, el crecimiento relativo de $d\sigma/d\epsilon$ es más importante en la región de grandes energías del espectro que a pequeñas energías. Esta diferencia es más apreciable para $v_p=2$ a.u. que para $v_p=5$ a.u.. También es posible observar un claro comportamiento de 'saturación' a pequeñas energías de los electrones para $v_p=2$ a.u.. Los apartamientos de la ley Z_p^2 serán

analizados en la discusión de los resultados presentados en la figura 19. Con el objeto de comparar CTMCM con teorías de primer orden, también se presentan las secciones eficaces que se obtienen mediante BE y B1 para ionización directa, para $Z_p=1$. En la figura 17 también se presentan datos experimentales obtenidos por Rudd et al.[136] para ionización de hidrógeno molecular por impacto de protones de 100keV. Para obtener las secciones eficaces para blancos de hidrógeno atómico se utilizó un factor de escala 0.5. Para $v_p=2a.u.$ existe un excelente acuerdo entre CTMCM y los datos experimentales. Por otro lado, B1 y BE están un poco por debajo de su límite de validez. Para $v_p=5a.u.$ los resultados obtenidos con CTMCM y BE coinciden mientras que, a bajas energías de los electrones, los mismos difieren de los obtenidos con B1.

La figura 18 muestra secciones eficaces simplemente diferenciales $d\sigma/d\Omega$ como función del ángulo de emisión de electrones para el caso de ionización de H(1s) por impacto de iones multicargados a velocidades del proyectil $v_p=2$ y $5a.u.$. A grandes ángulos es posible observar un claro comportamiento de 'saturación'. Es difícil determinar si realmente se produce un fenómeno de saturación exacto dentro de los errores estadísticos presentes. Más aún, es posible que existan cruces entre curvas de distinta carga Z_p . Al movernos de pequeños a grandes ángulos, la 'saturación' es obtenida más rápidamente para $v_p=2a.u.$ que para $v_p=5a.u.$. En el caso de $v_p=2a.u.$ también se

incluyen resultados experimentales de Rudd et al. [136] para el caso de proyectiles H^+ y utilizando la misma ley de escala del párrafo anterior. Como puede observarse, existe un acuerdo bastante bueno entre dichos resultados experimentales y CTMCM, los cuales difieren bastante de B1. A pequeños ángulos, el mejor acuerdo de CTMCM con los experimentos puede ser una indicación de que la aproximación clásica contiene información acerca del pico de captura al continuo [137].

La figura 19 muestra el cociente de los resultados obtenidos con CTMCM de las figuras 17 y 18 con los que se obtendrían si se utilizara la ley Z_p^2 . Analicemos primero el comportamiento de $d\bar{\sigma}/d\epsilon$. Para $v_p=5a.u.$ la ley de escala Z_p^2 es válida, dentro de los errores estadísticos, a lo largo de todo el rango de energías del electrón, si Z_p es suficientemente pequeña (p.e.j. $Z_p < v_p$). Para valores más grandes de Z_p se empieza a observar un apartamiento apreciable respecto de la ley Z_p^2 en la región más baja del espectro. Los resultados muestran que, cuanto más grande es Z_p , más grandes son las energías del electrón para las cuales vale la ley Z_p^2 . Debido al gran esfuerzo de cómputo que hubiera demandado, no ha sido posible comprobar si la ley Z_p^2 es válida en el caso $v_p=2a.u.$ en el límite de energías electrónicas muy grandes. De todos modos, el comportamiento general de los resultados indicaría que esta afirmación es cierta. Analicemos ahora el comportamiento de $d\bar{\sigma}/d\Omega$. El primer punto a notar es que la ley Z_p^2 no es válida

en ninguna región del espectro angular. A pequeños ángulos y $v_p=2a.u.$, la sección eficaz crece menos rápido que Z_p^2 , mientras que para $v_p=5a.u.$ el incremento es mayor que Z_p^2 . Nuevamente mencionamos que este último efecto puede ser debido a que CTMCM contiene el pico de captura al continuo. Como es sabido, dicho pico tiene, a primer orden, una dependencia Z_p^3 . Aunque su influencia está escondida en la integración sobre la energía electrónica, no deberíamos estar sorprendidos de encontrar sus huellas a pequeños ángulos. Para grandes ángulos de emisión, las secciones eficaces crecen menos rápido que Z_p^2 .

Con el objeto de estudiar más a fondo los efectos de saturación, es útil analizar la dependencia de las probabilidades de ionización con el parámetro de impacto. Cuando la condición $Z_p/v_p \ll 1$ es satisfecha, se espera que que la ley Z_p^2 valga para todos los parámetros de impacto. Cuando dicha condición no se cumple, todavía se espera que la región de grandes parámetros de impacto pueda ser descripta correctamente mediante métodos perturbativos. Los apartamientos a la ley Z_p^2 aparecerán primero en la región de bajos parámetros de impacto. Las figuras 20 y 21 muestran las probabilidades de ionización para varios valores de Z_p a las velocidades $v_p=2a.u.$ y $5a.u.$ respectivamente. Estas dos velocidades son representativas de dos situaciones físicas diferentes que pueden producir el fenómeno de saturación o aún el decrecimiento de las secciones eficaces de ionización. Básicamente, la diferencia de estos dos

casos está relacionada con la importancia de los canales de captura. Para $v_p=5a.u.$ (fig.20), donde la probabilidad de captura es despreciable, puede verse que a pequeños parámetros de impacto la probabilidad de ionización satura: "no puede ser más grande que uno". Para $v_p=2a.u.$ (fig.21), la captura electrónica (también dibujada) juega un rol muy importante, siendo más importante que la ionización en $Z_p=10$. Debido a que CTMC posee la propiedad de unitariedad, el incremento de la probabilidad de captura trae aparejado el decrecimiento de la probabilidad de ionización.

Veamos ahora que sucede con las secciones eficaces de excitación. Clásicamente es posible definir una sección eficaz $d\sigma/d\epsilon$ continua, donde ϵ es la energía de ligadura del electrón respecto al núcleo blanco. En caso que ϵ sea positiva, estaremos tratando con el canal de ionización y dicha sección eficaz será la dibujada en la fig.17. En caso que ϵ sea negativa, estaremos tratando con los canales de excitación. Cuánticamente, la energía final del electrón no puede tomar valores en forma continua ya que la misma debe ser alguna de las energías de ligadura de los autoestados del Hamiltoniano del blanco. Algunos autores han tratado de discriminar clásicamente la probabilidad de que el electrón finalice la colisión en determinados estados cuánticos [20,34,35]. Sin embargo, de acuerdo a lo discutido en la sección 2-6 dichos análisis son algo arbitrarios y su validez es muy dudosa. Un camino

alternativa fue propuesto en el trabajo [47] y consiste en 'continuar las secciones eficaces cuánticas de excitación a estados de Rydberg (p.ej. $n > 5$). Supongamos que $\sigma(n, l, m)$ es la sección eficaz total de excitación a un estado cuántico final especificado por n, l, m . Entonces, es posible definir una sección eficaz $d\sigma/d\epsilon$ cuántica como sigue

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{m^3}{Z_r^2} \sum_{m, l} \sigma(n, l, m) \quad \dots(4.2)$$

donde $\epsilon = 0.5Z_r^2/n^2$ es la energía del estado final n, l, m . La razón por la cual es posible hacer esta definición es que para grandes valores del número cuántico principal n (p.ej. $n > 5$) la sección eficaz total de excitación depende del mismo como n^{-3} . Como fue demostrado formalmente por Dubé y Salin [138] para el caso de captura al continuo, la sección eficaz (4.2) es continua con la sección eficaz de ionización, al igual que sucede en la aproximación clásica.

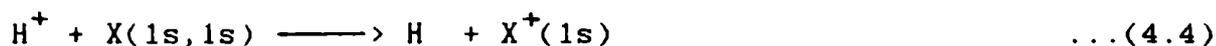
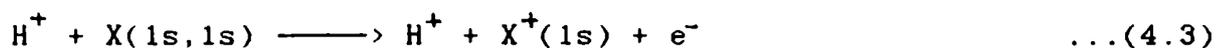
En la figura 22 se muestra la sección eficaz de excitación $d\sigma/d\epsilon$ como una función de la carga del proyectil, para tres velocidades de impacto diferentes. Los resultados obtenidos con CTMCM son comparados con el modelo clásico BE y las aproximaciones cuánticas B1 y SE. Como mencionamos anteriormente al tratar la figura 16, SE es una de las aproximaciones que, además de proveer buenas secciones eficaces de excitación a energías intermedias, posee un buen

comportamiento de la carga del proyectil cuando se cumple $Z_p/v_p < 2$ [47, 76]. Para $v_p = 2$ a.u. CTMCM y SE difieren mucho de B1 y BE. Mientras B1 y BE poseen una dependencia Z_p^2 , CTMCM y SE saturan para grandes valores de la carga del proyectil. Se espera que el rango de validez de SE, para esta velocidad, sea $Z_p < 4$ [76]. Si se extienden los resultados de SE para cargas más grandes (fuera del supuesto rango de validez), se observa que los mismos decrecen. Debido al esfuerzo de cálculo requerido, no ha sido posible obtener más resultados con CTMCM para cargas mayores que 10. Para velocidades más grandes ($v_p = 5, 10$), los apartamientos a la ley Z_p^2 son observados a más y más grandes cargas del proyectil. La pequeña diferencia entre CTMCM y SE en $v_p = 5$ a.u. es muy similar a la que existe entre BE y B1 y se debe al problema mencionado en 4-1, acerca de que CTMCM no posee el correcto comportamiento asintótico de las secciones eficaces para procesos directos. Sin embargo, es interesante observar que ambas teorías predicen 'saturación' en forma coherente. Para $v_p = 10$ a.u. CTMCM no es válido y por lo tanto no se presentan resultados, mientras que es correcto utilizar SE en todo el rango de cargas del proyectil dibujado.

4-4 Colisiones de protones con He y Li⁺

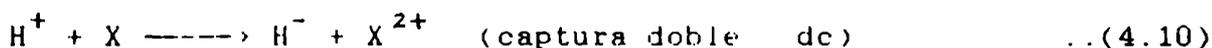
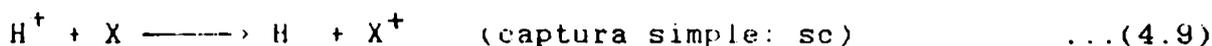
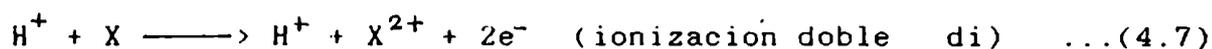
Como fue mencionado en el capítulo 3, la mayor parte de los cálculos clásicos y cuánticos llevados a cabo hasta el presente (ver p.ej [22, 26, 33, 36, 41, 43, 44]) estudian el problema de más de un electrón en base al problema de un sólo electrón activo que interactúa con los demás a través de un potencial estático promedio y asumiendo el modelo de electrones independientes [77,78]. En esta sección se utilizará dicho modelo para el estudio de las colisiones de protones con blancos de He y Li⁺

De acuerdo al modelo de electrones independientes, las secciones asociadas a los sistemas H⁺+ He, H⁺+ Li⁺ pueden obtenerse a partir de las siguientes reacciones a un electrón



donde X denota los blancos He y Li⁺ y * denota todos los estados ligados de X.

Los posibles canales de reacción para los sistemas estudiados en esta sección son



Supongamos que P_i , P_c y P_e son respectivamente las probabilidades de ionización, captura y excitación de las reacciones (4.3), (4.4) y (4.5), para valores determinados del parámetro de impacto y la velocidad de colisión. Entonces, de acuerdo al modelo de electrones independientes, las probabilidades de que ocurran las reacciones (4.6)-(4.11) están dadas por:

$$P_{si} = 2 P_i P_e \quad \dots(4.12)$$

$$P_{di} = P_i^2 \quad \dots(4.13)$$

$$P_{ci} = 2 P_i P_c \quad \dots(4.14)$$

$$P_{sc} = 2 P_c P_e \quad \dots(4.15)$$

$$P_{dc} = P_c^2 \quad \dots(4.16)$$

$$P_{ee} = P_e^2 \quad \dots(4.17)$$

Puesto que $P_i + P_c + P_e = 1$, estas últimas relaciones preservan la propiedad de unitariedad. La probabilidad de producción de electrones libres puede obtenerse sumando P_{si} , P_{di} y P_{ci} , cuyo

resultado es

$$P_{e^-} = P_i + P_i^2 \quad \dots(4.18)$$

Las secciones eficaces totales para las reacciones anteriores pueden obtenerse integrando las probabilidades (4.12)--(4.18) en el parámetro de impacto.

Como se mencionó en el capítulo 3, por falta de un método para tomar una muestra de condiciones iniciales, todos los cálculos clásicos llevados a cabo hasta 1984 utilizaban un potencial coulombiano del tipo (3.10) para representar la interacción del electrón activo con los electrones pasivos. En dicho capítulo se discutieron cuáles eran los puntos a favor de representar dicha interacción por un potencial modelo como (3.11). En esta sección nos remitiremos a estudiar las diferencias existentes entre las secciones eficaces que provienen de utilizar U_{mod} o U_{ef} y una distribución inicial microcanónica.

En la figura 23 se muestran las secciones eficaces totales σ_{si} , σ_{e^-} , σ_{sc} y σ_{di} como función de la energía del proyectil para el sistema $\text{H}^+ + \text{He}$. En todos los casos se comparan los resultados obtenidos con U_{mod} y U_{ef} con datos experimentales. Las curvas teóricas tienen una incerteza menor que 10%, debiéndose notar que los resultados más difíciles de obtener,

dentro de estos límites de error, son los de ionización doble, debido al pequeño valor de las secciones eficaces. Como puede observarse, existe un buen acuerdo entre los experimentos y los cálculos teóricos para los procesos de ionización simple, producción de electrones libres y captura simple, mientras que los resultados obtenidos para ionización doble son incorrectos. Debe notarse que no existen grandes diferencias entre los resultados que provienen de utilizar U_{mod} o U_{ef} , salvo en el rango más bajo de energías consideradas para σ_{Si} y σ_{e^-} y en el caso de ionización doble, para el cual ninguno de los potenciales provee secciones eficaces en acuerdo con los experimentos.

Aunque no se presentan en este trabajo, las secciones eficaces para el canal de captura y ionización tienen el mismo problema [38] que las de ionización doble. Como se discutió en el capítulo 3, U_{mod} parece representar bastante bien al corazón del blanco. Sin embargo, este potencial es incapaz de mejorar los resultados que se obtienen con U_{ef} para procesos que involucran a los dos electrones. Esto nos lleva a pensar que dicha falla se deba a haber utilizado el método de electrones independientes para el presente sistema. En los últimos años se han hecho intentos por incluir clásicamente la correlación electrónica en base al problema de cuatro cuerpos [54-56], describiendo el estado inicial a través de un 'core de Heisenberg' [142], el cual garantiza la estabilidad del blanco.

Como puede verse en el trabajo de McKenzie y Olson ([56] fig.1), este modelo de cuatro cuerpos reproduce las secciones eficaces experimentales de doble ionización.

En la figura 24 se muestran las secciones eficaces totales σ_{Si} , σ_{Sc} y $\sigma_{Li^{2+}}$ (producción de Li^{2+}) como función de la energía del proyectil para el sistema $H^+ + Li^+$. $\sigma_{Li^{2+}}$ puede ser obtenida sumando σ_{Si} y σ_{Sc} . Como puede observarse, existe un buen acuerdo entre los resultados teóricos y los datos experimentales. Al igual que para blancos de He, se observa que las secciones eficaces no son muy sensitivas al cambio de U_{mod} a U_{ef} .

Para investigar aún más las diferencias que podrían llegar a existir entre utilizar U_{mod} o U_{ef} , presentaremos a continuación secciones eficaces de emisión de electrones para el sistema $H^+ + He$. Los resultados teóricos serán comparados con la recopilación de resultados experimentales de Rudd, Toburen y Stolterfoht [141]. Las secciones eficaces diferenciales que se presentarán fueron calculadas multiplicando por dos las que se obtienen con un solo electrón. Esto es consistente con el hecho de que, en la expresión (4.18), el término P_i^2 es despreciable frente a $2P_i$.

En la figura 25 se muestra la sección eficaz de ionización simplemente diferencial como una función de la energía de los

electrones emitidos para dos energías de colisión. Para 100keV, los resultados obtenidos con U_{ef} están bastante de acuerdo con los datos experimentales de Rudd, Sautter y Bailey y los de Rudd y Madison. Por otro lado, los resultados obtenidos con U_{mod} se parecen mas a los datos experimentales de Rudd y Jorgensen. Para proyectiles de 500keV, ambas interacciones dan las mismas secciones eficaces diferenciales, pero subestiman los datos experimentales de Stolterfoht et al.. Debe notarse (ver fig.23) que las secciones eficaces totales medidas por estos autores son mayores que el trazo general de los datos de Barnett et al. [140].

En la figura 26 se muestra la sección eficaz de ionización simplemente diferencial como una función del ángulo de emisión de los electrones para dos energías de colisión. Las conclusiones que se deducen de esta figura son muy similares a las obtenidas en la figura anterior.

En la figura 27 se muestran las probabilidades de ionización por el parámetro de impacto como una función de este último para las energías de colisión de las dos figuras anteriores. En dicha figura puede observarse que, dependiendo del potencial U_{mod} o U_{ef} utilizado, se obtiene una curva muy diferente. Sin embargo, como vimos en las figuras anteriores, estas diferencias no se reflejan en las secciones eficaces diferenciales y totales para 500keV. A más altas energías, los

lugares donde se anulan las probabilidades de ionización coinciden con los cortes de las densidades de la posición de la figura 7. Esto se debe a que, a altas energías, solamente las colisiones binarias muy cercanas entre el electrón y el proyectil contribuyen significativamente al proceso de ionización.

5 - CONCLUSIONES Y DESARROLLOS FUTUROS

1) No existe ninguna duda acerca de la utilidad de las aproximaciones clásicas para el estudio de procesos atómicos. Sin embargo, muy poco se ha investigado sobre la fundamentación de dichos métodos en un dominio donde la mecánica cuántica constituye una referencia obligada para contrastar cualquier otro modelo. En ese sentido, sería deseable un mayor esfuerzo para establecer los fundamentos cuánticos del método CTMC. Hasta el presente, la mayor justificación para su empleo ha sido su capacidad para reproducir resultados experimentales. En este trabajo se ha mostrado que algunos métodos clásicos como el de Thomson y CTMCR pueden ser interpretados como aproximaciones cuánticas. La conexión que se ha desarrollado ha sido llevada a cabo en la 'representación coordinada' de la función de onda. Luego, la distribución inicial debe reproducir la densidad inicial cuántica de la posición. Dicha conexión no debería ser invocada para justificar los cálculos clásicos que parten de un estado inicial que provee una buena descripción de la densidad cuántica del impulso (como sucede con CTMCM para estados $1s$). En su lugar, sería necesario encontrar alguna conexión en la 'representación impulso' de la función de onda.

En lo que se refiere a la conexión encontrada, debe notarse

que todavía existen algunos aspectos que no están del todo claros. Uno de ellos es que la distribución clásica inicial no está determinada en forma unívoca. Debemos recordar que se ha supuesto que la misma no depende del momento angular. Luego, es posible que existan varias distribuciones iniciales que reproduzcan la densidad cuántica de la posición. Es más, dada la escasa diferencia que existe entre la densidad de probabilidad del impulso asociada a $f_V(E)$ y la correspondiente densidad cuántica, existe la posibilidad de encontrar una distribución inicial que dependa del momento angular y que reproduzca simultáneamente las densidades cuánticas del impulso y la posición.

- 2) Se ha encontrado una explicación posible al hecho de que los métodos clásicos no proveen el correcto comportamiento de las secciones eficaces asociadas a procesos directos a altas energías del proyectil. Dicha explicación se basa en que, a altas energías de colisión, la emisión de partículas de probabilidad de baja energía no se produce durante el pasaje del proyectil a través del blanco sino una vez que dichos centros se han alejado. Una serie perturbativa en potencias de $(1/v_p)$ nos ha mostrado que se obtendría el comportamiento asintótico deseado si se integrara la amplitud de transición por unidad de tiempo. Los resultados obtenidos en el caso de una colisión unidimensional indicarían que, si se integra la amplitud de transición por unidad de tiempo, CTW también

proporciona el correcto comportamiento asintótico de las secciones eficaces de captura. Por otro lado, se ha mostrado que este comportamiento no es obtenido mediante C'MCR. Se concluye entonces que la aproximación clásica sólo provee una buena función de onda a pequeñas distancias internucleares. Se ha descartado la posibilidad de calcular probabilidades de transición a determinados estados cuánticos finales mediante el conteo de partículas o la proyección de la función de onda clásica final. Las condiciones bajo las cuales la aproximación clásica proveería buenas secciones eficaces si se utiliza el método de conteo de partículas deben ser objeto de una investigación más exhaustiva.

- 3) En el capítulo 2 se han discutido las formas en que pueden obtenerse aproximaciones cuánticas en la interpretación hidrodinámica de la ecuación de Schrödinger. Este es el caso de las aproximaciones eikonal, TTW, CTW y I2. Sería interesante estudiar más a fondo la posibilidad de encontrar buenas aproximaciones o bien para el potencial cuántico o bien para las trayectorias $\bar{R}(\bar{R}_0, t)$, las cuales determinan completamente a la función de onda. En el caso de encontrar una buena aproximación para U_q , esta podría ser utilizada a energías bajas e intermedias junto con el método de conteo de partículas para estudiar el proceso de ionización. Hasta el presente no existen aproximaciones cuánticas que provean secciones eficaces diferenciales precisas de emisión de

electrones en dicho rango energético. En ese sentido, sería deseable investigar las posibilidades que abriría un método como el propuesto.

- 4) En las secciones 4-1 y 4-2 se mostró que CTMCR provee mejores secciones eficaces totales de captura que CTMCM, mientras que sucede lo opuesto para el proceso de ionización. Se analizó el rango de validez de CTMC y se encontró que el mismo no es independiente de la carga del proyectil, como se suponía hasta el presente. Se observó que las secciones eficaces de captura mejoran o empeoran de acuerdo a que Z_p aumente o disminuya respectivamente. En el caso de las secciones eficaces de ionización las conclusiones son totalmente opuestas.

- 5) Al analizar las secciones eficaces de ionización y excitación a estados de Rydberg, se encontró que CTMCM predice grandes apartamientos respecto de la ley Z_p^2 . En general, se observó un efecto de 'saturación' que comienza a ser apreciable para valores $v_p/Z_p \sim 1$ y se hace cada vez más importante cuando este cociente disminuye. En cuanto a las secciones eficaces diferenciales, podemos decir que el fenómeno de 'saturación' comienza a observarse a pequeños parámetros de impacto, grandes ángulos de emisión y pequeñas energías del electrón. Estas conclusiones coinciden cualitativamente con las obtenidas experimentalmente por Platten et al. [133,134] para

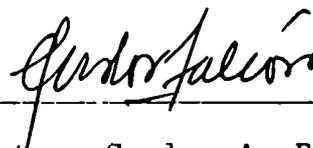
el caso de colisiones de iones multicargados con blancos de helio a altas energías. Los efectos de 'saturación', que no están presentes en aproximaciones de primer orden, aparecen en mecánica cuántica como una consecuencia de incluir términos perturbativos superiores en la carga del proyectil. Clásicamente, estos efectos se deben a la inclusión del potencial del blanco en la dinámica de la colisión.

- 6) Se desarrolló un método original para tomar muestras de conjuntos microcanónicos que involucren interacciones generales. Dicho método fue utilizado para estudiar, mediante el modelo de electrones independientes, la dependencia de las secciones eficaces con el tipo de potencial utilizado para describir la interacción del electrón activo con los no activos. Se utilizó un potencial modelo para representar dicha interacción y se demostró que el mismo es más realista que un potencial coulombiano con una carga efectiva. Sin embargo, se observó que las secciones eficaces que involucran transiciones de un sólo electrón no son muy sensitivas al tipo de interacción utilizada, salvo a bajas energías. En el caso de transiciones que involucran dos electrones, se encontró que los cálculos teóricos difieren apreciablemente de los experimentos. Se concluye que, en el caso de blancos de He, es incorrecto utilizar el método de electrones independientes para describir transiciones de dos electrones. Cálculos recientes basados

en el análisis del problema de cuatro cuerpos indicarían que es posible describir correctamente y en forma clásica el proceso de doble ionización [55,56]. Sin embargo, no existe hasta el presente un modelo clásico para el átomo de He que se corresponda adecuadamente con la mecánica cuántica.



Autor: C.O. Reinhold Larsson



Director: Carlos A. Falcón

APENDICE A Unidades atómicas

Para facilitar la escritura y el cálculo numérico de problemas relacionados con colisiones atómicas, se eligen las denominadas unidades atómicas (a.u.) de la siguiente forma

$$e = \text{carga del electrón} = 1 \text{ a.u.} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ coul.}$$

$$m = \text{masa del electrón} = 1 \text{ a.u.} = 9.108 \cdot 10^{-31} \text{ kg.}$$

$$\begin{aligned} \hbar &= \text{constante de Plank dividida por } 2\pi = 1 \text{ a.u.} \\ &= 1.0544 \cdot 10^{-34} \text{ joule.seg.} \end{aligned}$$

Una vez elegidas estas unidades, se obtienen las siguientes unidades derivadas

$$a_0 = \text{radio de Bohr para H(1s)} = 1 \text{ a.u.}$$

$$v_0 = \text{velocidad de Bohr para H(1s)} = 1 \text{ a.u.}$$

$$T_0 = \text{período de Bohr para H(1s)} = 2\pi \text{ a.u.}$$

$$E_0 = \text{energía de ligadura de H(1s)} = 0.5 \text{ a.u.}$$

$$c = \text{velocidad de la luz} = 137 \text{ a.u.}$$

$$M_p = \text{masa del protón} = 1836 \text{ a.u.}$$

Algunas equivalencias y fórmulas útiles son:

$$\pi^2 a_0^2 = 0.880 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$$

$$E(\text{en eV}) = 27.2 \quad E(\text{en a.u.})$$

$$\text{Energía de un ion(en kev/amu)} = 25 \cdot v_p(\text{en a.u.})$$

APENDICE B - Equivalencia entre la formulación usual de la aproximación de Thomson y su formulación de parámetro de impacto.

Supongamos que ϵ es la energía adquirida por un elemento de fluido al final de la colisión. Los propósitos de este apéndice son (i) calcular la sección eficaz $d\sigma/d\epsilon$ con la aproximación de Thomson de la sección 2-3, (ii) mostrar su equivalencia con las expresiones usuales para la misma y (iii) probar que el resultado que se obtiene es independiente de la densidad de probabilidad inicial.

La sección eficaz $d\sigma/d\epsilon$ esta dada por la siguiente integral sobre el parámetro de impacto \bar{b}

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{1}{d\epsilon} \int d\bar{b}^2 P(\bar{b}, \epsilon, d\epsilon) \quad \dots(B1)$$

donde $P(\bar{b}, \epsilon, d\epsilon)$ es la probabilidad de que los elementos de fluido tengan una energía final en el intervalo $[\epsilon, \epsilon+d\epsilon]$, para un dado parámetro de impacto. Esta probabilidad puede ser calculada por integración de la densidad inicial en el recinto $\mathcal{R}(\epsilon, d\epsilon)$, el cual contiene aquellas partículas que terminarán la colisión con las energías requeridas; es decir,

$$P(\bar{b}, \epsilon, d\epsilon) = \int_{\mathcal{R}(\epsilon, d\epsilon)} d\bar{r}^3 \rho_i(\bar{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{\mathcal{R}(\epsilon, d\epsilon)} dx dy \rho_i(\bar{r}) \quad \dots(B2)$$

donde se ha supuesto que el haz incidente es paralelo al eje z y que el potencial del proyectil es central.

Supongamos ahora que hacemos un cambio de coordenadas de \vec{r} a $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{b}$. Las componentes según el eje z de \vec{r} y \vec{r}' son iguales, pero la proyección de \vec{r}' en el plano (x,y) es el parámetro de impacto $\vec{\eta}$ para el choque binario entre el proyectil y el elemento de fluido cuya posición inicial es \vec{r} . La ventaja de este cambio de variables es que la energía final ϵ puede ser obtenida en función del módulo de $\vec{\eta}$. Luego, la región $\mathcal{R}(\epsilon, d\epsilon)$ dependerá sólo de η . Para el caso particular en que el potencial del proyectil sea coulombiano con carga Z_p , la relación entre ϵ y η está dada por $\epsilon = 2 m v_p^2 \eta^2 / (4\eta^2 + \delta^2)$ donde $\delta = 2 Z_p e^2 / (m v_p^2)$.

Una vez hecho el cambio de coordenadas de \vec{r} a \vec{r}' , se obtienen las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{G}}{d\epsilon} &= \frac{1}{d\epsilon} \int d^2b \int_{\mathcal{R}(\epsilon, d\epsilon)} d^3r' \rho_i(\vec{b} + \vec{r}') \\ &= \frac{1}{d\epsilon} \int_{\mathcal{R}(\epsilon, d\epsilon)} d^2\eta \left(\int d^2b \int_{-\infty}^{+\infty} dz \rho_i\left(\vec{b} + z \frac{\vec{v}_p}{v_p} + \vec{\eta}\right) \right) \dots (B3) \end{aligned}$$

Notemos ahora que la última expresión entre paréntesis es igual a uno ya que es la integral de la densidad en todo el espacio. Luego, llegamos a la expresión final

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{1}{d\epsilon} \int_{\mathcal{R}(\epsilon, d\epsilon)} d^2\eta \quad \dots(B4)$$

la cual es independiente de la densidad inicial. Para el caso particular de un potencial coulombiano, la región $\mathcal{R}(\epsilon, d\epsilon)$ está dada por

$$- \frac{d\epsilon m v_p^2 \gamma^2}{4\epsilon^2 \eta(\epsilon)} < \eta - \eta(\epsilon) < 0 \quad \dots(B5)$$

y produce la sección eficaz

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{\pi}{2} m v_p^2 \gamma^2 \frac{1}{\epsilon^2} \quad \dots(B6)$$

la cual es equivalente a la que se encuentra en la literatura (ver [10] cap.3).

APENDICE C: Cálculo de las aproximaciones teóricas utilizadas en la colisión unidimensional de la sección 2-6

Las funciones de onda asociadas a la primera aproximación de Born y a la aproximación eikonal están dadas por

$$\Psi^{B1}(x,t) = \varphi_1(x) e^{-i\epsilon_1 t} \quad \dots(C1)$$

$$\Psi^{EIK}(x,t) = \Psi^{B1}(x,t) e^{i \frac{Q_p}{2v_p} [1 - \tanh(x-v_p t)]} \quad \dots(C2)$$

La función de onda de Thomson puede ser calculada como se describe en la sección 2-1-3 y el resultado que se obtiene es

$$\Psi^{TTW}[X(t),t] = \Psi^{B1}(X_0,t) e^{i\delta(X_0,t)} \left(1 - 2 U_p[Y(t)] / v_p^2 \right)^{-1/4} \quad \dots(C3)$$

con

$$\begin{aligned} Y(t) &= X(t) - v_p t \\ &= \operatorname{arsinh}[c \sinh(X_0 - v_p t - \ln c)] \end{aligned} \quad \dots(C4)$$

$$\delta(X_0,t) = v_p \left\{ X(t) - X_0 + \operatorname{artg}(a) - \operatorname{artg}[a \tanh(X_0 - v_p t - \ln c)] \right\} \quad \dots(C5)$$

donde $a = Q_p / v_p^2$ y $c = \sqrt{1 + a}$ La amplitud de transición para esta aproximación puede ser calculada mediante (2.55).

Si el potencial cuántico es calculado con la densidad de probabilidad de Thomson, se obtiene el siguiente resultado

$$U_q^{(2)}[X(t), t] = F^4 [\epsilon_1 - U_T(X_0)] + 3 F \tanh(X_0) \frac{\partial F}{\partial X} - \frac{1}{2F} \frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \quad (C6)$$

donde $F = \left(1 - 2 U_p [X(t) - v_p t] / v_p^2 \right)^{1/4}$. Este potencial cuántico puede ser usado para integrar numéricamente la ecuación (2.18) y de este modo obtener la función de onda I2.

La implementación numérica del método CTMC es muy parecida a la que se usa en tres dimensiones, la cual puede verse en el capítulo 3. El estado inicial φ_1 puede ser reproducido exactamente utilizando una distribución inicial clásica que sólo dependa de la energía, siguiendo los pasos de la sección 3-1. La solución para el presente caso es

$$f_i(x, p) = f_i(E) = \begin{cases} -\frac{3}{\pi Q_T^{3/2}} E & \text{si } -\frac{Q_T}{2} < E < 0 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad \dots(C7)$$

La elección de una muestra de esta distribución inicial puede hacerse siguiendo los pasos de la sección 3-3-1. La integración de las ecuaciones de Hamilton debe llevarse a cabo numéricamente. Debe notarse que dicha integración es necesario llevarla a cabo simultáneamente para todas las partículas, para

poder calcular la función de onda CTW. En el presente trabajo se han utilizado 100000 partículas con el objeto de obtener la fase de la función de onda en forma precisa. Supongamos que dividimos el eje x en una cantidad N_c de celdas con posición media x_i ($i=1, \dots, N_c$) y que, al tiempo t , cada intervalo contiene una cantidad de partículas N_i . Entonces, la densidad y el campo de velocidades pueden ser calculados como

$$\rho(x_i, t) = \frac{N_i}{N_p \Delta x} \quad \dots(C8)$$

$$v(x_i, t) = \left(\sum_{k=1}^{N_i} p_k \right) / N_i \quad \dots(C9)$$

donde N_p es el número total de partículas, Δx es el ancho de cada celda y la suma sobre los impulsos se extiende sobre las partículas contenidas en el intervalo número i . La fase de la función de onda puede ser calculada integrando $v(x, t)$ en la variable x . Sin embargo, como se discutió en la sección 2-4, esta integración está definida a menos de una constante espacial y depende del camino seguido. El siguiente resultado es equivalente a usar (2.39) en la ecuación (2.10)

$$S(x, t) = \text{Const}(t, x_q) + \int_{x_q}^x dx' v(x', t) \quad \dots(C10)$$

$$\text{Const}(t, x_q) = -\epsilon_1 t \int_{-T}^t dt' \left(\frac{1}{2} v^2(x_q, t') + U_p(x_q, t') \right) \quad \dots(C11)$$

donde x_q es un punto arbitrario que expone la ambigüedad en

la definición de la fase. Como puede observarse, el valor de la fase en este punto es $S(x_q, t) = -\epsilon_1 t - \text{Const}(t)$, la cual es del mismo tipo que la fase para la aproximación de Thomson. En la sección 2-6 se estudia la dependencia de las probabilidades de transición con x_q .

ABREVIATURAS

- ACC — Canales atómicos acoplados (atomic close-coupling)
- B1 — Primera aproximación de Born (first Born approximation)
- BE — Modelo del encuentro binario (binary encounter)
- CTMC — Método Monte Carlo de trayectorias clásicas (classical trajectory Monte Carlo method)
- CTMCM - Método CTMC con un conjunto inicial microcanónico (CTMC approximation with an initial microcanonical ensemble)
- CTMCR - Método CTMC con una distribución inicial que reproduce la densidad cuántica de la posición (CTMC approximation with an initial distribution that reproduces the quantum position density)
- CTW — Función de onda de trayectorias clásicas (classical-trajectories wavefunction)
- EIK — Aproximación eikonal (eikonal approximation)
- L-Z — Landau-Zener
- MCC — Canales moleculares acoplados (molecular close-coupling)
- MSI — Aproximación multiple scattering usando el potencial inicial (multiple scattering approximation using the initial potential)
- OBK — Aproximación de Oppenheimer-Brinkmann-Kramers (Oppenheimer-Brinkmann-Kramers approximation)
- SCHW — Principio variacional de Schwinger

REFERENCIAS

- [1] Thomson J.J. 1912 Phil. Mag. 23 449.
- [2] Thomas L.H. 1927 Proc. Camb. Phil. Soc. 23 713.
- [3] Thomas L.H. 1927 Proc. Camb. Phil. Soc. 23 829.
- [4] Williams 1927 Nature (London) 119 489.
- [5] Gryzinski M. 1959 Phys. Rev. 115 374.
- [6] Gryzinski M. 1965 Phys. Rev. 138 A305.
- [7] Gryzinski M. 1965 Phys. Rev. 138 A305.
- [8] Gryzinski M. 1965 Phys. Rev. 138 A305.
- [9] Burgess A. y Percival I.C 1968 Adv. At. Mol. Phys. 4 109.
- [10] McDowell M.R.C. y Coleman J.P. 1970 Introduction to the Theory of Ion-Atom collisions (Amsterdam: North-Holland).
- [11] Vriens L. 1969 Case Studies in Atomic Collision Physics I (Amsterdam; North-Holland) capitulo 6.
- [12] Bates D.R. y Kingston A.E. 1970 Adv. At. Mol. Phys. 6 289.
- [13] Percival I.C. y Richards D. 1975 Adv. At. Mol. Phys. 11 1
- [14] Abrines R. y Percival I.C. 1966 Proc. Phys. Soc. 88 861.
- [15] Abrines R. y Percival I.C. 1966 Proc. Phys. Soc. 88 873.
- [16] Olson R.E. y Salop A. 1977 Phys. Rev. A 16 531.
- [17] Banks D., Barnes K.S. y McB Wilson J. 1976 J. Phys. B 9 L141.
- [18] Olson R.E., Salop A., Phaneuf R.A, Meyer F.W. 1977 Phys. Rev. A 16 1867.
- [19] Salop A. y Olson R.E. 1977 Phys. Rev. A 16 1811.
- [20] Salop A 1978 J. Phys. B 11 919.

- [21] Shipsey E.J., Redmon L.T., Browne J.C. y Olson R.E. 1978 Phys. Rev. A 18 1961.
- [22] Olson R.E. 1978 Phys. Rev. A 18 2464.
- [23] Olson R.E. 1978 J. Phys. B 11 L227.
- [24] Olson R.E., Berkner K.H., Graham W.G., Pyle R.V., Schlachter A.S. y Stearns J.W. 1978 Phys. Rev. Lett. 41 163.
- [25] Berkner K.H., Graham W.G., Pyle R.V., Schlachter A.S., Stearns J.W. y Olson R.E. 1978 J. Phys. B 11 875.
- [26] Olson R.E. 1979 J. Phys. B 12 1843.
- [27] Olson R.E. 1979 J. Phys. B 12 L109.
- [28] Salop A. y Olson R.E. 1979 Phys. Rev. A 19 1921.
- [29] Olson R.E. 1980 J. Phys. B 13 483.
- [30] Shipsey E.J., Browne J.C. y Olson R.E. 1981 J. Phys. B 14 869.
- [31] Eichenauer D., Grün N., y Scheid W. 1981 J. Phys. B 14 3929.
- [32] Cohen J.S. 1982 Phys. Rev. A 26 3008.
- [33] Olson R.E. 1982 J. Phys. B 15 L163.
- [34] Kohring G.A., Wetmore A.E. y Olson R.E. 1983 Phys. Rev. A 28 2526.
- [35] Hardie D.J.W. y Olson R.E. 1983 J. Phys. B 16 1983.
- [36] McDowell M.R.C. y Janev R.K. 1984 J. Phys. B 17 2295.
- [37] Cohen J.S. 1985 J. Phys. B 17 1759.
- [38] Reinhold C.O. y Falcón C.A. 1986 Phys. Rev. A 33 3859.
- [39] McDowell M.R.C. y Janev R.K. 1985 J. Phys. B 18 L295.

- [40] Peach G., Willis S.L. y McDowell M.R.C. 1985 J. Phys. B 18 3916.
- [41] Willis S.L., Peach G., McDowell M.R.C. y Barneji J 1985 J. Phys. B 18 3921.
- [42] Ermolaev A.M. y McDowell M.R.C. 1987 J. Phys. B 20 L379.
- [43] Ermolaev A.M., Hewitt R.N. y McDowell M.R.C. 1987 J. Phys. B 20 3125.
- [44] Ermolaev A.M., Hewitt R.N., Shingal K. y McDowell M.R.C. 1987 J. Phys. B 20 4507.
- [45] Olson R.E. 1983 Phys. Rev. A 27 1871.
- [46] Rille E., Olson R.E., Peacher J.L., Blankenship D.M., Kvale T.J., Redd E. y Park J.T. 1982 Phys. Rev. Lett. 49 1819.
- [47] Reinhold C.O., Falcón C.A. y Miraglia J.E 1987 J. Phys. B 20 3737.
- [48] Olson R.E. 1986 Phys. Rev. A 33 4397.
- [49] Olson R.E., Gay T.J., Berry H.G., Hale E.B. y Irby V.D. 1987 Phys. Rev. Lett. 59 36.
- [50] Schiwietz G. 1987 enviado al Phys. Rev. A; 1986 Tesis de doctorado en Technische Universitat Berlin.
- [51] Grosdanov T.P. y McDowell M.R.C. 1985 J. Phys. B 18 921.
- [52] Ohsaki A., Watanabe T., Nakanishi K. y Iguchi K. 1985 Phys. Rev. A 32 2640.
- [53] Cohen J.S. y Fiorentini G. 1986 Phys. Rev. A 33 1590.
- [54] Pfeifer S.J. y Olson R.E. 1982 Phys. Lett. 92A 175.
- [55] Zajfman D. y Maor D. 1986 Phys. Rev. Lett. 56 320.

- [56] McKenzie M.L. y R.E. Olson 1987 Phys. Rev. A 35 2863.
- [57] Percival I.C. y Richards D. 1970 J. Phys. B 3 315.
- [58] Hinnov E. 1976 Phys. Rev. A 14 1533.
- [59] Hogan J. y Howe H.C. 1975 Bull. Am. Phys. Soc. 20 1228.
- [60] Golden J.E. y McGuire J.H. 1976 J. Phys. B 9 L11.
- [61] Miraglia J.E. 1980 Tesis de doctorado, Universidad Nacional de la Plata.
- Garibotti C.R. y Miraglia J.E. 1980 Phys. Rev. A 21 572.
- [62] Janev R.K. y Presnyakov L.P. 1980 J. Phys. B 13 4233.
- [63] Miraglia J.E. 1983 J. Phys. B 16 1029.
- [64] Ryufuku H. 1982 Phys. Rev. A 25 720.
- [65] Winter T.G. y Lin C.D. 1984 Phys. Rev. A 29 567.
- [66] Micha D. y Piacentini R.D. 1982 Phys. Rev. A 25 204.
- [67] Shakeshaft R 1978 Phys. Rev. A 18 1930.
- [68] Grün N, Muhlans A y Scheid W. 1982 J. Phys. B 15 4043.
- [69] Bottcher C. 1982 Phys. Rev. Lett. 48 85.
- [70] Terlecki G., Grün N. y Scheid W. 1984 J. Phys. B 17 3719.
- [71] Reinhold C.O. y Falcón C.A. 1987 enviado al J. Phys. B.
- [72] Reinhold C.O. 1984 Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Argentina.
- [73] Reinhold C.O. y Miraglia J.E. 1987 J. Phys. B 20 541.
- [74] Reinhold C.O. y Falcón C.A. 1987 enviado al J. Phys. B.
- [75] Blanco S.A., Falcón C.A., Reinhold C.O, Casaubón I y Piacentini R.D. 1987 J. Phys. B en prensa.
- [76] Reinhold C.O. y Miraglia J.E. 1987 J. Phys. B 20 1069.

- [77] McWire J.H y Weaver I. 1977 Phys. Rev. A 16 41.
- [78] Hansteen J.M. y Mosebekk O.P. 1972 Phys. rev. Lett. 29
1361.
- [79] Messiah A. 1974 Quantum Mechanics (Amsterdam;
North-Holland) Vol. 1 p 222.
- [80] Mittleman M.H. y Quong J. 1965 Phys. Rev. 167 74.
- [81] Goldberg A. Schey H.M. y Schwartz J.L. 1967 Am. J. Phys.
35 177.
- [82] Ponce V.H. 1984, Conferenes invitees, 10th Colloque sur
la Physique des Collisions Atomiques, Aussois, France 170.
- [83] Miraglia J.E., Rodriguez V.D., Gravielle M.S. y Ponce V.H.
1987. XV ICPEAC, Abstracts of contributed papers p 629.
- [84] Dettmann K. 1971 Springer Tracs Mod. Phys. 58 119.
- [85] McCarroll R. y Salin A. 1966 Compt. Rend. Acad. Sci. 263
329.
- [86] Batchelor G.K 1967 An Introduction to Fluid Dynamics
(Cambridge University Press).
- [87] Weiner J.H. y Askar H. 1971 J. Chem. Phys. 54 3534.
- [88] Weiner J.H. y Partom Y. 1969 Phys. Rev. 187 1134.
- [89] Kim H.Y. y Weiner J.H. 1973 Phys. Rev. B 7 1353.
- [90] Chan F.T y Eichler J. 1979 J. Phys. B 12 L305.
- [91] Goldstein H. 1962 Classical Mechanics (Addison-Wesley).
- [92] Huang K. 1963 Statistical Mechanics (New. York; John Wiley
& Sons).
- [93] Kubo R. 1967 Statistical Mechanics (Amsterdam;
North-Holland) capitulo 3.

- [94] Joachain C.J. 1974 Quantum Collision Theory (Amsterdam; North-Holland).
- [95] Dettmann K. y Leibfried G. 1969 Z. Physik 218 1.
- [96] Morse P.M. y Feshbach H. 1953 Methods of Theoretical Physics (McGraw-Hill) p. 768.
- [97] Hildebrand F.D. 1965 Métodos de Matemática Aplicada (Editorial EUDEBA) p.276.
- [98] Gradshteyn I.S. y Ryzhik I.M. 1965 Table of Integrals, Series and Products (New York: Academic)
- [99] Clementi E. y Roetti C. 1974 At. Data Nucl. Data Tables 14 p.185 Table 1 y p.445 Table 43.
- [100] James F. 1980 Rep. Prog. Phys. 43 1145.
- [101] IBM Subroutine Package 1970, System/360 GH20-0250-4, Editado por IBM.
- [102] Rinn K., Melchert F., Rink K. y Saizborn E. 1986 J. Phys. B 19 3717.
- [103] Watts M.F., Dunn K.F. y Gilbody H.B. 1986 J. Phys. B 19 L355.
- [104] Shah M.B., Elliott D.S. y Gilbody H.B. 1987 J. Phys. B 20 2481.
- [105] Fite W.L., Stebbings R.F., Hummer D.G. y Brackman R.T. 1960 Phys. Rev. 119 663.
- [106] Gilbody H.B. y Ireland J.V. 1963 Proc. Roy. Soc. 277 137.
- [107] Shah M.B. y Gilbody H.B. 1981 J. Phys. B 14 2361.
- [108] Shah M.B. y Gilbody H.B. 1982 J. Phys. B 15 413.
- [109] Shah M.B. y Gilbody H.B. 1983 J. Phys. B 16 L449.

- [110] Schaefer A.S., Berkner K.H., Graham W.G., Pyle R.V., Stearns J.W. y Tanis J.A. 1981 Phys. Rev. A 24 1110.
- [111] Peart B., Rinn K. y Dolder K. 1986 J.Phys. B 16 1461.
- [112] Rinn K., Melchert F. y Salzborn E. 1985 J. Phys. B 18 3783.
- [113] Gilbody H.B. y Ryding G. 1966 Proc. Roy. Soc. A 291 438.
- [114] Wittkower A.B., Ryding G. y Gilbody H.B. 1966 Proc. Roy. Soc. 89 541.
- [115] McClure G.W. 1966 Phys. Rev. 148 47.
- [116] Fite W.L., Smith A.C.H. y Stebbings R.F. 1962 Proc. Roy. Soc. A 268 527.
- [117] Nutt W.L., McCullough R.W., Brady K., Shah M.B. y Gilbody H.B. 1978 J.Phys. B 11 1457.
- [118] Shah M.B. y Gilbody H.B. 1978 J. Phys. B 11 121.
- [119] Shah M.B., Goffe T.V. y Gilbody H.B. 1978 J. Phys. B 11 L233.
- [120] Seim W., Muller A. y Salzborn E. 1980 Phys. Lett. 80A 20.
- [121] Goffe T.V., Shah M.B. y Gilbody H.B. 1979 J. Phys. B 12 3763.
- [122] Meyer F.W., Howald A.M., Havener C.C. y Phaneuf R.A. 1985 Phys. Rev. A 32 3310.
- [123] Dijkkamp D., Ciric D. y de Heer F.J. 1985 Phys. Rev. Lett. 54 1004.
- [124] Il'in R.N., Osparin V.A., Solov'ev E.S. y Fedorenko N.V. 1965 JETP Lett. 2 197.

- [125] Il'in R.N., Osparin V.A., Solov'ev E.S. y Fedorenko N.V.
1967 Sov. Phys.-Tech. Phys. 11 921.
- [126] Aumayr F. y Winter H. 1985 Phys. Rev. A 31 67.
- [127] Blanco S.A., Falcón C.A. y Piacentini R.D 1986 J. Phys. B
19 3945.
- [128] Ponce V.H. 1977 At. Data Nucl. Data Tables 19 63.
- [129] Casaubón J.I. y Piacentini R.D. 1984 J. Phys. B 17 1623.
- [130] Salop A. 1976 Phys. Rev. A 13 1321.
- [131] Brendlé B. 1984 These de Docteur en Physique, Université
de Bourdeaux I, Francia.
- [132] Brendlé B., Gayet R, Rozet J.P. y Wohrer K 1985 Phys. Rev.
Lett. 54 2007.
- [133] Platten H. 1986 comunicacion privada.
- [134] Platten H., Schiwietz G., Schneider T., Schneider D.,
Zeitz W., Musiol K., Zouros T., Kowallik R. y Stolterfoht
N. 1987 15th ICPEAC Abstract of Contributed papers p 437.
- [135] Deco G.R., Fainstein P.D. y Rivarola R.D. 1986 J. Phys. B
19 213
- [136] Rudd M.E., Sautter C.A. y Bailey C.L. 1966 Phys. Rev 20
151.
- [137] Crooks G.B. y Rudd M.E. 1970 Phys. Rev. Lett. 25 1599.
- [138] Dubé L.J. y Salin A. 1987 15th ICPEAC Abstracts of
Contributed Papers p 600.
- [139] Shah M.B. y Gilbody H.B. 1985 J. Phys. B 18 889.
- [140] Barnett C.F., Ray J.A., Ricci E., Wilker M.I., McDaniel
E.W. Thomas E.W y Gilbody H.B. 1977 Oak Ridge National

THE UNIVERSITY OF CHICAGO

THE UNIVERSITY OF CHICAGO
 LIBRARY
 540 EAST 57TH STREET
 CHICAGO, ILL. 60637
 TEL: 773-936-3000
 FAX: 773-936-3000
 WWW: WWW.CHICAGO.EDU

DESCRIPCION DE LAS FIGURAS

Figura 1: Sistema colisionante.

Figura 2: Cociente entre la probabilidad de excitación aproximada y la exacta como función de la velocidad del proyectil, para la colisión unidimensional de dos pozos hiperbólicos.

Figura 3: Cociente entre la probabilidad de captura aproximada y la exacta como función de la velocidad del proyectil, para la colisión unidimensional de dos pozos hiperbólicos.

Figura 4: Densidades de probabilidad de la posición y del impulso para el átomo H(1s). Se presentan las densidades cuánticas y las densidades clásicas que provienen de un conjunto microcanónico $f_M(E-E_i)$ y una distribución $f_V(E)$.

Figura 5: Densidades de probabilidad de la posición y del impulso para el átomo H(2s). Se presentan las densidades cuánticas y las densidades clásicas que provienen de un conjunto microcanónico $f_M(E-E_i)$ y una distribución $f_V(E)$.

Figura 6: Densidades de probabilidad clásicas de la energía para los átomos H(1s) y H(2s) obtenidas con las distribuciones $f_{\gamma}(E)$.

Figura 7: Densidades de probabilidad de la posición para el átomo He(1s²). Se presentan la densidad cuántica y las densidades clásicas que provienen de un conjunto microcanónico y la utilización de U_{mod} o U_{ef}

Figura 8: Densidades de probabilidad del impulso para el átomo He(1s²). Se presentan la densidad cuántica y las densidades clásicas que provienen de un conjunto microcanónico y la utilización de U_{mod} o U_{ef}

Figura 9: Sección eficaz total de ionización de H(1s) por impacto de iones desnudos de carga Z_p , como una función de la energía del proyectil.

a) Resultados teóricos

----- : CTMCR. ————— : CTMCM.

b) Datos experimentales para $Z_p=1/2$:

○ : [102]. ● : [103]

c) Datos experimentales para $Z_p=1$:

○ : [104]. △ : [105]. □ : [106]. ● : [107]

d) Datos experimentales para $Z_p=2$:

● : [107]

e) Datos experimentales para $Z_p=3$:

● : [108]

f) Datos experimentales para $Z_p=6$:

● : [109] ○ : [110] (resultados para H_2
reducidos a H mediante un factor 0.5))

Figura 10: Sección eficaz total de ionización de H(1s) como una función de la carga del proyectil Z_p , para cuatro energías de colisión. Los datos experimentales son interpolaciones de los presentados en la figura 9.

Resultados teóricos

————— : CTMCM. B1. ----- : BE
X MSI [63]. ■ ACC [42]

Figura 11: Sección eficaz total de ionización de H(1s) por impacto de protones como una función de la energía del proyectil.

Datos experimentales

○ : [104]. ● : [107]

Figura 12: Sección eficaz total de captura desde H(1s) por impacto de iones desnudos de carga Z_p .

a) Resultados teóricos

————— : CTMCR. - - - - - CTMCM

b) Datos experimentales para $Z_p=1/2$:

● : [111]. ○ : [112]. Δ : [103]

c) Datos experimentales para $Z_p=1$:

X : [113]. ● : [114]. ○ : [115]

Δ : [105, 116]

d) Datos experimentales para $Z_p=2$:

Δ : [117]. ○ : [118]. ● : [24]

e) Datos experimentales para $Z_p=3$:

● : [119]. ○ : [120]

f) Datos experimentales para $Z_p=6$:

● : [121]. ○ : [122]. Δ : [123]

Figura 13: Sección eficaz total de captura desde H(1s) como función de la carga del proyectil Z_p , para cuatro energías de colisión. Los datos experimentales para $Z_p < 10$ se obtuvieron interpolando los de la figura 12. Resultados teóricos:

———— : CTMCR. \blacksquare : ACC [42]

Datos experimentales para $Z_p = 10$

X : [122]

Figura 14: Sección eficaz total de captura desde H(2s) por impacto de protones.

Experimentos para $H^+ + Li$

\bigcirc : [124,125]. \bullet : [126].

Teorías:

---- : CTMCM. ——— : CTMCR
 : MCC [127]. Δ , - - - - : ACC [73]
 - - - - : EIK [90]. - - - - : OBK [90]

Figura 15: Sección eficaz total de captura desde H(2s) por impacto de H^+ , He^{2+} , Li^{3+} y C^{6+} como una función de la energía del proyectil. Los números en la figura indican la carga Z_p del proyectil.

Teorías:

MCC ($Z_p=2$, [75]. $Z_p=1$, [127])
 -·-·-·-·-: L-Z ($Z_p=2$, [75]. $Z_p=3$, [129]. $Z_p=6$, [130])
 - - - - : CTMCM. - - - - : CTMCR
 -·-·-·-·-: ACC [73]. -·-·-·-·-: EIK [90]

Figura 16: Sección eficaz de excitación por electrón para la colisión de un ion $Fe^{24+}(1s^2)$ de 400MeV que incide sobre varios blancos de carga Z_p .

Experimentos:

○, ■ [131,132]

Teorías:

-·-·-·-·-: SCHW [131,132]

- - - - : SE.

B1

Figura 17: Sección eficaz diferencial en la energía de los electrones emitidos para los sistemas $X^{Z_r+} + H$. Las secciones eficaces están en coordenadas de laboratorio. Las líneas sólidas y quebradas son incluidas para guiar la vista.

Experimentos:

● : [136] (resultados para H_2 reducidos a H mediante un factor 0.5)

Teorías:

○, Δ CTMCM. B1. — — — — : BE

Figura 18: Sección eficaz diferencial en el ángulo de los electrones emitidos para los sistemas $X^{Z_r+} + H$. Las secciones eficaces están en coordenadas de laboratorio. Las líneas sólidas y quebradas son incluidas para guiar la vista.

Experimentos:

● : [136] (resultados para H_2 reducidos a H mediante un factor 0.5)

Teorías:

○, Δ CTMCM. B1

Figura 19: Cociente entre los resultados de las figuras 17 y 18 y los que se obtendrían utilizando una ley de escala Z_p^2

Figura 20: Probabilidades de ionización de H(1s) por impacto de iones multicargados de carga Z_p y $v_p=5$ a.u.

Teorías:

○:CTMCM

Figura 21: Probabilidades de captura y ionización de H(1s) por impacto de iones multicargados de carga Z_p y $v_p=2$ a.u.

Teorías:

○:CTMCM(ionización). ● : CTMCM(captura)

Figura 22: Sección eficaz diferencial $d\sigma/d\epsilon$ ($\epsilon \approx 0$) para excitación a estados de Rydberg de H(1s) por impacto de iones multicargados como función de la carga del proyectil. Los resultados se presentan para tres velocidades de impacto: $v_p=2, 5$ y 10 a.u.

Teorías:

● : CTMCM. ————— : SE
 ----- : B1. BE

Figura 23: Secciones eficaces totales de ionización simple σ_{si} , producción de electrones libres σ_{e^-} , captura simple σ_{sc} , y ionización doble σ_{di} para el sistema $H^+ + He$ como una función de la energía del proyectil.

Experimentos:

■ : [139]. ● : [140]

χ , Δ , □ , + y ○ : Rudd y Madison, Rudd y Jorgensen, Rudd, Sautter y Bailey, Toburen y Stolterfoht et al. respectivamente (obtenidos de [141])

Teorías:

———— : CTMCM con U_{mod} . - - - - - : CTMCM con U_{ef}

Figura 24: Secciones eficaces totales de ionización simple σ_{si} , captura simple σ_{sc} y producción de Li^{2+} $\sigma_{Li^{2+}}$ para el sistema $H^+ + Li^+$ como una función de la energía del proyectil.

Experimentos:

■ [143]

Teorías:

———— : CTMCM con U_{mod} . - - - - - : CTMCM con U_{ef}

Figura 25: Sección eficaz diferencial en la energía de los electrones emitidos para el sistema $H^+ + He$. Las energías del proyectil son 100 y 500keV y las secciones eficaces están en coordenadas de laboratorio.

Experimentos:

\times , Δ , \square , $+$ y \circ , Rudd y Madison,

Rudd y Jorgensen, Rudd, Sautter y Bailey y

Stolterfoht et al. respectivamente

(obtenidos de [141])

Teorías:

———— : CTMCM con U_{mod} .

----- : CTMCM con U_{ef}

Figura 26: Sección eficaz diferencial en el ángulo de los electrones emitidos para el sistema $H^+ + He$. Las energías del proyectil son 100 y 500keV y las secciones eficaces están en coordenadas de laboratorio.

Experimentos:

\times , Δ , \square , $+$ y \circ Rudd y Madison,

Rudd y Jorgensen, Rudd, Sautter y Bailey y

Stolterfoht et al. respectivamente

(obtenidos de [141])

Teorías:

———— : CTMCM con U_{mod}

----- : CTMCM con U_{ef}

Figura 27: Probabilidad de ionización por el parámetro de impacto b como una función de b para el sistema $H^+ + He$.

Teorías:

————: CTMCM con U_{mod} - - - - : CTMCM con U_{ef}

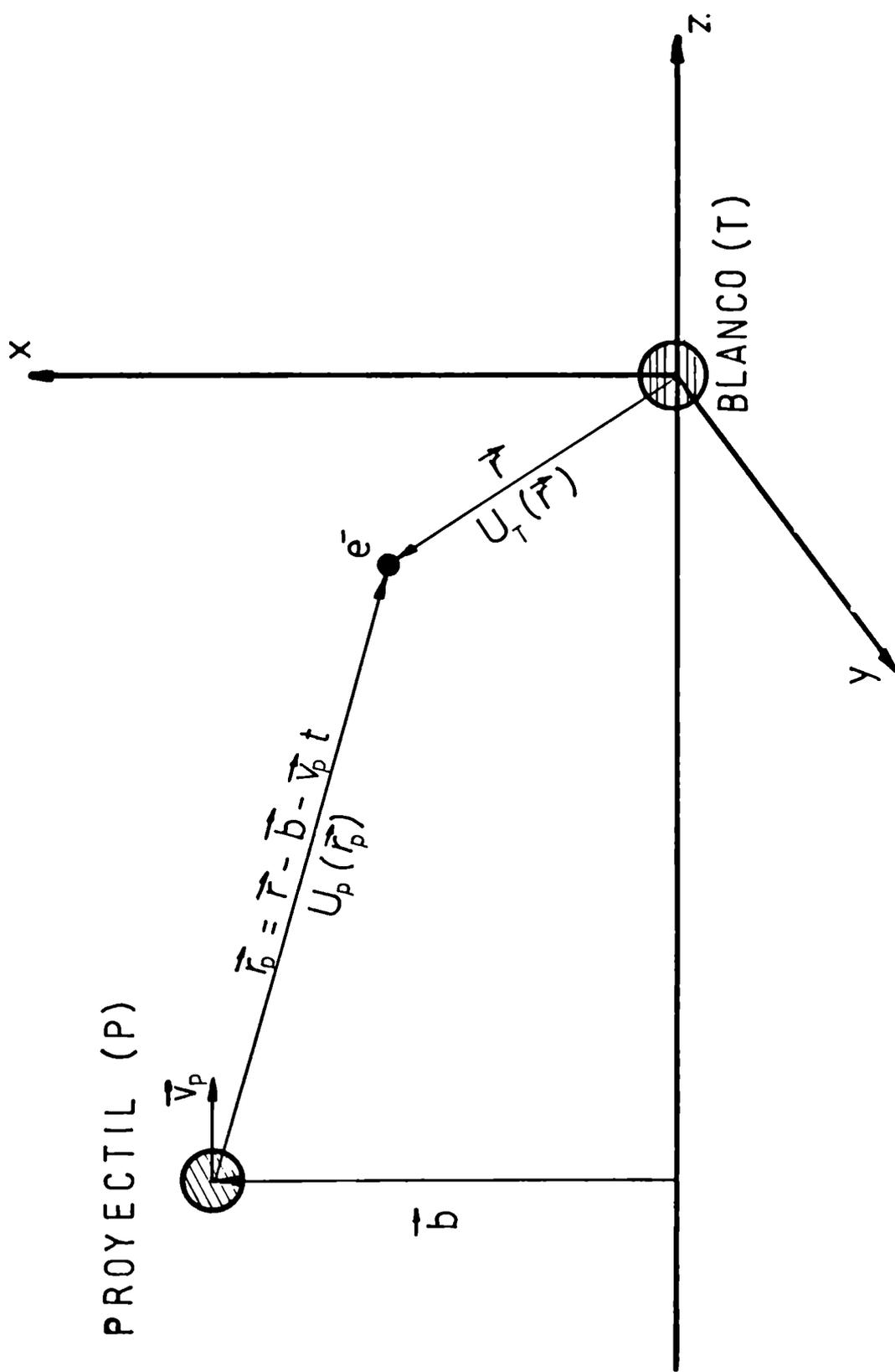


fig.1: SISTEMA COLISIONANTE

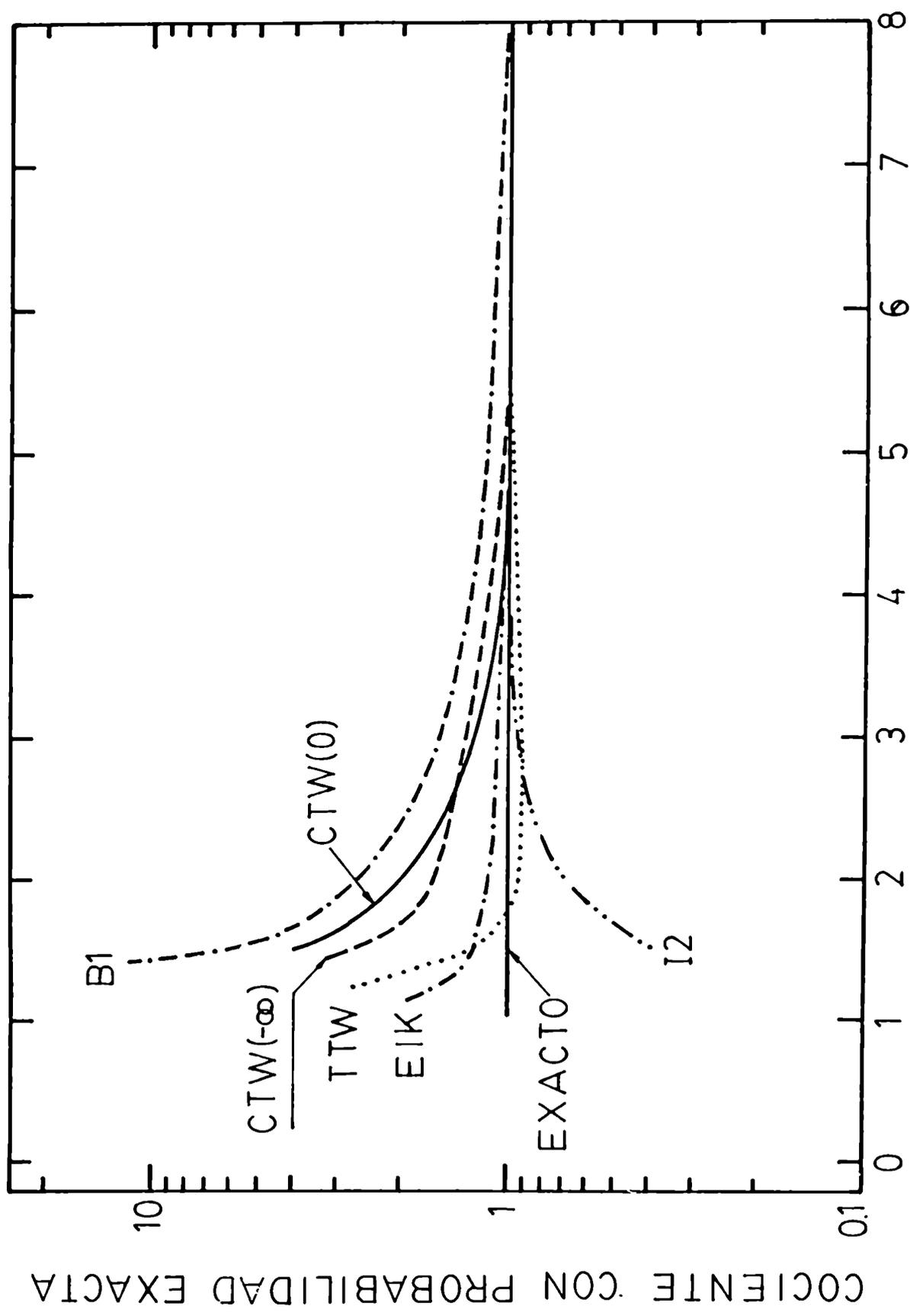


fig. 2 : excitación unidimensional

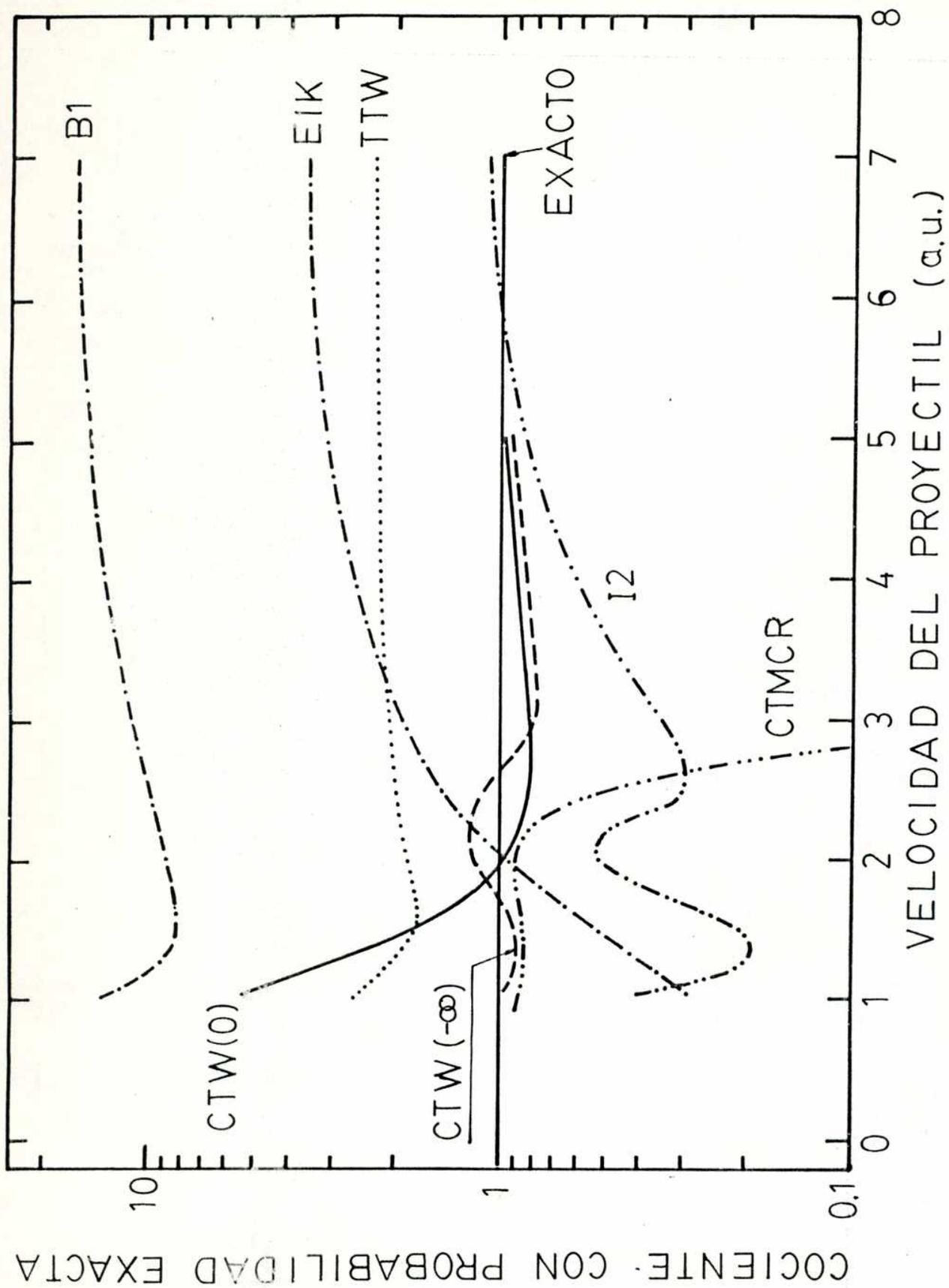


fig. 3 : captura unidimensional

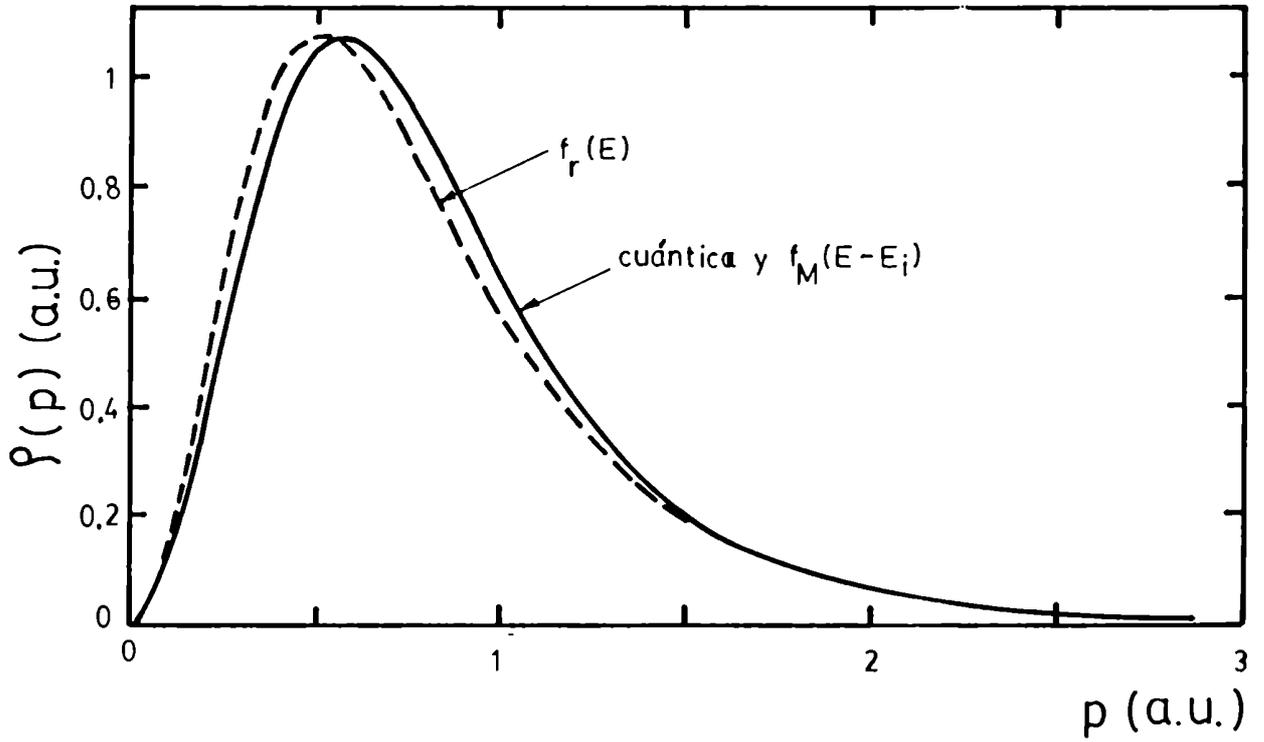
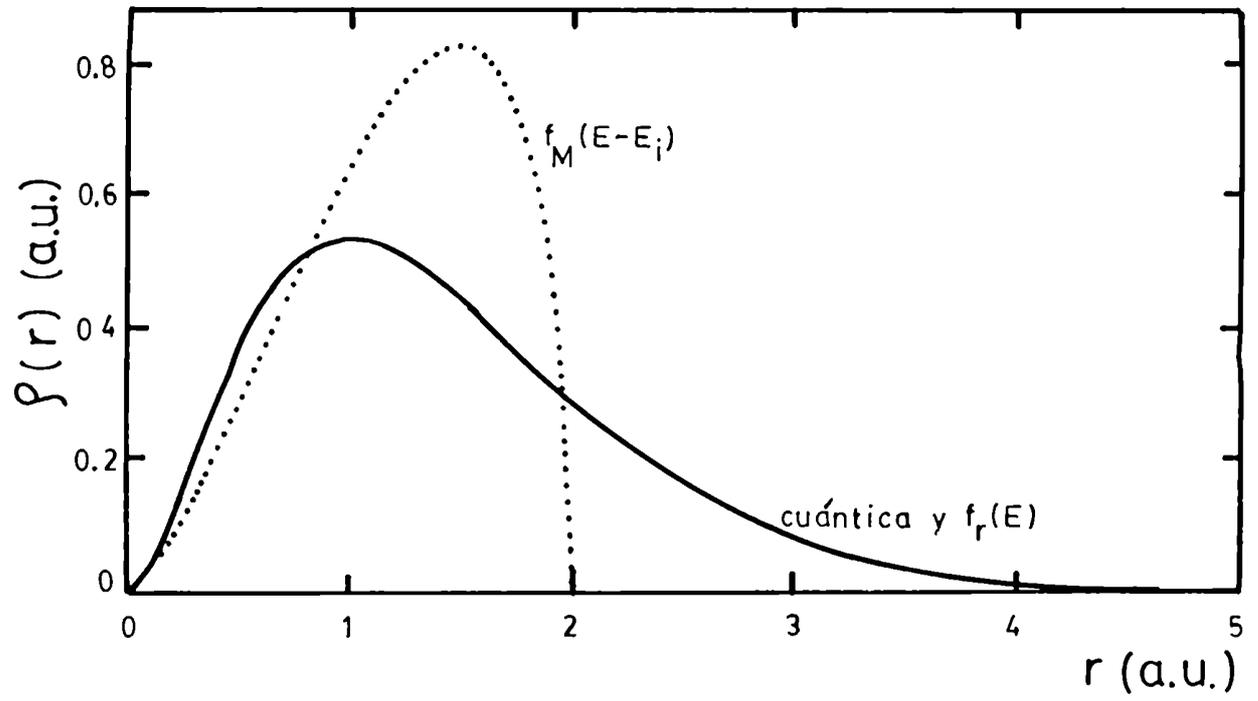


fig. 4 : H(1s)

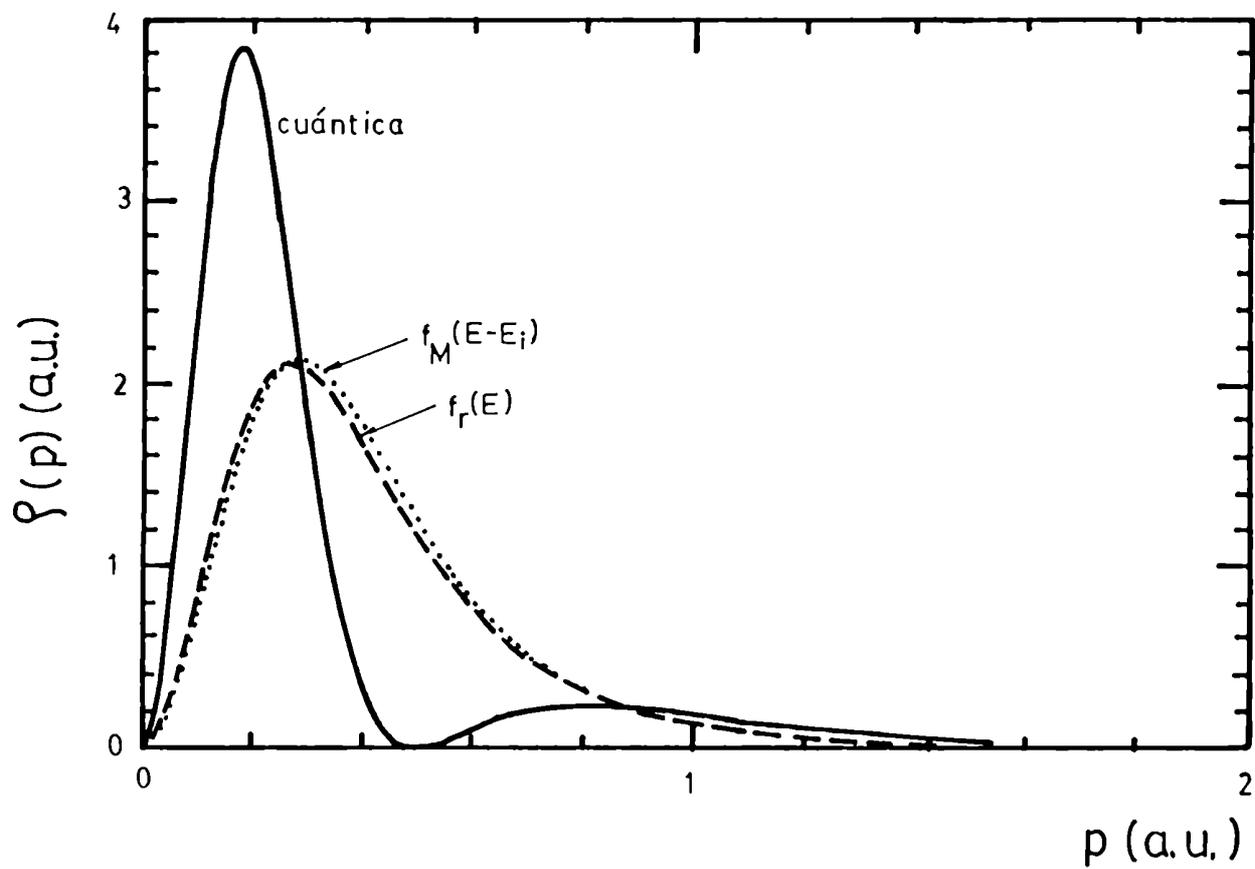
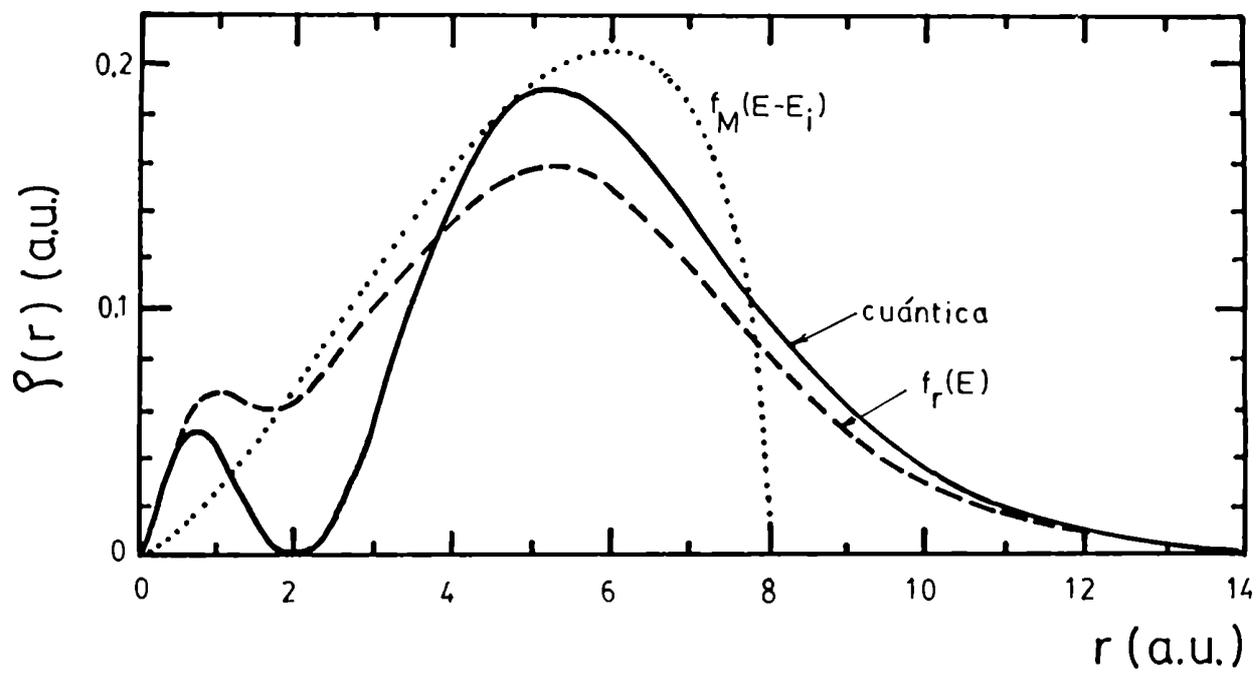


fig. 5 : H(2s)

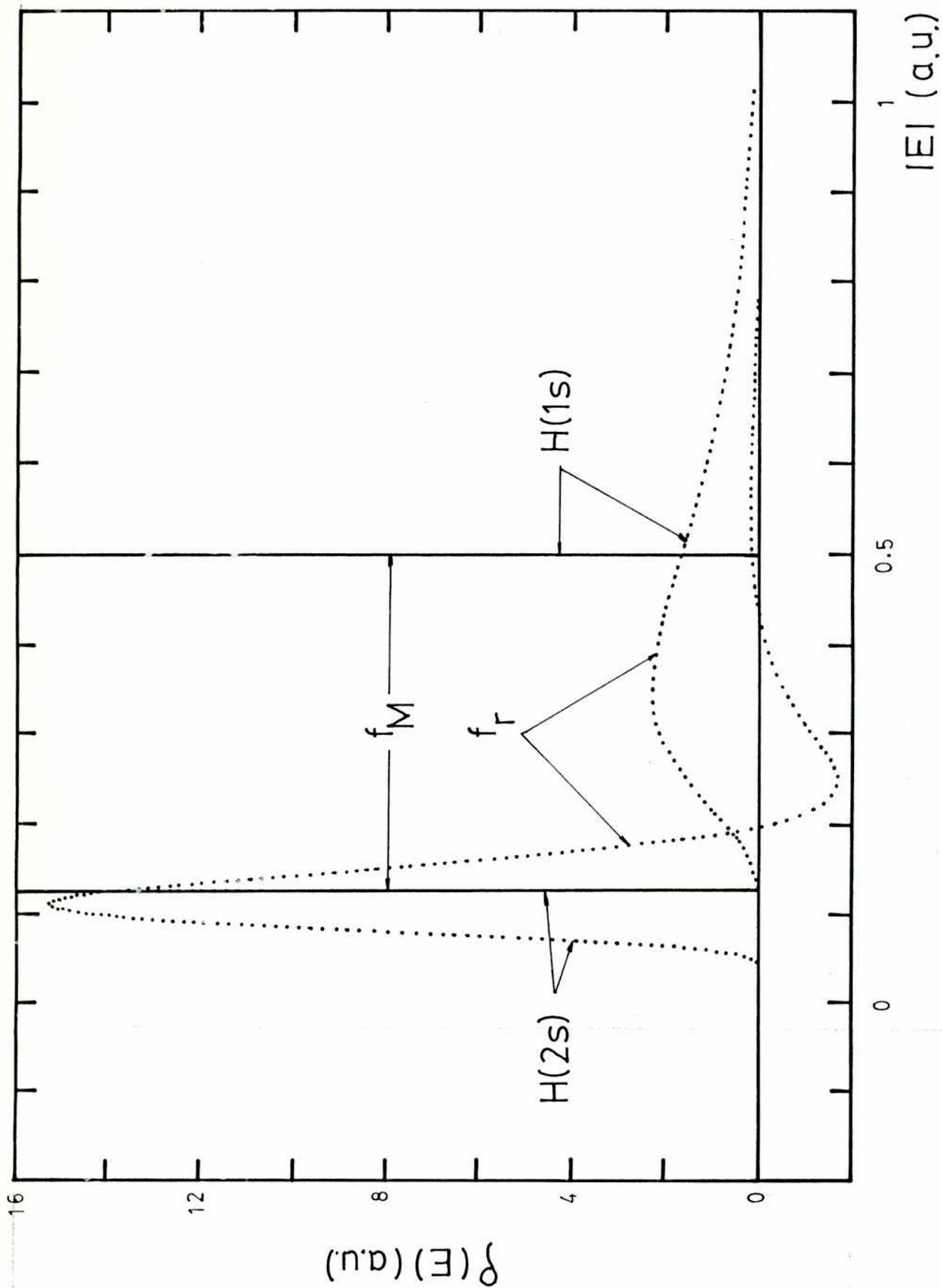


fig. 6

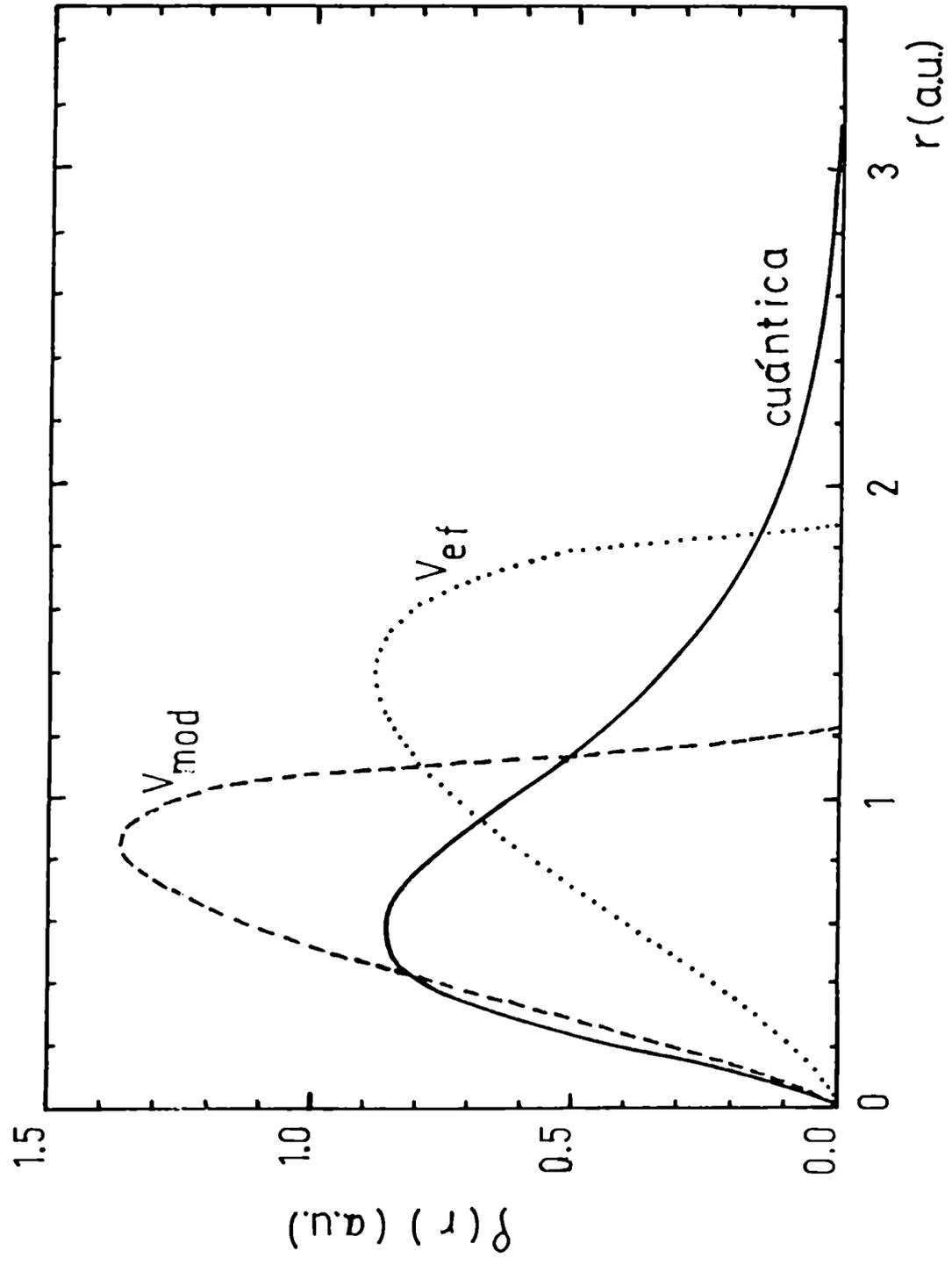


fig. 7 : He(1s²)

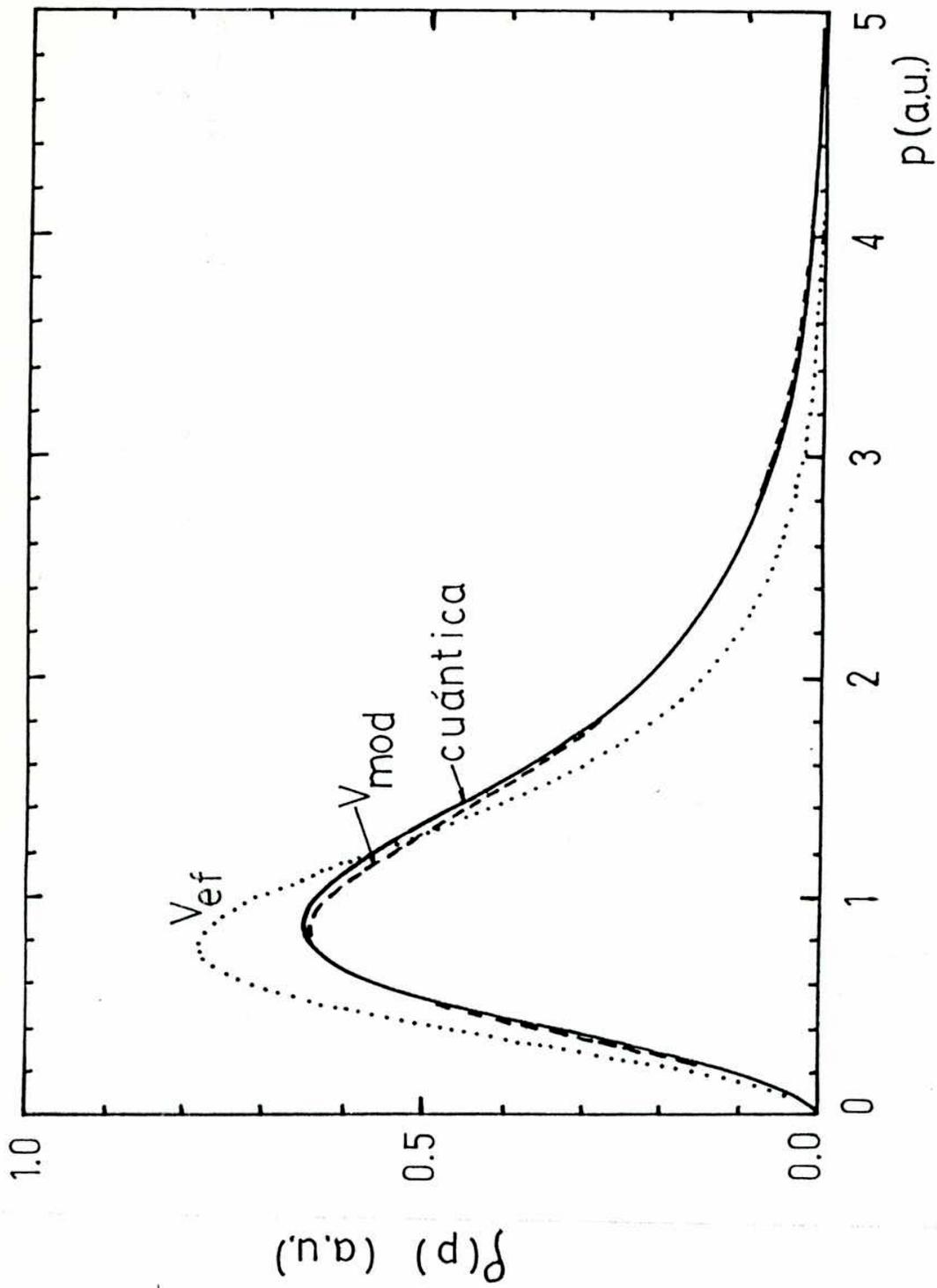


fig. 8: He(1s²)

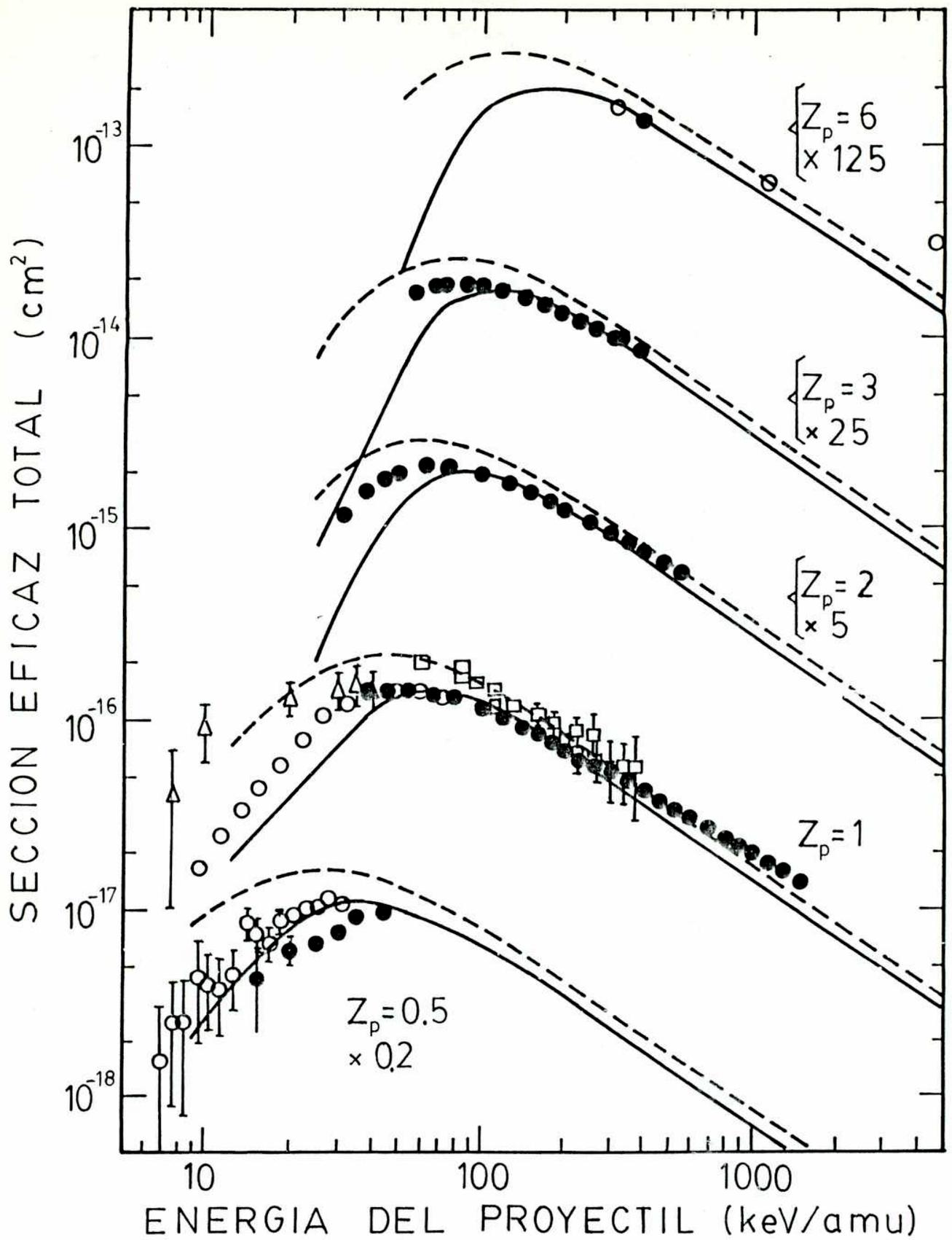


fig. 9 : $X^{Z_p^+} + H(1s) \longrightarrow X^{Z_p^+} + H^+ + e^-$

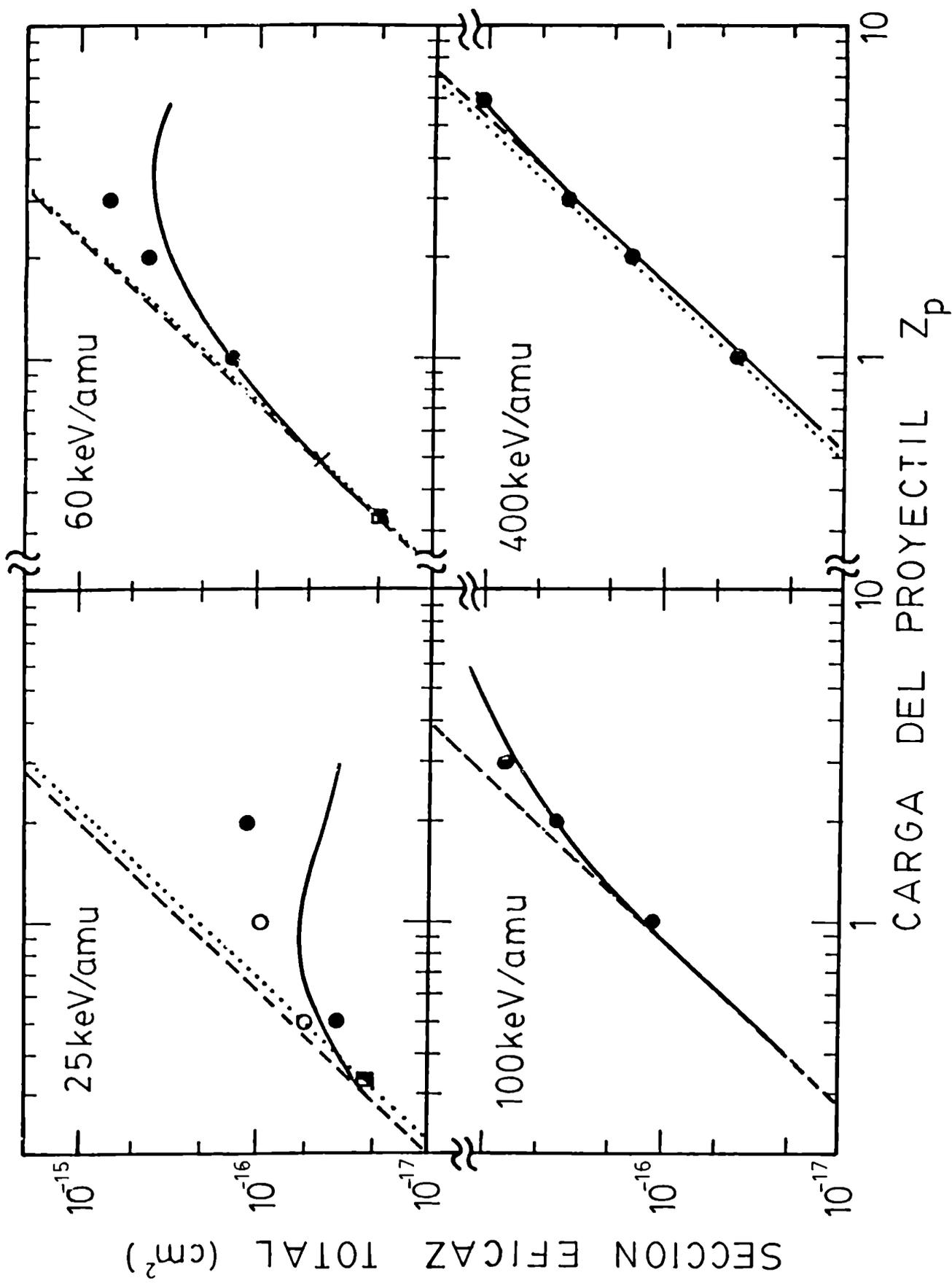
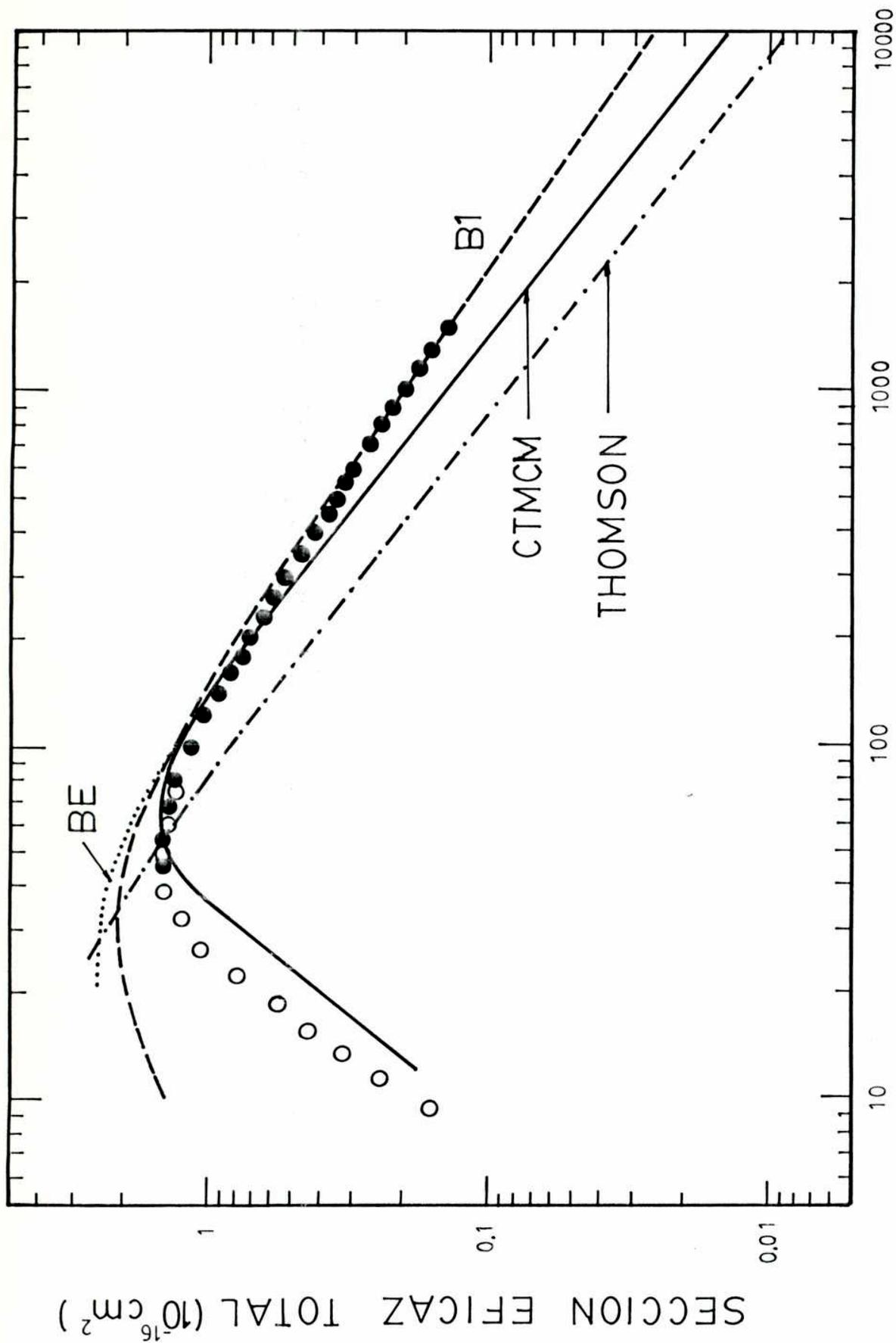


fig.10 : $X^{Z_p^+} + H(1s) \longrightarrow X^{Z_p^+} + H^+ + e^-$



ENERGIA DEL PROYECTIL (KeV)

fig.11 : $\text{H}^+ + \text{H}(1s) \rightarrow \text{H}^+ + \text{H}^+ + \text{e}^-$

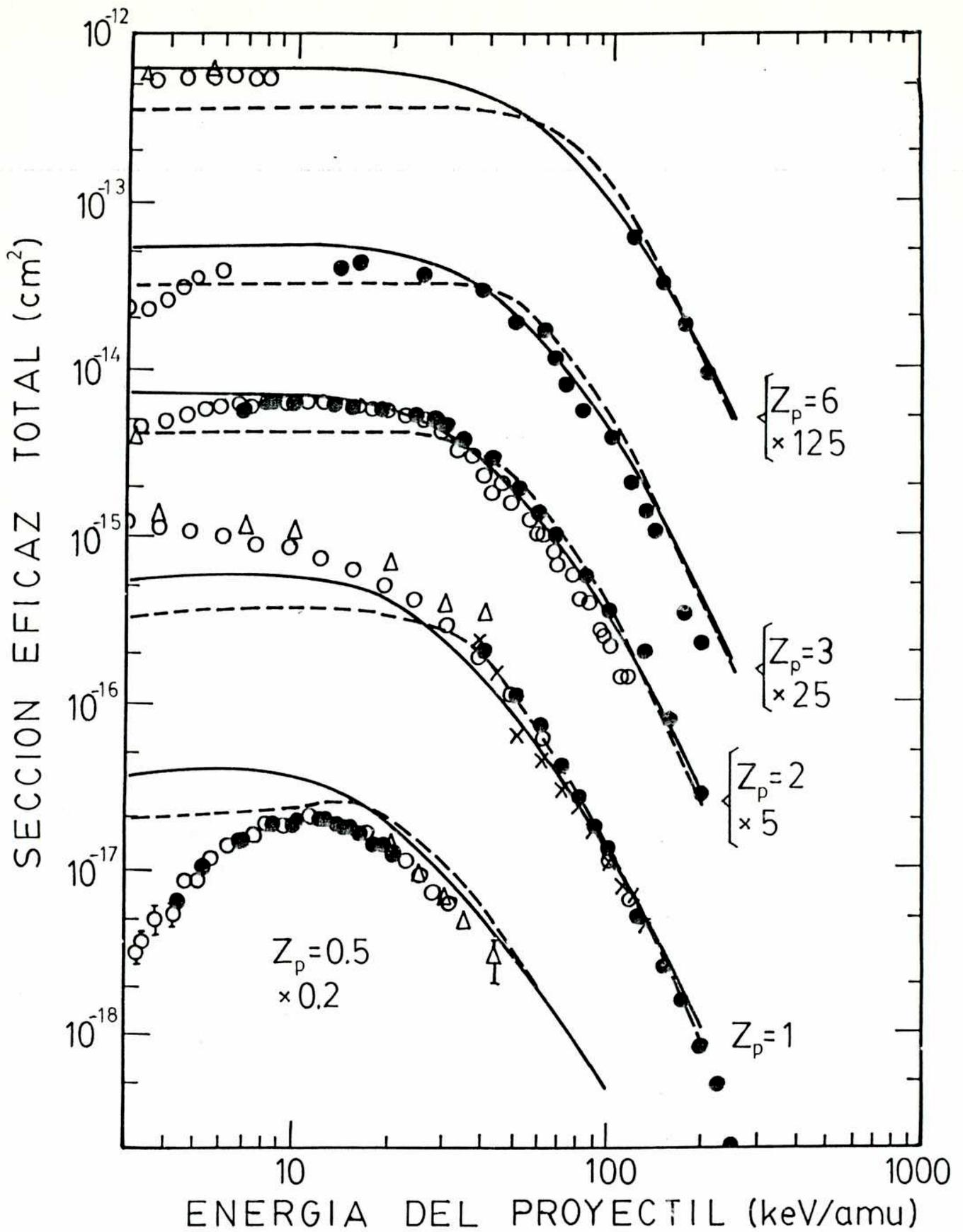


fig. 12 : $X^{Z_p^+} + H(1s) \longrightarrow X^{(Z_p-1)^+} + H^+$

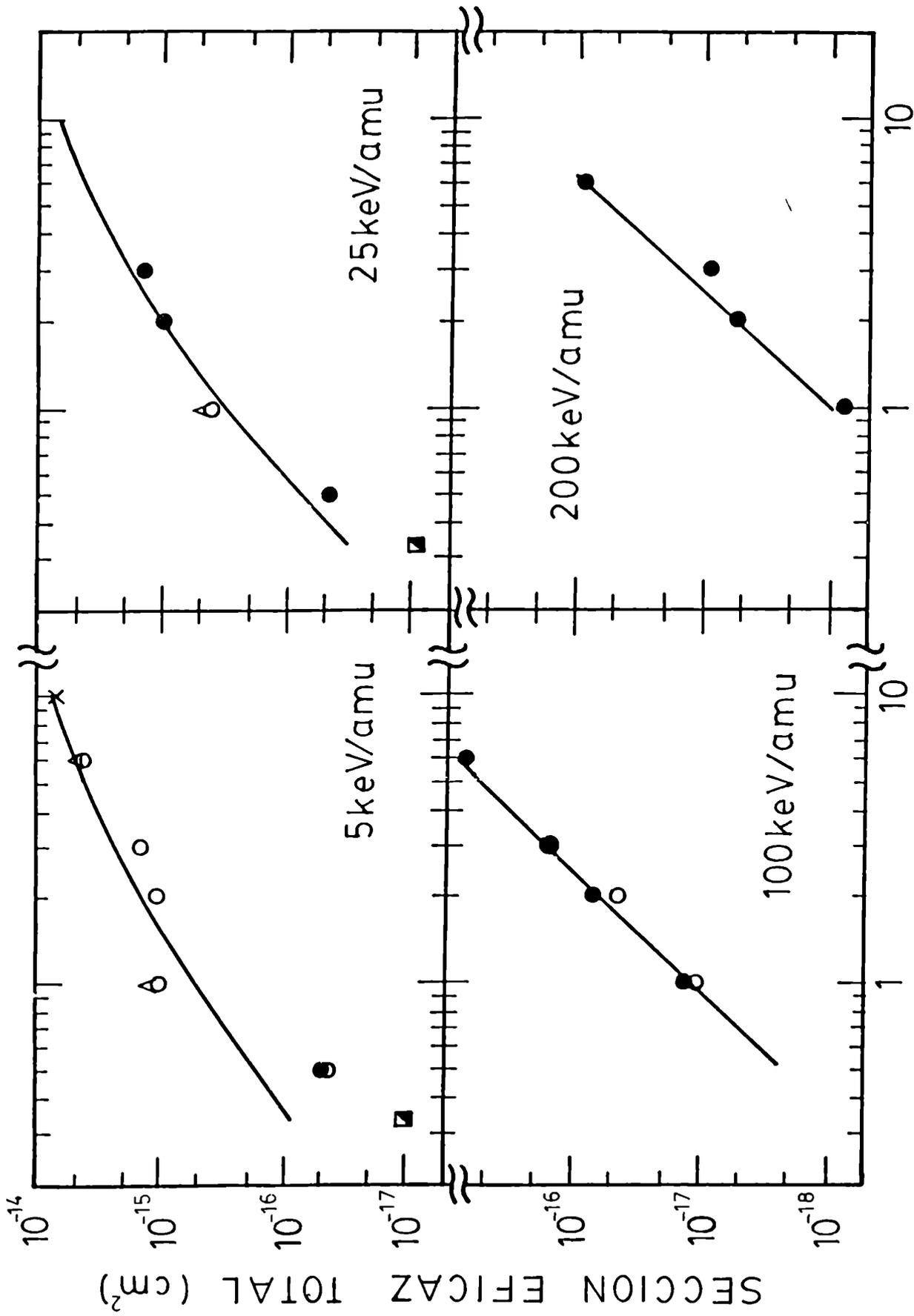
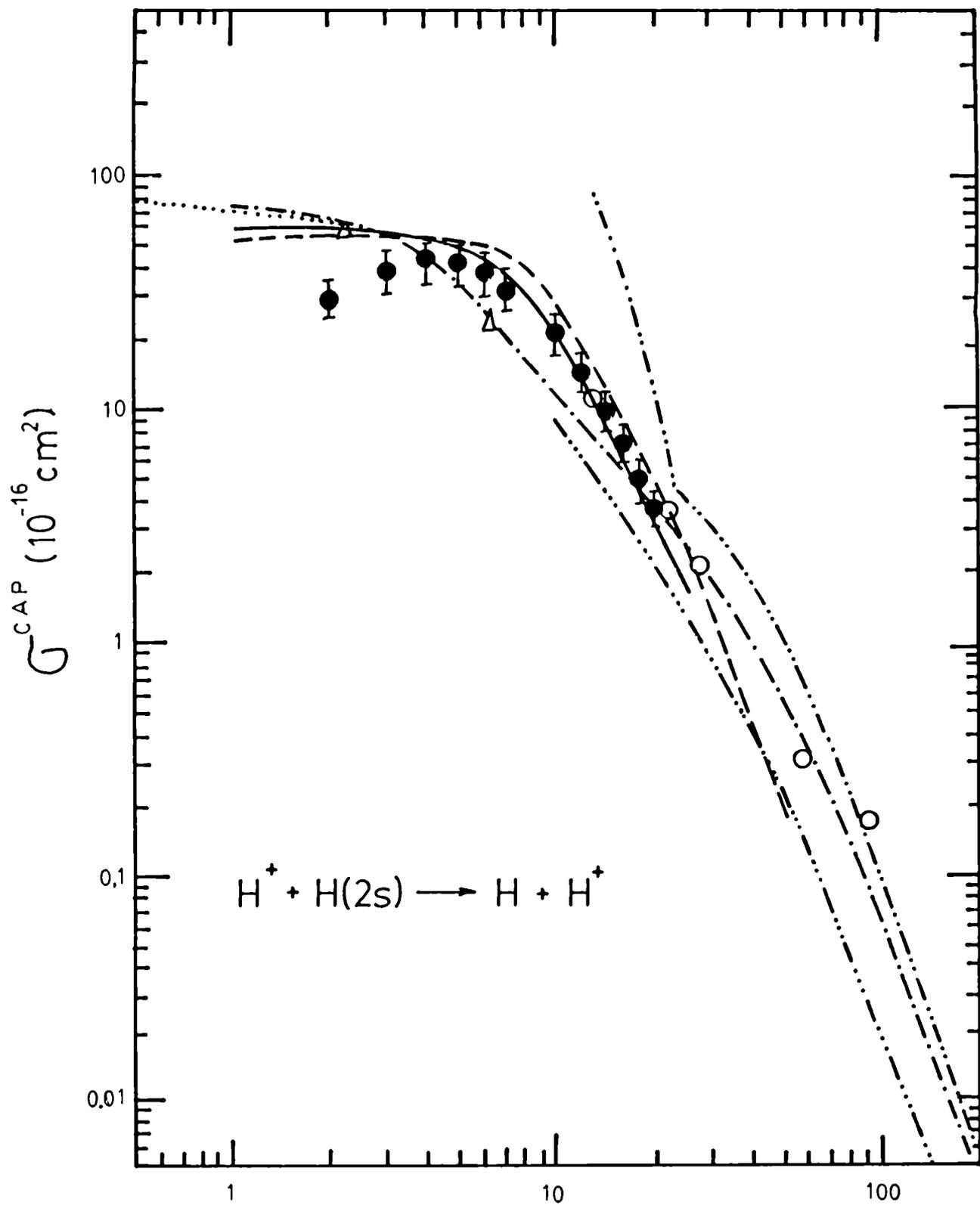


fig. 13 : $X^{Z_p^+} + H(1s) \longrightarrow X^{(Z_p-1)^+} + H^+$



ENERGIA DEL PROYECTIL (keV)

fig. 14

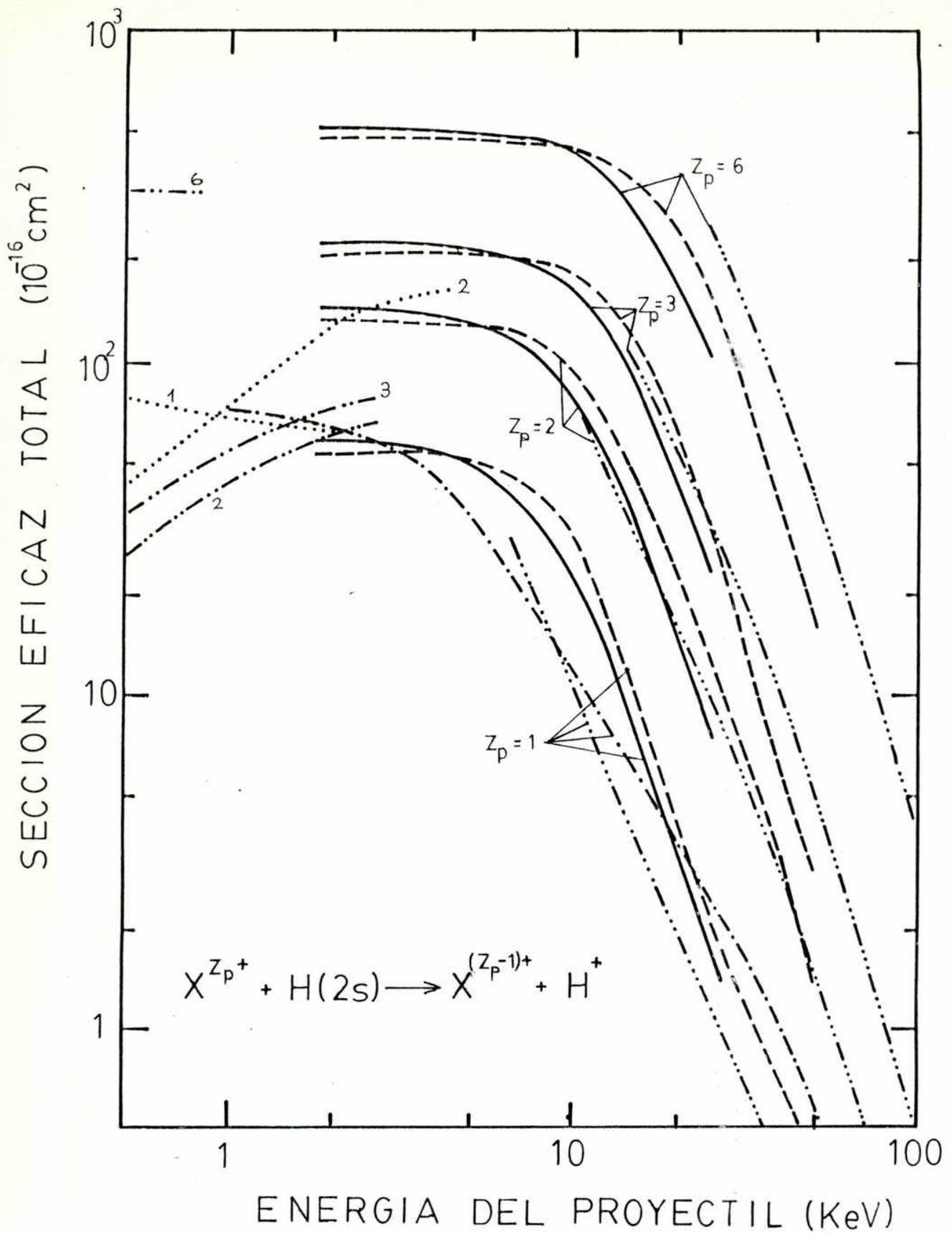


fig. 15

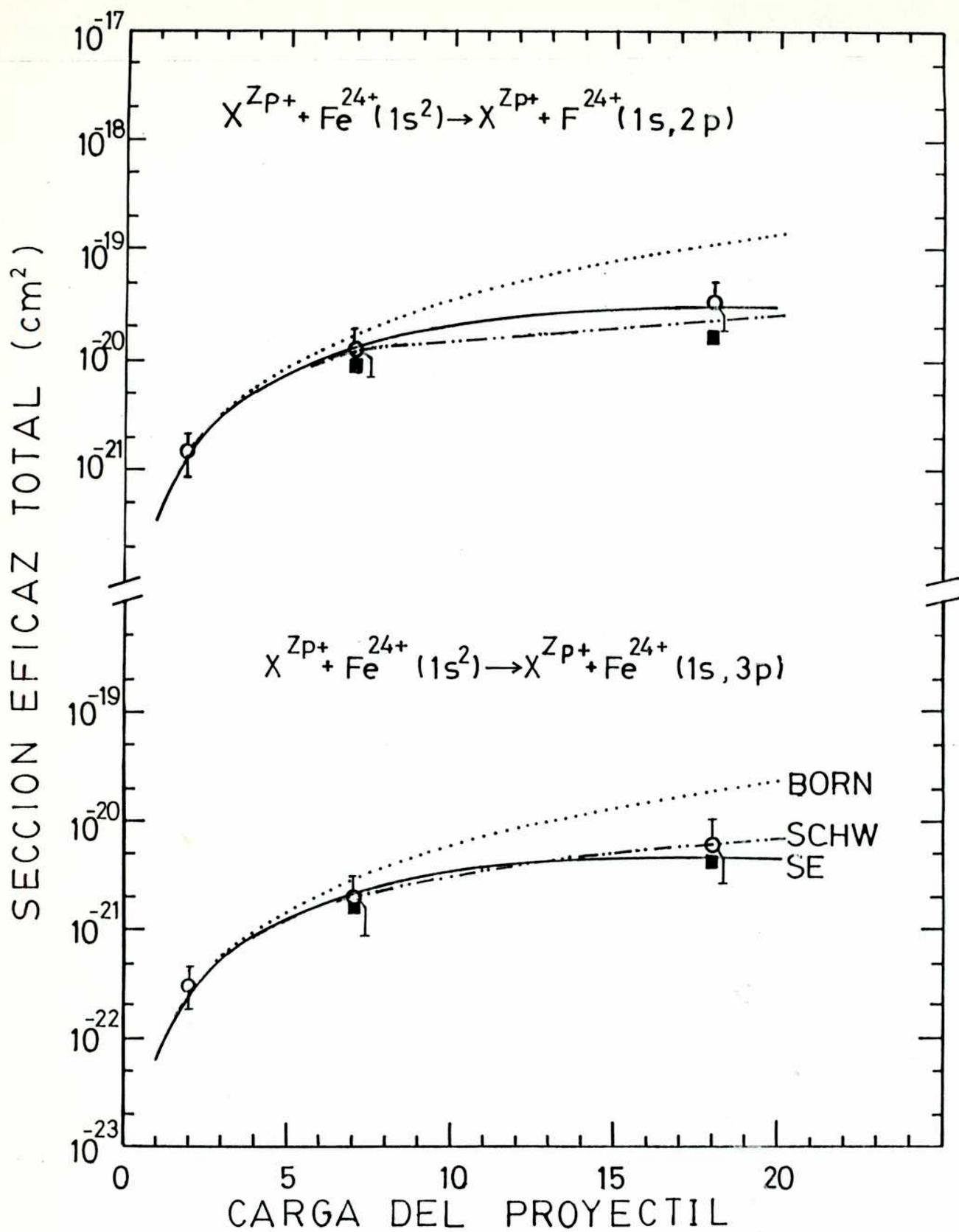


fig. 16

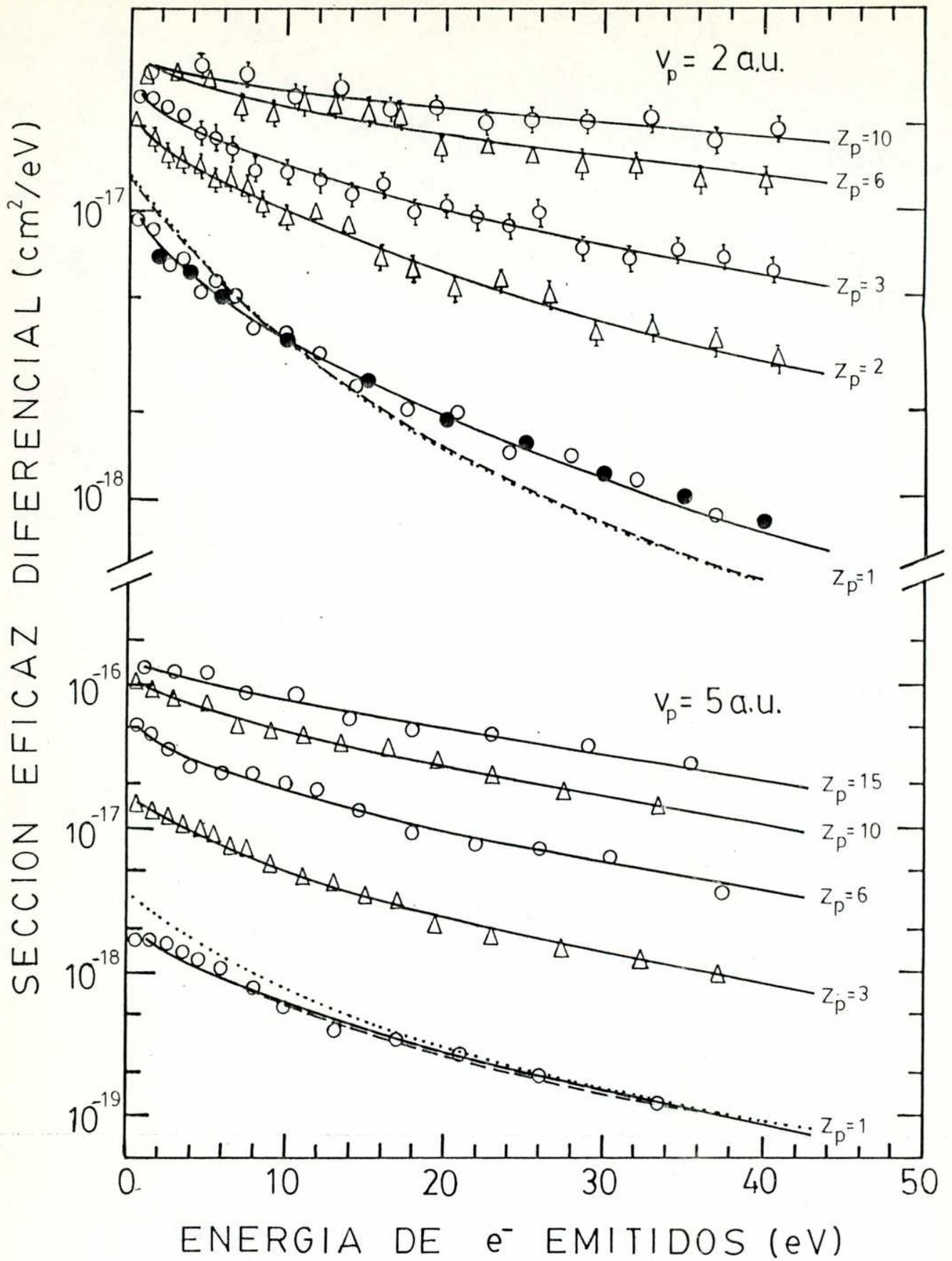


fig. 17 : $X^{Z_p+} + H(1s)$

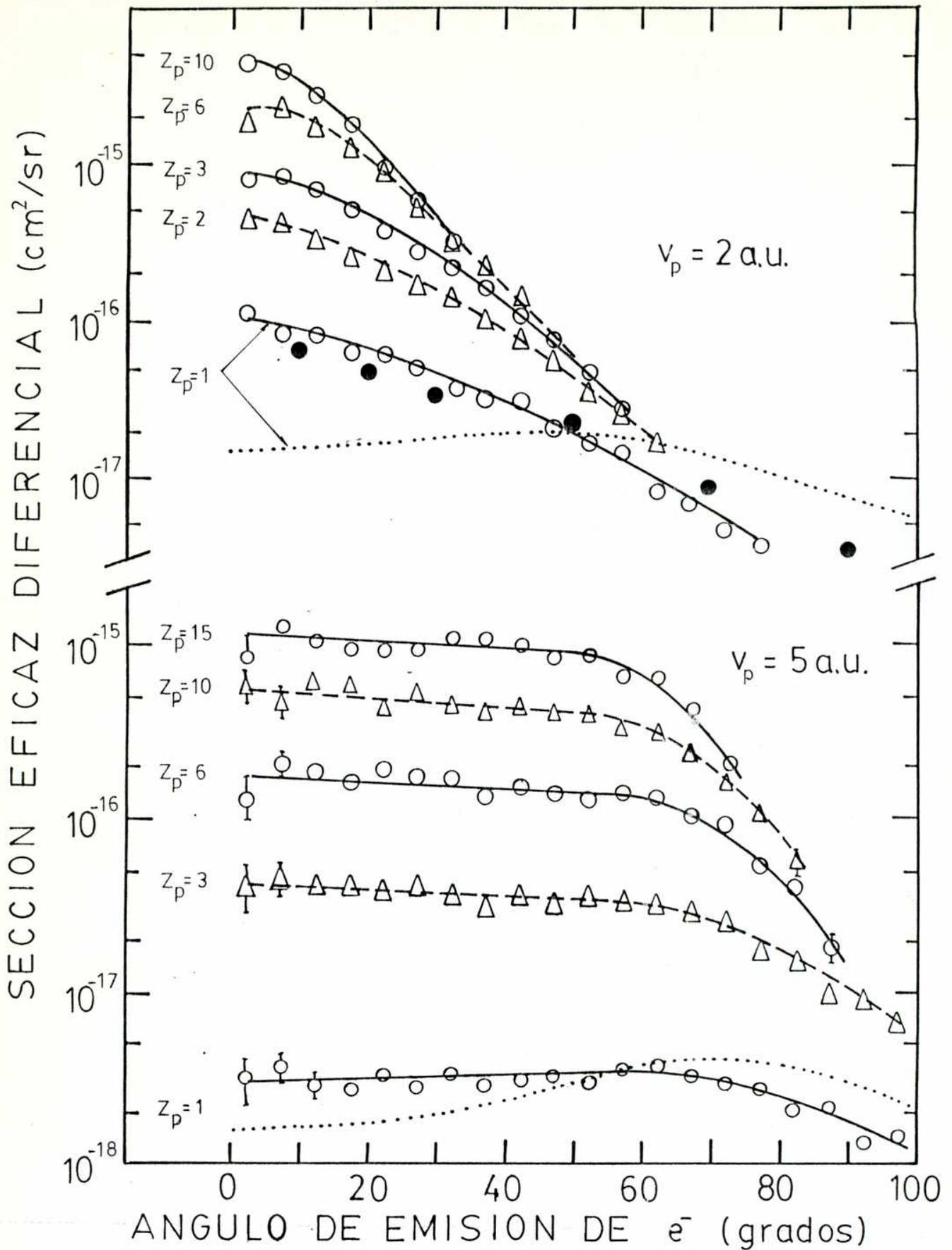


fig. 18: $X^{Z_p+} + H(1s)$

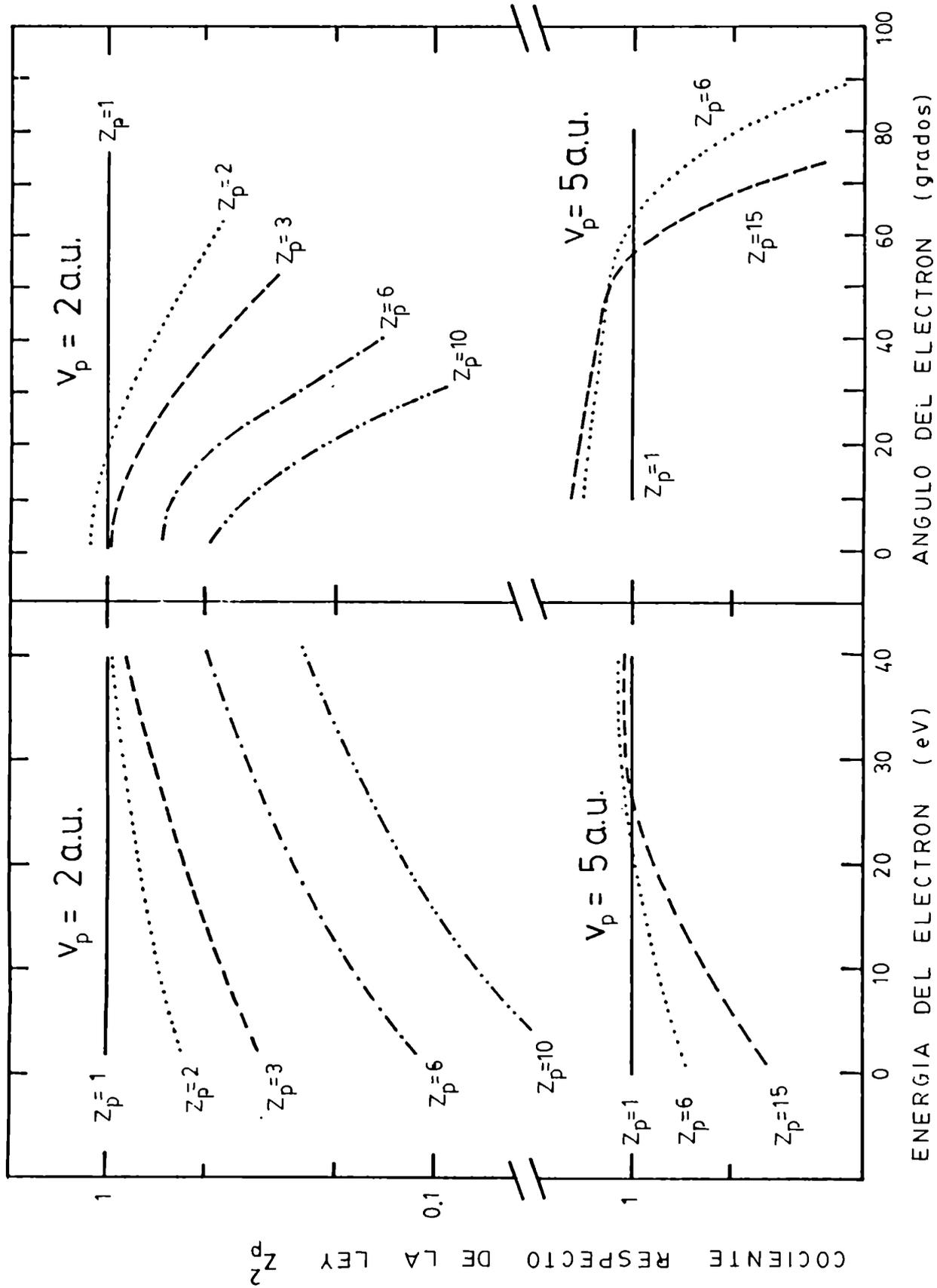


fig. 19 : $X^{Z_p^+} + H(1s)$

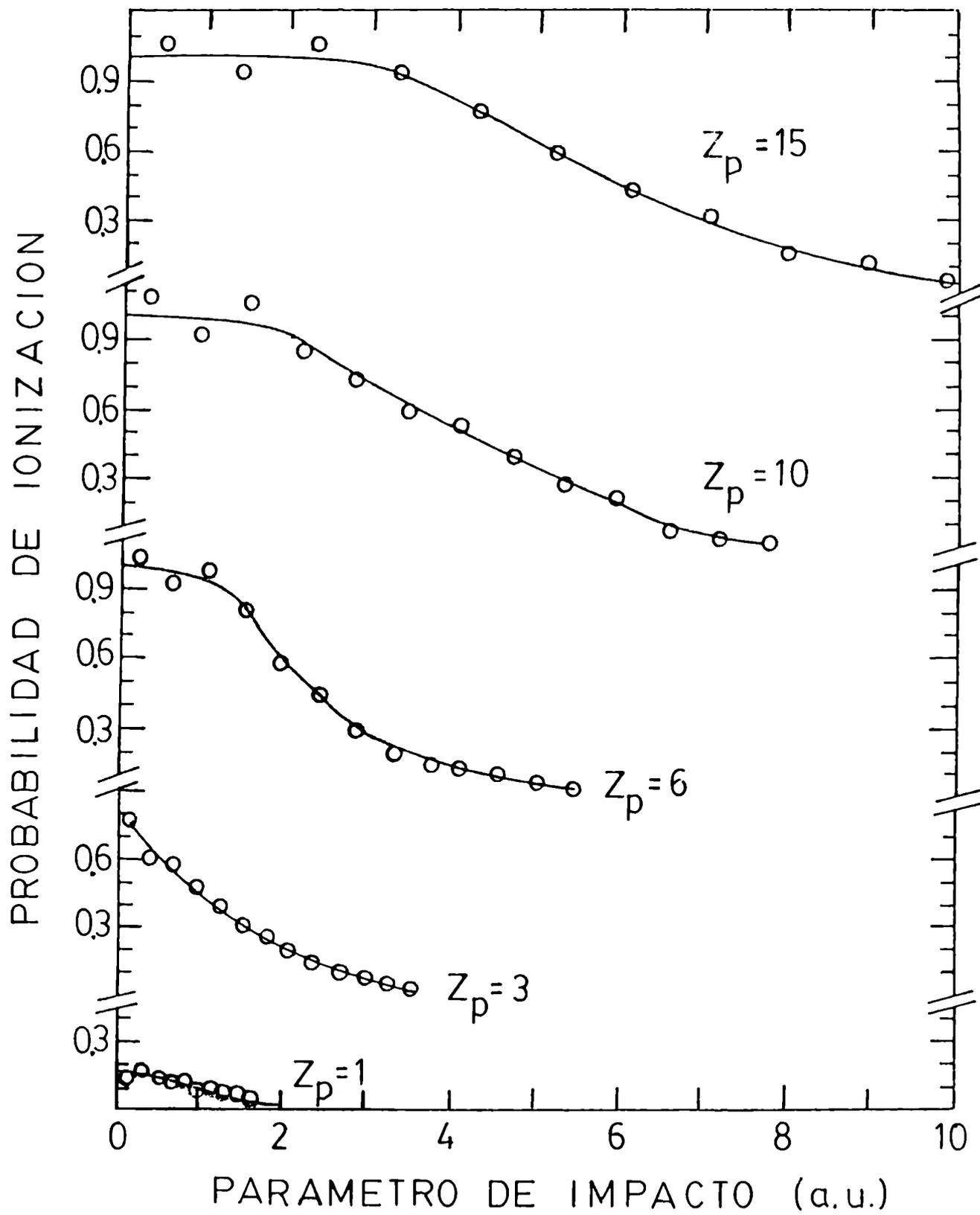


fig. 20: $X^{Z_p^+} + H(1s)$; $v_p = 5a.u.$

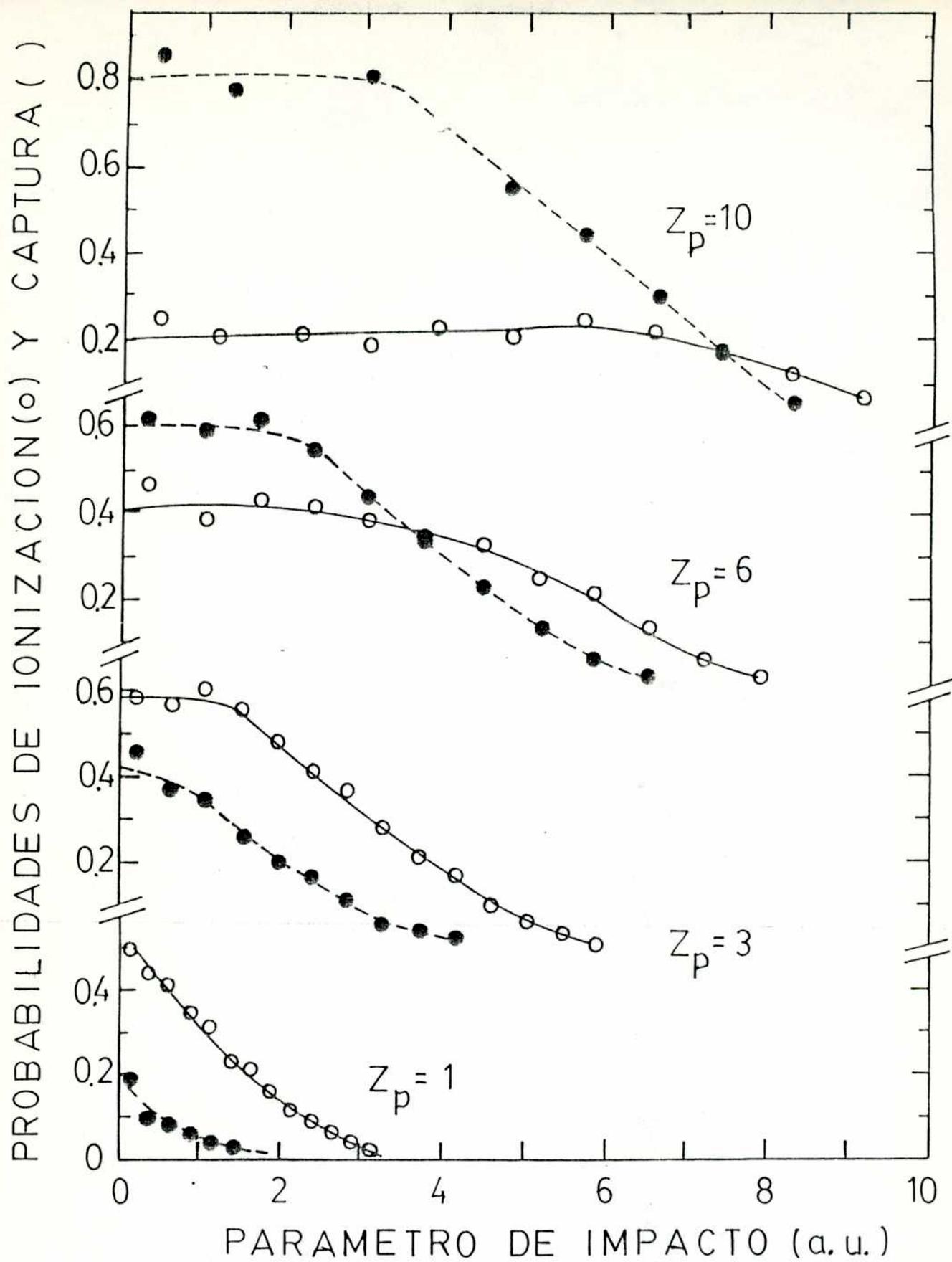


fig. 21: $X^{Z_p^+} + H(1s)$; $v_p = 2 \text{ a.u.}$

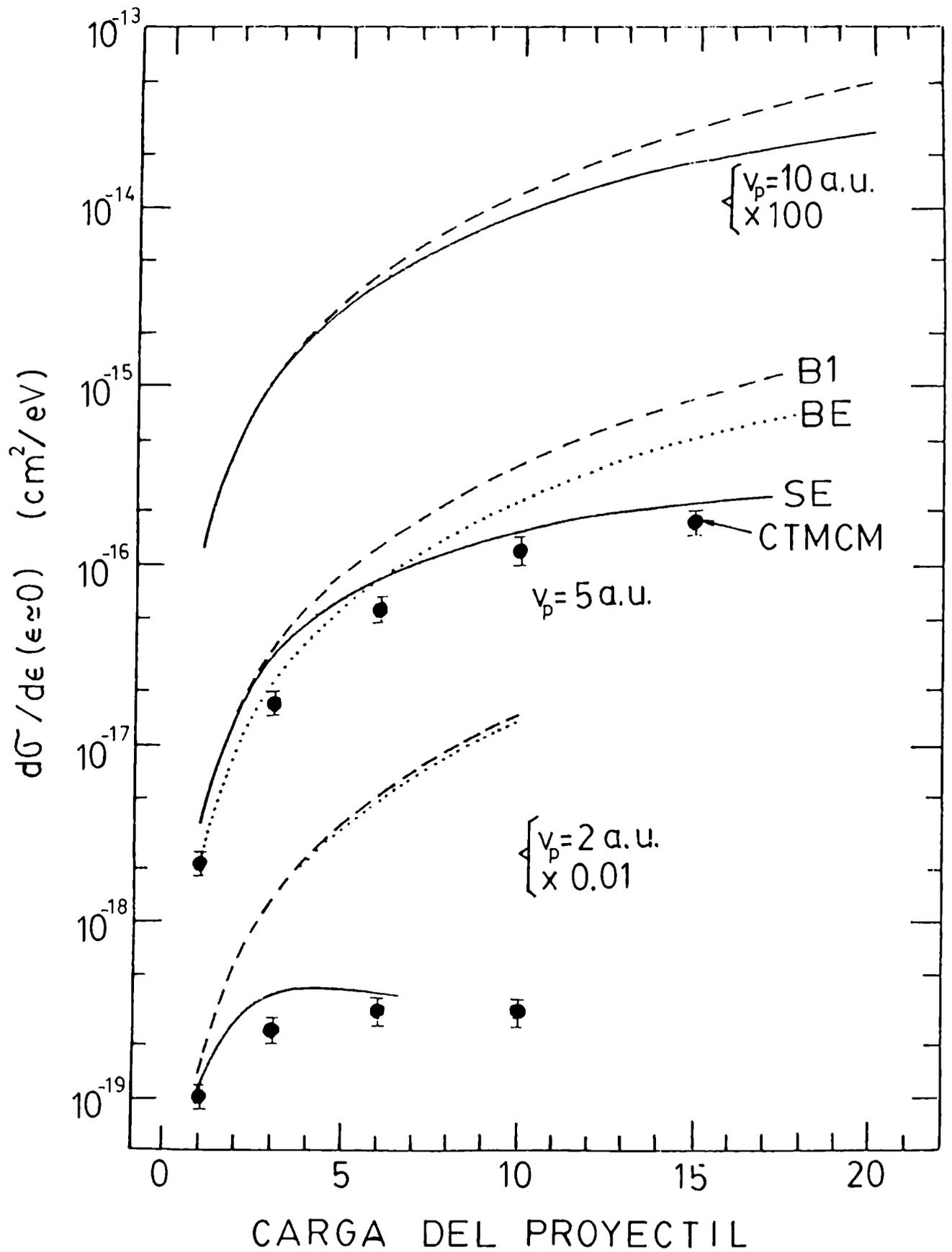


fig. 22: excitacion a Rydberg en $X^{Zp+} + H(1s)$

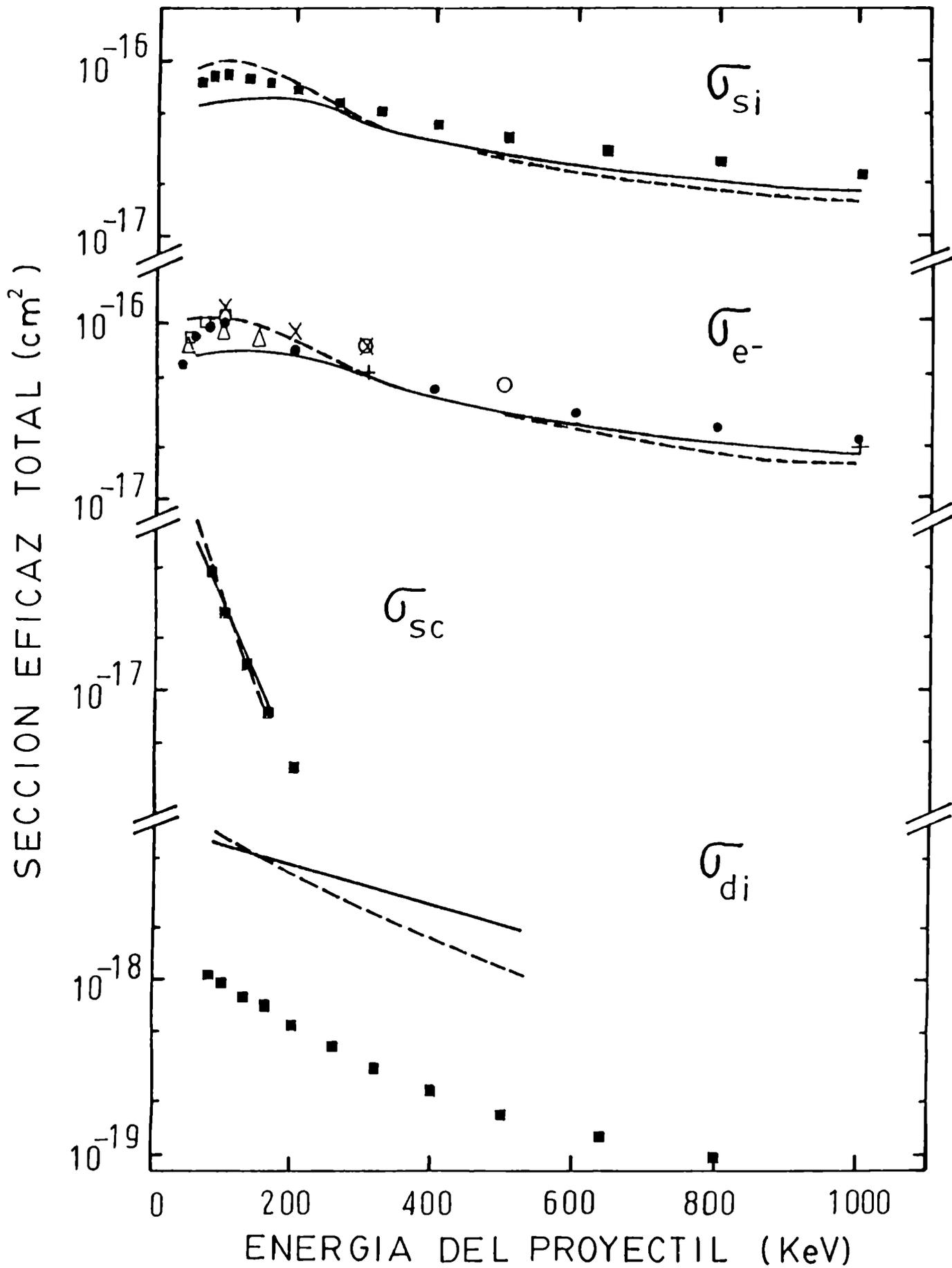


fig. 23: $H^+ + He$

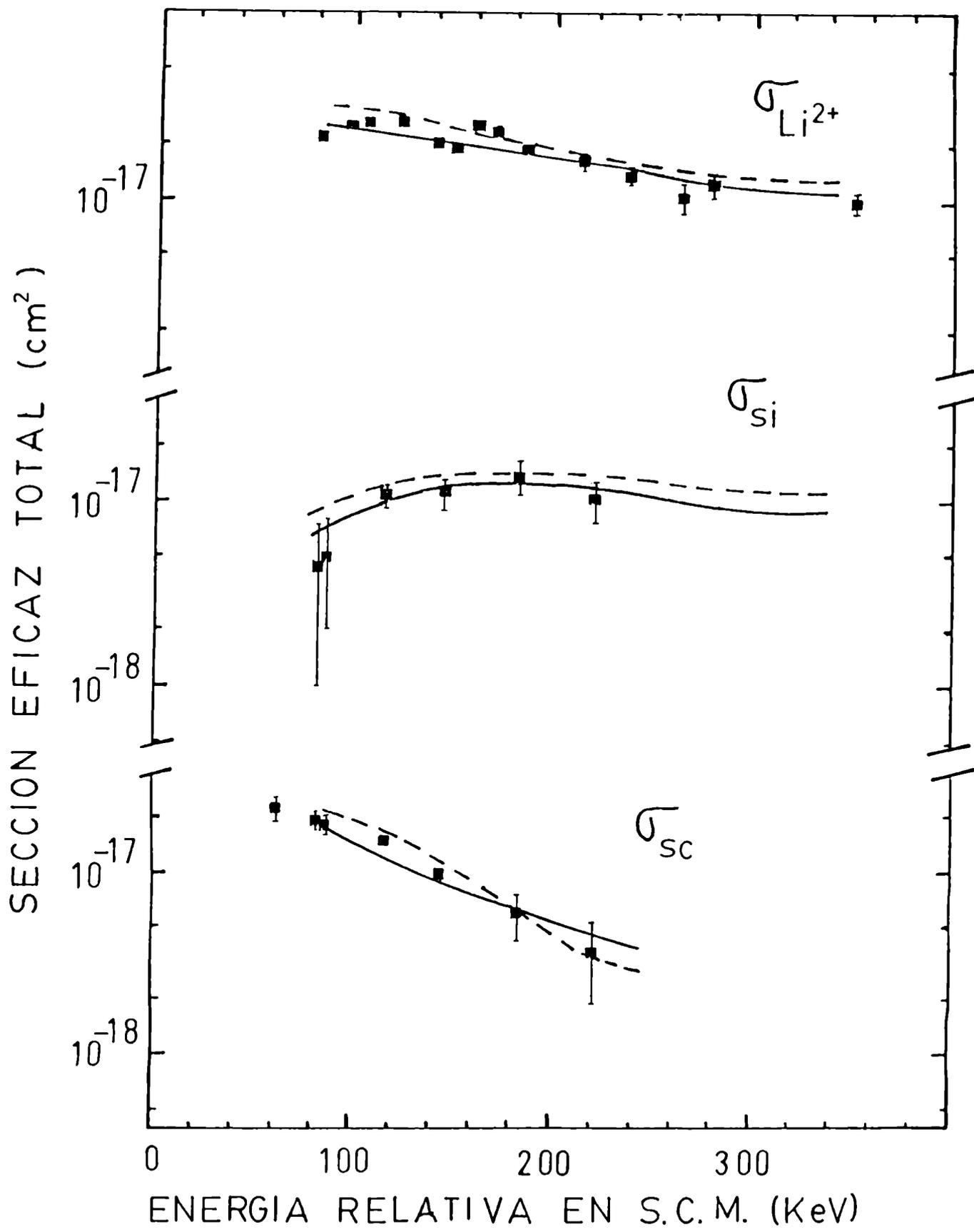


fig. 24 : $H^+ + Li^+$

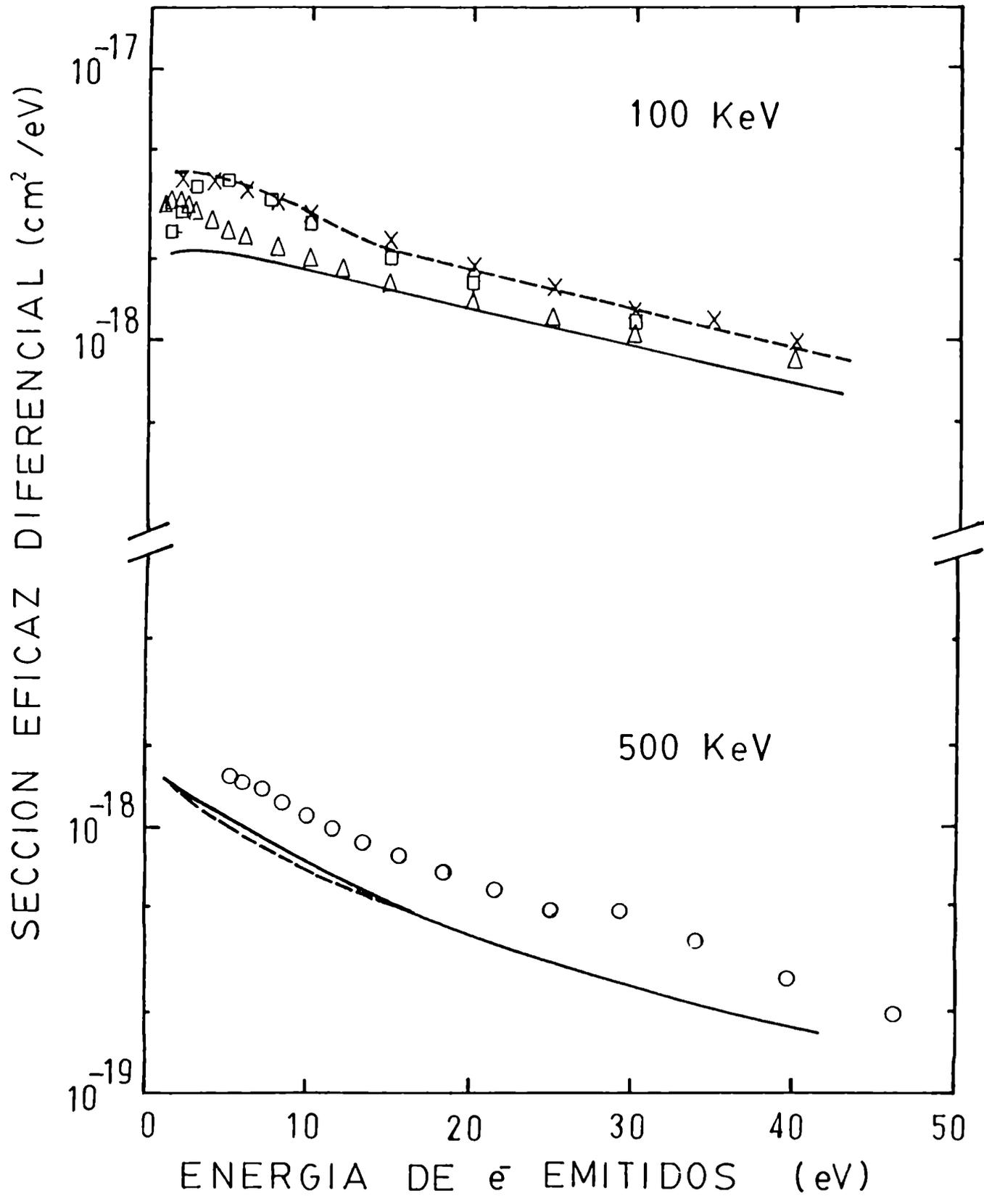


fig. 25 : H⁺ + He

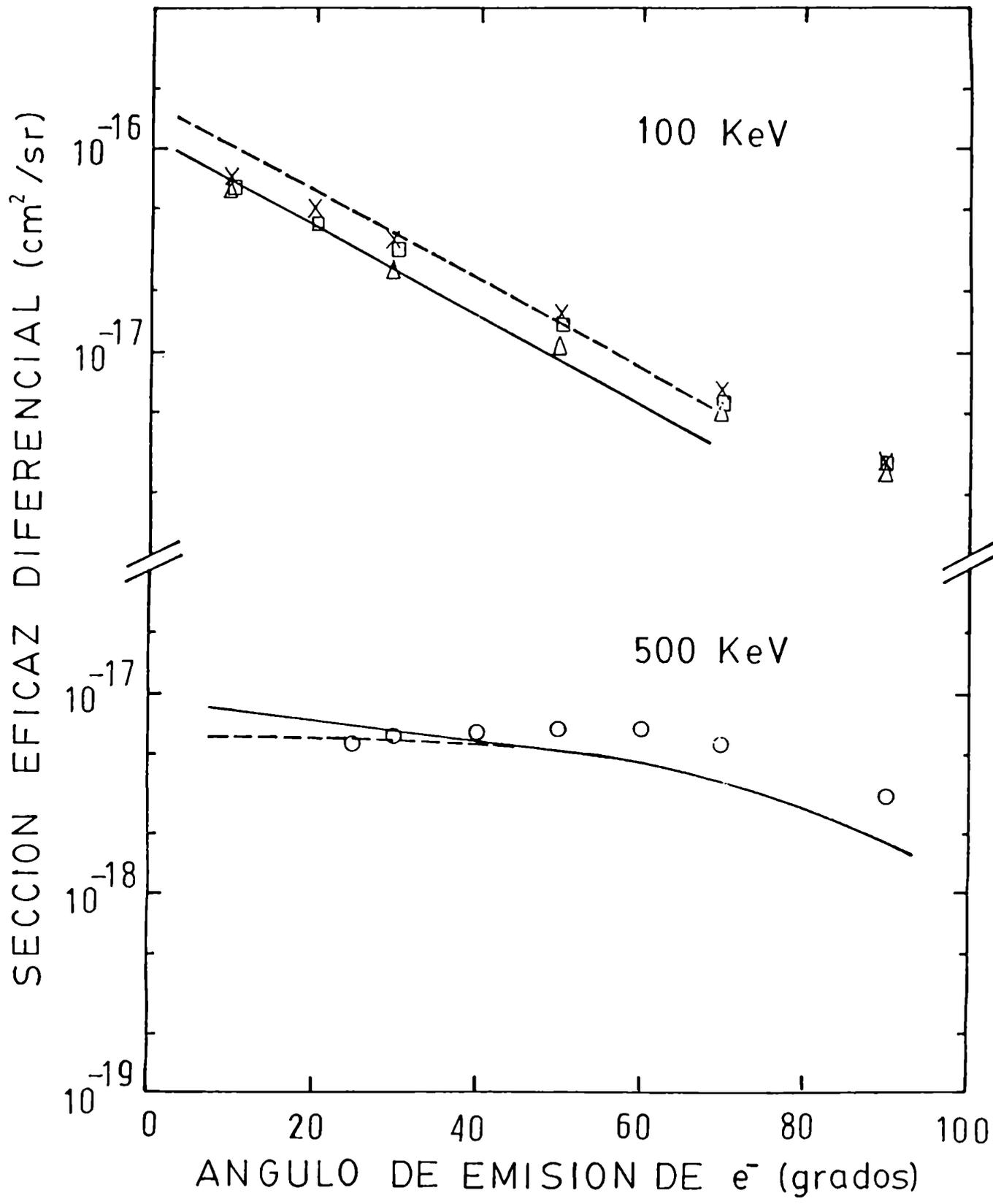


fig. 26: $\text{H}^+ + \text{He}$

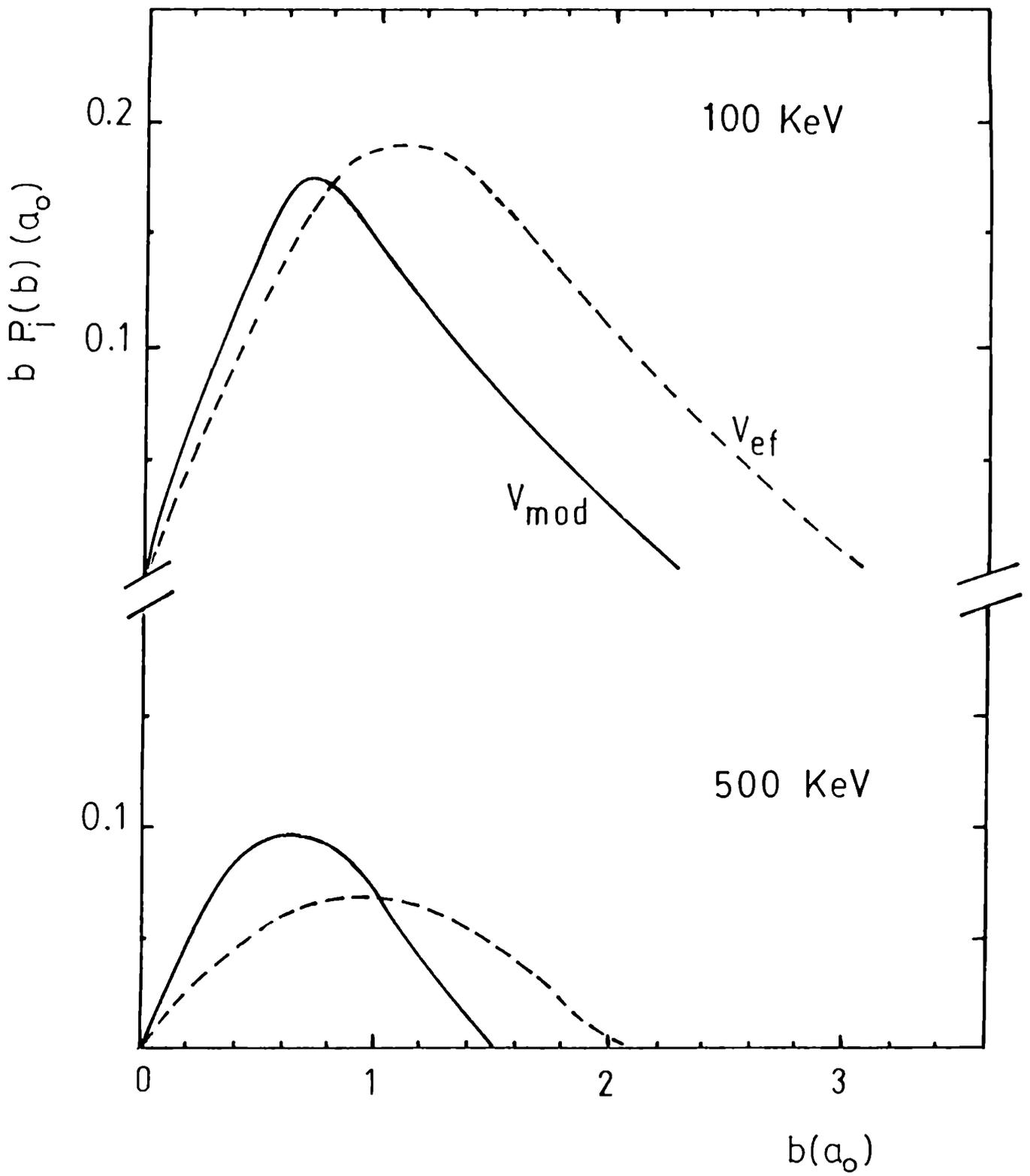


fig. 27: $H^+ + He$