



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

TESIS DE DOCTOR EN FÍSICA

“Simple y doble ionización de Helio por impacto de electrones”

MARCELO JOSÉ AMBROSIO

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

2014

Prefacio

Esta Tesis se presenta como parte de los requisitos para optar al grado Académico de Doctor en Física, de la Universidad Nacional del Sur y no ha sido presentada previamente para la obtención de otro título en esta Universidad u otra. La misma contiene los resultados obtenidos en investigaciones llevadas a cabo en el ámbito del Departamento de Física durante el período del 18 de noviembre de 2009 y el 27 de febrero de 2014, bajo la dirección del Dr. Gustavo Gasaneo y el Dr. Flavio Colavecchia del Centro Atómico Bariloche.

Lic. Marcelo José Ambrosio



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR
Secretaría General de Posgrado y Educación Continua

La presente tesis ha sido aprobada el/..../..... , mereciendo
la calificación de(.....)

A mi familia

Agradecimientos

A mis directores, los Dres. Gustavo Gasaneo y Flavio Colavecchia, agradezco la confianza depositada en mi persona para la concreción de las tareas. Desde su especialidad, cada uno ha realizado su aporte tanto en el desarrollo de la presente tesis como en el aprendizaje personal por mi transcurrido.

Al Dr. Darío Mitnik, que sin tener conmigo ninguna responsabilidad o compromiso directo contribuyó enormemente y estuvo dispuesto a trabajar largamente lado a lado, tanto en Bahía Blanca como en Buenos Aires. Similar es el agradecimiento al Dr. Ugo Ancarani, que igualmente sin una responsabilidad directa realizó valiosos aportes en los aspectos teórico-formales del cálculo.

Tendría que escribir otra tesis aparte para hacer justicia al soporte que han sido mis padres, Marcelo Julio Ambrosio y María Enriqueta Díaz de Vivar. Desde el comienzo de mi carrera en 2003 y después de finalizada la misma, durante la etapa doctoral. Ellos han sabido, incondicionalmente, estar conmigo en este proyecto de vida. Mi más profundo agradecimiento va dirigido a ellos.

Al doctor Juan Randazzo, quien en varios momentos de incertidumbre supo dedicarme parte importante de su tiempo para realizar controles cuando el código desarrollado para los cálculos eje de esta tesis se encontraba en sus etapas iniciales. Similar buena disposición me prestó la doctora Ana Laura Frapiccini, estando siempre disponible para lo que quisiera consultarla.

Al doctor Anatoly Kheifets, que sin más nos proporcionó sus resultados teóricos para establecer una comparación que contribuyó a enriquecer el presente trabajo. Al doctor Sergei Zaytsev, que nos facilitó sus resultados de la metodología J-Matrix.

Tengo un especial agradecimiento que hacer a varios de mis amigos por un detalle que han tenido durante estos cinco años: el de abrirme las puertas de sus casas y estar dispuestos a brindarme alojamiento todas las veces que necesité viajar a sus ciudades

en el marco del presente trabajo. En Buenos Aires: Juan Manuel Drangosch, Alan Mackern y Robert Duff, Santiago y Guillermo Preckel, Julián y Esteban Drangosch. En Rosario : Juan Carlos Furch. En Córdoba: Gennaro Fusco. Todos ellos son gente de la edad de uno (años más, años menos), que tienen sus ocupaciones, compromisos y demás, pero no obstante pudieron hacerse de unos momentos para recibirme a mi junto con mis horarios de trabajo o de congreso.

Tampoco puedo dejar de agradecer a mis compañeros de oficina, a los que vi finalizar sus doctorados y a los que me ven ahora finalizar el mío: Silvia, Silvina, Carina, Estefanía, Ignacio, Walter, Carolina, Sol, Ana Cecilia, Bruno, Carlos e Ilán. Todos ellos contribuyeron a hacer más llevaderos los días de oficina. Espero que el buen espíritu de la sala de becarios se manetenga por muchos años más.

Resumen

El objetivo principal de este trabajo consistió en la aplicación de la metodología de las Funciones Sturmianas Generalizadas (GSF) a la doble ionización de Helio por impacto de electrones ($e, 3e$). Este sería, estrictamente, un problema de cuatro cuerpos, pero en el régimen de proyectiles rápidos el mismo puede reducirse a uno de tres. Hasta el día de la fecha este problema continúa sin estar adecuadamente resuelto: ningún cálculo teórico ha conseguido reproducir correctamente las secciones eficaces totalmente diferenciales (FDCS) experimentales. Más aún, el desacuerdo se hace extensivo a las formulaciones teóricas. Los resultados presentados en esta tesis se muestran en considerable acuerdo con aquellos de la metodología Convergent Close-Coupling (CCC). La presente tesis constituye un hito que evidencia el crecimiento del grupo de investigación, ya que es la primera en la que se logra resolver de forma exacta un problema de tres cuerpos para un proceso de colisión.

Se estudió además, en un modelo de momentos angulares nulos, la física contenida en la propia función de onda de $(e, 3e)$, en tanto a doble como a simple ionización. En este modelo se estableció claramente la manera en la que la base GSF de tres cuerpos es capaz de aproximar el comportamiento asintótico de la solución de dispersión, en simple y doble ionización.

Otros estudios realizados consisten en la introducción de una metodología numérica basada en la diferenciación lagrangiana, con la que es posible obtener conjuntos de GSF. La metodología demuestra ser eficiente, precisa y capaz de una generalidad inexistente en las implementaciones previamente disponibles para el grupo. Un ejemplo de esto es la capacidad de trabajar con grillados radiales no uniformes, que incluso pueden contener una rotación al plano complejo en el mismo espíritu que la metodología Exterior Complex Scaling (ECS). En el marco de los problemas de dispersión de dos cuerpos se analizaron varias optimizaciones importantes para la base GSF. Su objetivo, no obstante, fue estudiar prospectivamente en qué medida podrían incrementar el

rendimiento de los cálculos en problemas de tres cuerpos.

Abstract

The main objective for this Ph D. work consisted in the application of the Generalized Sturmian Functions (GSF method) to the electron impact double ionization of Helium ($e, 3e$). It is formally a four-body Coulomb problem, but under the fast projectile regime it can be reduced to a three-body one. Up to this date, the ($e, 3e$) problem has not found agreement between theories and experiments in this regime. Theories themselves provide fully differential cross sections (FDCS) that differ in magnitude, and in some cases even in shape. The results presented in this thesis show considerable agreement with those of the Convergent Close-Coupling (CCC) formulation. The present thesis constitutes a landmark which evidences the growth trend of the research group in the fact that it is the first one which models a complete physical process, to the degree that it is possible to establish a comparison with experimental FDCSs.

We also studied, in a zero-angular momentum frame, the physics contained in the ($e, 3e$) wavefunction: single and double ionization information. Within this model we clearly established how the GSF basis manages to expand the asymptotic behaviour of the scattering solution, for single or double ionization channels.

A new generating method for GSF basis was introduced. It is based in a lagrangian differentiation scheme. It shows efficiency, high precision and it is capable of an unprecedented generality degree, not previously available to the group. For example, the method allows for general, nonuniform radial grids, which may even contain a rotation into the complex plane, in the same spirit as the Exterior Complex Scaling (ECS) methodology. Within the two-body scattering problem frame, various optimizations were tested for the GSF basis. They were, however, prospective studies to test whether the performance of the GSF basis applied to three-body problems could be increased.

Índice general

Introducción	4
El problema de los dos cuerpos	13
1. Bases Sturmianas	13
1.1. Introducción	13
1.2. Propiedades generales	14
1.2.1. Sturmians: $\mathcal{V}(r)$ concentrado	16
1.2.2. Sturmians: $\mathcal{V}(r)$ disperso	18
1.2.3. Sturmians: $\mathcal{V}(r)$ híbrido	21
1.3. Ejemplos analíticos de bases Sturmianas	22
1.3.1. Funciones Sturmianas Coulombianas	22
1.3.2. Autovalores y autofunciones del potencial de Hulthén	23
1.4. Espectrograma de las Funciones Sturmianas	25
1.5. Metodología numérica : diferencias finitas de orden arbitrario	32
1.5.1. Grillados generales	40
1.5.2. Proyecciones a futuro	47
2. Resolución de problemas de dispersión y optimización de la base	49
2.0.3. Problemas de dispersión: formulación con la base GSF	51
2.1. Estrategias de optimización de la base GSF	52
2.1.1. Concentración-dispersión	52
2.1.2. Extensión analítica de las integrales	55
2.2. Elección de una base de alcance deliberadamente restringido	58
2.3. Resolución de problemas de dispersión con la base de Sturmians con rotación al plano complejo de la coordenada radial	60
2.4. Conclusiones y perspectivas del problema de los dos cuerpos	61

El problema de los tres cuerpos	65
3. Introducción	65
3.1. Formulación para proyectiles rápidos	66
3.2. Evaluación del estado $\Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$	71
3.3. Evaluación de la función $\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$	75
3.4. Sección eficaz totalmente diferencial	78
4. Estudio de la función en onda S	80
4.1. Función de onda, energía total positiva	81
4.2. Condiciones de borde y dinámica de expansión de la base Sturmiana	88
4.3. Estudio de los canales de simple ionización	92
4.4. Relevancia de los elementos de base	98
4.5. Caso particular : $E = 0$	102
4.6. Energías Negativas	105
5. Doble ionización de Helio, solución completa	108
5.1. Blanco de Helio Temkin–Poet	109
5.1.1. Estudio de la magnitud del término inhomogéneo de la ecuación (3,10)	109
5.1.2. Secciones eficaces totalmente diferenciales	111
5.2. Blanco de Helio completo	113
5.2.1. Función de onda de dispersión	113
5.2.2. Estudios de convergencia	116
5.2.3. FDSC: resultados finales	119
5.3. Conclusiones y perspectivas del problema de tres cuerpos	128
Conclusiones y perspectivas	134
Apéndices	141
A. Convenciones generales y siglas	141
I. Unidades atómicas	141
II. Siglas	141
B. Estados <i>pseudoligados</i>	142

C. Potenciales no locales en el cálculo de Funciones Sturmianas	145
D. Cuadraturas para grillados variables	147
I. Trapezoides	147
II. Simpson	148
E. Resolución directa de la ecuación de dispersión de dos cuerpos	153
F. Continuación hasta el infinito de las integrales en (r_2, r_3)	156
G. Cálculo del vector φ	158
H. Integrales de armónicos esféricos y biesféricos	161
Publicaciones relacionadas con la presente tesis	171

Índice de figuras

1.1. Autovalores del potencial de Yukawa para energía positiva (0.791) . . .	17
1.2. Base de tipo Yukawa	18
1.3. Autovalores del potencial rectangular para energía positiva (0.791) . . .	19
1.4. Funciones Sturmianas asociadas a un potencial generador de tipo rec- tangular.	21
1.5. Espectrograma de una GSF correspondiente a un potencial de Yuka- wa. Su autovalor posee parte real negativa. De esta manera, la función presenta oscilaciones más rápidas donde el potencial generador es más significativo. El trazo rojo señala el desplazamiento de la energía predo- minante para los distintos intervalos radiales.	27
1.6. Espectrograma de una GSF correspondiente a un potencial de tipo rec- tangular. Las energías se agrupan más estrechamente que en el caso de la figura 1.5.	28
1.7. Espectrograma colectivo, base de Yukawa	28
1.8. Espectrograma colectivo, base de potencial coulombiano truncado . . .	29
1.9. Espectrograma colectivo de una base de generador rectangular	30
1.10. Espectrograma colectivo de una base cuyo generador es suma de un potencial rectangular y uno coulombiano.	31
1.11. Descripción gráfica de la estructura de la matriz en su sector superior izquierdo, donde se impone la condición de regularidad en el origen. Los cuadrados representan los puntos de grilla donde se evalúa la derivada segunda y los círculos indican los puntos que se emplean para la dife- renciación lagrangiana. Los círculos rayados, corresponden a r_0 ; allí se asume la nulidad de la función incógnita.	34

1.12. Descripción gráfica de la estructura de la matriz en su sector inferior derecho con la información asintótica tomada solamente de $r_{n_{max}+1}$. Los cuadrados representan los puntos de grilla donde se evalúa la derivada segunda y los círculos indican los puntos que se emplean para la diferenciación lagrangiana. Los círculos rayados, corresponden a $r_{n_{max}+1}$, que es donde se asume para la función incógnita el comportamiento asintótico dado por la ecuación (1.5).	35
1.13. Descripción gráfica de la estructura de la matriz en su sector inferior derecho con la información asintótica tomada solamente de $r_{n_{max}+1}$. Los cuadrados representan los puntos de grilla donde se evalúa la derivada segunda y los círculos indican los puntos que se emplean para la diferenciación lagrangiana. Los círculos rayados, corresponden a $r_{n_{max}+1}$, que es donde se asume para la función incógnita el comportamiento asintótico dado por la ecuación (1.5).	36
1.14. Ejemplos de los esquemas $r_s(i)$ empleados. El caso uniforme, $r_0(i)$ (trazo punteado amarillo), $r_1(i)$ (trazo segmentado rojo) y el de la tangente hiperbólica, $r_2(i)$ (trazo continuo negro).	42
1.15. Primeras 120 autofunciones del potencial de Hulthén con $\alpha = 1,0$ y un radio máximo de 30 u.a.. Para esta resolución se emplearon solamente 1200 puntos. Se muestran las funciones hasta 20 u.a., puesto que son indistinguibles más allá. La resolución precisa solamente 90 segundos en un solo procesador de 3.2 GHz.	43
1.16. Ilustración de las variables auxiliares involucradas en el esquema de escaleo complejo de tipo <i>smooth</i>	46
1.17. Parte real de las GSF obtenidas de un generador de tipo Woods–Saxon, utilizando una rotación compleja suave de la coordenada radial. Se muestra también el contorno de escaleo complejo (trazo a rayas) reducido en amplitud en un factor de 4 por para su visualización en el gráfico así como el potencial generador $\mathcal{V}(r)$ (trazo punteado) evaluado en el contorno complejo empleado en la obtención de la base.	47

2.1.	Módulo de los $a_{0,n}$ obtenidos de la resolución de un problema de dispersión con un dispersor de Yukawa muy concentrado sobre el origen. Los cuadrados negros corresponden con una base de potencial Coulombiano truncado, mientras que los círculos verdes a una base de potencial rectangular. La convergencia es alcanzada con apenas 50 elementos para el primero y no es alcanzada con 120 para el segundo.	53
2.2.	Módulo de los coeficientes $a_{l,n}$ de un problema de dispersión generalizado. En este ejemplo $\mathcal{V}_{\mathcal{R}}(r) = 1$ y $\varphi_0(r)$ es un estado de dispersión numérico de condición saliente. Resoluciones con bases GSF de Yukawa (cruces violeta), potencial Coulombiano truncado (cuadrados negros) y de pozo rectangular (círculos verdes).	54
2.3.	Problema de dispersión con energía $E = 0.905$. La base Sturmiana posee $E_s = 0.605$. Panel superior: resultado con la extensión analítica del solapamiento. Panel inferior: sin la extensión más allá del dominio de integración numérico. En ambos casos comparamos la resolución (trazo negro segmentado) con una por diferencias finitas (curva anarnjada continua). El lado derecho empleado era no decreciente en el dominio pero nulo fuera del mismo.	56
2.4.	Resolución de un problema de dispersión con una base de alcance deliberadamente acotado. Es posible observar que a pesar de diferir en energía respecto del problema, la base consigue construir una función de dispersión con el comportamiento correcto. La resolución por medio de la base GSF (parte real: trazo negro continuo, parte imaginaria: trazo rojo segmentado) se contrasta con la resolución directa de (2.7) por diferencias finitas (parte real: trazo raya-punto en azul, parte imaginaria: trazo doble punto-rayo en verde). Panel superior: región cercana. Las soluciones son indistinguibles. Panel inferior: región lejana, donde se observa que alrededor de 65 a.u. la base pierde la capacidad de expansión.	59

2.5. Resolución de un problema de dispersión con una base GSF con ECS. La resolución por medio de la base GSF (parte real: trazo negro continuo, parte imaginaria: trazo rojo segmentado) se contrasta con la resolución directa de (2.7) por diferencias finitas (parte real: trazo raya-punto en azul, parte imaginaria: trazo doble punto-rama en verde). Panel superior: región cercana. Panel inferior: región lejana. La rotación compleja se aplica a partir de 70 u.a.	61
4.1. Función de onda del modelo de onda S resuelto con una base de generador rectangular.	82
4.2. Función de onda del modelo de onda S resuelto con una base de generador de Yukawa.	82
4.3. Función de onda del modelo de onda S resuelto con una base de tipo Coulombiano truncado.	83
4.4. Comparación un corte hecho en $r_2 = 1.92$ en las funciones de onda obtenidas con el potencial rectangular (trazo continuo negro), con el de Yukawa (trazo punteado verde) y con el potencial Coulombiano truncado (trazo segmentado rojo).	84
4.5. Función de onda del modelo de onda S. Se presentan las resoluciones con la base del potencial rectangular (trazo rojo continuo con círculos) y Yukawa (trazo azul a rayas). Corte a un hiperángulo $\alpha = 15^\circ$. Es claramente notable que ambas representaciones consiguen construir una idéntica función de dispersión.	84
4.6. Función de onda del modelo de onda S. Se presentan las resoluciones con la base del potencial rectangular (trazo rojo continuo con círculos) y Yukawa (trazo azul a rayas). Corte a un hiperángulo $\alpha = 45^\circ$. Es claramente notable que ambas representaciones expanden la misma función de dispersión.	85
4.7. Corriente de probabilidad en forma versorial. Se mantiene la dirección de los vectores, pero son normalizados a una misma longitud por claridad visual de la figura.	86
4.8. Ajuste del un corte hiperradial. Resultado GSF (trazo continuo en negro) y curva de ajuste (puntos azules)	87

4.9. Caracterización de las condiciones en las frontera de la caja.	89
4.10. Función de onda resultante de realizar una resolución en una caja de 60 u.a. de lado y luego una prolongación asintótica de los elementos de base Sturmiana. La región I se corresponde con la caja donde se resolvió el problema. Dentro de la misma la base es capaz de expandir de manera acorde la solución. En las regiones II y III la base se ha tornado asintótica en una de las dos coordenadas. En la región IV la base es asintótica en ambas coordenadas, resultando en frentes planos.	91
4.11. Función de ionización simple $\xi_4(r_2)$ (parte real: cuadrados azules, parte imaginaria: círculos verdes) y su reexpansión en la base auxiliar $\mathcal{S}_m^{(4)}(r_2)$ (parte real: trazo negro continuo, parte imaginaria: trazo rojo segmentado). El comportamiento asintótico de $\xi_4(r_2)$ coincide en energía de salida y carga asintótica con la base auxiliar $\mathcal{S}_m^{(4)}(r_2)$. Este hecho confirma que $\xi_4(r_2)$ se corresponde con la emisión del electrón 2 dejando al 3 ligado en el estado $4S$ de He^+	93
4.12. Función de ionización simple $\xi_5(r_2)$ (parte real: cuadrados azules, parte imaginaria: círculos verdes) y su reexpansión en la base auxiliar $\mathcal{S}_m^{(5)}(r_2)$ (parte real: trazo negro continuo, parte imaginaria: trazo rojo segmentado). El comportamiento asintótico de $\xi_5(r_2)$ coincide en energía de salida y carga asintótica con la base auxiliar $\mathcal{S}_m^{(5)}(r_2)$. Este hecho confirma que $\xi_5(r_2)$ se corresponde con la emisión del electrón 2 dejando al 3 ligado en el estado $5S$ de He^+	94
4.13. Función de ionización simple $\xi_1(r_2)$ (parte real en trazo continuo negro; parte imaginaria en trazo rojo segmentado). Se aprecia que aún en el rango asintótico la amplitud de la componente real e imaginaria no coinciden. Por lo tanto, $\xi_1(r_2)$ no se comporta como una onda saliente pura. Este problema tiene origen en que $E_s = E_a = 0.759$ mientras que $E_1 = 2.759$	95
4.14. Corriente de probabilidad de la función de dispersión. Izquierda: Sin remover ningún canal. Derecha: con los dos primeros canales de simple ionización removidos.	97

4.15. Corriente de probabilidad de la función de dispersión. Izquierda: con los primeros cuatro canales de simple ionización removidos. Derecha: con los primeros seis canales de ionización removidos. Podemos evidenciar que el frente hiperesférico permanece esencialmente inalterado, mientras que las estructuras de los bordes se afectan radicalmente.	98
4.16. Logaritmo decimal del módulo de los coeficientes de la función de $(e, 3e)$ en onda S con la base del potencial rectangular.	99
4.17. Logaritmo del módulo de los coeficientes de la función de $(e, 3e)$ en onda S con la base del potencial rectangular. Acercamiento a la estructura centrada aproximadamente en $\beta_2 = 0.25 = \beta_3$	100
4.18. Logaritmo del módulo de los coeficientes de la función de $(e, 3e)$ en onda S con la base de Yukawa.	101
4.19. Función de dispersión correspondiente a una energía total de cero. Se observa una extensión gradual de las longitudes de onda, así como la pequeña amplitud de la componente de doble ionización respecto de las de simple ionización presentes en los bordes (truncadas al acercar la escala a la magnitud del frente hiperesférico).	103
4.20. Ajuste de un corte radial de la función de tres cuerpos con energía cero. El modelo de ajuste impone el decrecimiento de la longitud de onda previsto por Peterkop. La función de onda (parte real) se grafica en trazo negro continuo con cuadrados, mientras que con un trazo continuo rojo se presenta el resultado del ajuste.	104
4.21. Función de dispersión obtenida para un problema con energía total por debajo del umbral de doble ionización. Resolución obtenida con bases del continuo para ambos electrones.	106
4.22. Función de dispersión obtenida para un problema con energía total por debajo del umbral de doble ionización. Resolución obtenida con una base del continuo en r_3 y una de ligados en r_2	107
5.1. Gráficos de las primeras cuatro funciones radiales $\tilde{\mathcal{F}}_{L'}(r_2, r_3)$, con $L' = 0, 1, 2, 3$; (a), (b), (c), (d) respectivamente. Se hace manifiesto que la función $\tilde{\mathcal{F}}_1(r_2, r_3)$ destaca en magnitud por sobre las demás.	111

5.2. FDCS para las configuraciones angulares $\theta_2 = 27^\circ$ (a), 69° (b), 111° (c), 139° (d), 291° (e) y 319° (f). El estado ligado de Helio se modeló en onda S, mientras que para la función de dispersión sí se consideraron momentos angulares generales. El acuerdo en magnitud que se aprecia es fortuito, como quedará claro en la sección siguiente.	112
5.3. Ondas parciales de la función de dispersión, onda $L' = 0$. Izquierda: $\{0, 0\}$. Derecha: $\{1, 1\}$	113
5.4. Ondas parciales de la función de dispersión, onda $L' = 1$. De izquierda a derecha y arriba abajo: $\{0, 1\}$, $\{1, 2\}$, $\{2, 3\}$, $\{3, 4\}$	114
5.5. Ondas parciales de la función de dispersión, onda $L' = 0$. Izquierda: $\{0, 2\}$. Derecha: $\{1, 1\}$	114
5.6. Comparativa de cortes hiperradiales de distintas ondas parciales correspondientes a $L' = 0, 1, 2$. Se muestran, de $L' = 1$ las ondas $\{0, 1\}$ (trazo a rayas negro), $\{1, 2\}$ (trazo a rayas rojo) y $\{3, 4\}$ (trazo a rayas azul). De $L' = 0$, $\{0, 0\}$ (trazo continuo negro) y de $L' = 2$, $\{0, 2\}$ (trazo punteado negro). A todas luces las primeras ondas parciales de $L' = 1$ determinan los aspectos más fundamentales del proceso físico en cuestión. La participación de $L' = 0, 2$ se limita introducir modificaciones menores, puesto que en la expresión (3.41) interviene el cuadrado de la función completa y las diferencias en escala se acentúan. En todos los casos se graficó la parte real de la función.	115
5.7. Onda parcial $L' = 1$: $\{0, 1\}$. La escala se definió para enfocar apropiadamente la región de doble continuo; los primeros canales de simple ionización se aprecian truncados.	116
5.8. Onda parcial $L' = 1$: $\{1, 2\}$	116

- 5.9. Estudio de convergencia de las ondas parciales de $L' = 1$. En el panel superior, las ondas $\{0, 1\}$ (trazo negro, continuo, y círculos negros) y $\{1, 2\}$ (trazo rojo, segmentado, y cuadrados rojos). En el panel inferior observamos las ondas parciales $\{2, 3\}$ (trazo punteado negro y círculos negros) y $\{3, 4\}$ (segmentos rojos y cuadrados rojos) de ambas resoluciones, mientras que se añade la contribución $\{4, 5\}$ (trazo azul continuo) existente solo en la más completa. En ambos paneles se emplearon los símbolos para graficar los resultados correspondientes al cálculo de menos ondas parciales y las líneas (continuas, segmentadas o punteadas) para la versión más completa. **117**
- 5.10. FDCS para las geometrías $\theta_2 = 41^\circ$ (izquierda) y $\theta_2 = 319^\circ$ (derecha) en unidades arbitrarias, a fin, de en la misma gráfica, mostrar el cociente entre ellas. En los sectores donde las FDCS son apreciables el cociente ronda la unidad. El cálculo más completo, es decir con más ondas parciales se presenta en trazo continuo negro; el más simple en trazo segmentado rojo. El cociente se delinea en puntos anaranjados. **118**
- 5.11. Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). Izquierda $\theta_2 = 41^\circ$, derecha $\theta_2 = 291^\circ$. Cálculos en dominios de 30 u.a. (trazo continuo negro), 50 u.a. (trazo rayado rojo) y 70 u.a. (trazo punteado azul). Las secciones eficaces se evaluaron en radios 28.5, 47 y 66 respectivamente con la expresión (3.41). **119**
- 5.12. Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (a) $\theta_2 = 27^\circ$, (b) $\theta_2 = 41^\circ$, (c) $\theta_2 = 55^\circ$, (d) $\theta_2 = 69^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix. **121**
- 5.13. Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (e) $\theta_2 = 83^\circ$, (f) $\theta_2 = 97^\circ$, (g) $\theta_2 = 111^\circ$, (h) $\theta_2 = 125^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix. **121**
- 5.14. Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (i) $\theta_2 = 139^\circ$, (j) $\theta_2 = 153^\circ$, (k) $\theta_2 = 207^\circ$, (l) $\theta_2 = 221^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix. **122**

5.15. Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (m) $\theta_2 = 235^\circ$, (n) $\theta_2 = 249^\circ$, (o) $\theta_2 = 263^\circ$, (p) $\theta_2 = 277^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix.	122
5.16. Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (q) $\theta_2 = 291^\circ$, (r) $\theta_2 = 305^\circ$, (s) $\theta_2 = 319^\circ$, (t) $\theta_2 = 333^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix.	123
5.17. Análisis de las estructuras presentes en la sección eficaz totalmente di- ferencial. Se destacaron en trazo segmentado las curvas nodales corres- pondientes a los fenómenos (A) y (D). El trazo <i>doble línea - punto</i> co- rresponde a la emisión en una misma dirección para ambos electrones. Los cuadrados señalan los ceros del caso (B), mientras que las circunfe- rencias marcan las zonas donde existen los máximos locales visibles en panel (s) (Figura 5.15)	125
5.18. Representación esquemática de los procesos de primer orden dominantes en el modelo de proyectil rápido. El caso (a) es conocido como <i>Two-Step-</i> <i>1</i> . Los procesos (b) y (c) involucran una interacción adicional, la colisión con el núcleo.	126
5.19. Sección eficaz totalmente diferencial, graficada en función del ángulo de eyección de cada electrón. Se hace evidente la concordancia de forma y de magnitud de los cálculos de esta tesis (a) con los de la metodología CCC (b).	127
D.1. Construcción del vector \mathbf{q} de cuadratura de Simpson por medio de los coeficientes $\alpha_i^{(j)}$	150
D.2. Construcción de la cuadratura de Simpson para intervalo variable . . .	151
D.3. Construcción de la cuadratura de Simpson para intervalo variable . . .	152
E.1. Detalle de una función $\psi_{sc,l}^+(r)$ resuelta con distintas discretizaciones del intervalo radial y orden de diferenciación. Se puede observar que las resoluciones con $n_s = 23$ presentan una convergencia significativamente más rápida que las de $n_s = 3$	154

Introducción

La presente tesis tuvo como objetivo central la resolución del problema de doble ionización de Helio por impacto de electrones en el régimen de proyectil rápido empleando la metodología de las Funciones Sturmianas Generalizadas (GSF). Al día de la fecha, las mediciones en escala absoluta presentadas [1, 2] no han podido ser satisfactoriamente caracterizadas por ningún esquema teórico. Es decir, no concuerdan las secciones eficaces totalmente diferenciales experimentales con las proporcionadas por los métodos teóricos.

Si bien la doble ionización de Helio por impacto electrónico es, estrictamente, un problema de cuatro cuerpos, en el mencionado régimen son válidas ciertas aproximaciones que permiten reducir su complejidad a uno de tres. Aún así, para el problema cuántico de tres cuerpos no se conoce una solución cerrada. Una forma de proceder ante esta situación consta de utilizar funciones de tres cuerpos aproximadas [3] (o cuatro [4]) que toman en cuenta el régimen asintótico del problema en cuestión, siendo estas soluciones válidas para cuando las partículas se han distanciado lo suficiente. Por esta vía es posible obtener descripciones físicas que con frecuencia resultan satisfactorias en forma cualitativa. Algunas mejoras en estos modelos aproximados pueden ser introducidas mediante el uso de cargas dependientes de los momentos, con el objeto de incorporar el apantallamiento según las direcciones de escape de los electrones [5]. Estos enfoques, aún cuando se limitan a describir cualitativamente los fenómenos, frecuentemente sobre o subestimando por órdenes de magnitud la sección eficaz de interés, permiten sondear la clase de mecanismos subyacente gracias a sus expresiones analíticas. En contraposición, existe un espectro de metodologías denominadas *ab-initio* capaces de obtener una solución *numéricamente exacta* de un problema de tres cuerpos. Parte importante de la dificultad para resolver adecuadamente estos problemas de tres cuerpos radica en la imposición de las condiciones asintóticas. Concretamente, recae en el hecho de que no es de antemano conocida la manera en que cada canal se poblará y que cada uno posee un comportamiento asintótico diferente.

Una de las metodologías que ha mostrado ser capaz de resolver satisfactoriamente problemas de tres cuerpos es la denominada J-Matrix [6, 7, 8]. Desarrollada a mediados de la década de 1970 [7, 9, 10], se ha visto aplicada en numerosas ocasiones sobre problemas de tres cuerpos tanto sobre la ecuación de Lippmann-Schwinger [8, 11, 12] como sobre las ecuaciones de Faddeev-Merkuriev [13, 14, 15, 16]. En líneas generales,

se expresa la función de tres cuerpos separada en una región interna y una externa, ambas con coeficientes a determinar. En la primera se utiliza una base de cuadrado integrable, mientras que en la segunda se imponen condiciones de simple continuo para uno de los electrones, considerándose que el mismo ha sido dispersado.

La metodología llamada Convergent Close Coupling (CCC) formula la solución de un problema de tres cuerpos en términos de productos entre funciones, a determinar, de un electrón libre con autoestados del blanco [17, 18]. Para estas funciones se obtiene un sistema integro-diferencial de ecuaciones. No obstante, se pospone la resolución directa de tal sistema y se escribe una ecuación de tipo Lippmann-Schwinger para la matriz de transición. Es en esta etapa, a través del operador de Green involucrado, que se impone un comportamiento de tipo saliente a las soluciones. Los estados del blanco se obtienen de una diagonalización por medio de una base de cuadrado integrable. Para representar el continuo del blanco la metodología se vale de *pseudoestados*, aproximaciones de cuadrado integrable a estados del continuo.

El Exterior Complex Scaling (ECS) evita la imposición de una condición asintótica en particular realizando sobre las coordenadas radiales una rotación al plano complejo [19]. De esta forma, las ondas con comportamiento de tipo saliente son mapeadas a decrecimientos exponenciales, con los que a su vez posible imponer, a partir de cierta distancia, un cero numérico a la función de onda sobre la frontera del dominio. En el año 1999 fue publicado en la revista Science [20] un trabajo en el que se establece la solución definitiva de problemas de tres cuerpos mediante la metodología ECS.

Existen implementaciones capaces de resolver un problema de cuatro cuerpos completo, es decir, tratando los tres electrones en pie de igualdad. Las mismas, empero, están limitadas a electrones lentos, de manera tal que con grillados numéricos de una densidad moderada se puede caracterizar la función de onda. Destacamos las contribuciones de Bartlett [21, 22] como *benchmarks* dentro de un modelo de onda S en el marco de la metodología Propagated Exterior Complex Scaling (PECS). La misma consiste en una adaptación del esquema ECS, y el autor comenzó con tales desarrollos en su trabajo doctoral [23], aplicando la metodología a problemas de tres cuerpos. Aun cuando prometedora, esta metodología solo ha sido aplicada a problemas de cuatro cuerpos simplificados, es decir, como ya dijimos a modelos S del sistema.

Es posible evitar completamente la imposición de condiciones asintóticas y reem-

plazarla por condiciones iniciales si se trabaja dentro de formalismos dependientes del tiempo. Con la metodología de Time-Dependent Close-Coupling (TDCC), Pindzola y colaboradores [24] han atacado de manera directa un problema de cuatro cuerpos, al igual que Bartlett, en un modelo de onda S . Los autores también han, previamente, resuelto versiones de tres cuerpos en el contexto de la simple ionización de Helio [25] y la doble fotoionización de la misma especie [26]. Más recientemente, Pindzola y colaboradores han resuelto el problema de la doble ionización de He por impacto de electrones como un problema de cuatro cuerpos en toda regla [27]. Debido al gran costo numérico, el estudio se restringe a situaciones en las cuales el proyectil tiene muy bajas energías.

En las resoluciones dependientes del tiempo debe tomarse el recaudo de que, durante el período de la simulación, los paquetes de onda asociados al proyectil o a los electrones eyectados alcancen las fronteras del dominio considerado. Este aspecto se puede solucionar si se emplea una grilla expansible en el tiempo, es decir, que se dilata de manera tal que nunca se alcance tal situación: es el fundamento de la metodología Wave Packet Evolution [28]. De entre la clase de metodologías dependientes del tiempo debemos mencionar también al Time Dependent Exterior Complex Scaling (TDECS) [29, 30, 31, 32]. La idea detrás de tal implementación es reducir la cantidad de operaciones computacionales necesarias: se reemplaza la resolución de un sistema lineal por un conjunto de operaciones de tipo matriz por vector. Esta implementación en principio escalaría más favorablemente que las implementaciones independientes del tiempo del ECS [33] para sistemas de tres y cuatro partículas.

Para finalizar la breve descripción de algunas metodologías relevantes para acometer la resolución de problemas de tres cuerpos, mencionaremos la metodología que ha desarrollado el grupo de Física Atómica de la Universidad Nacional del Sur y Centro Atómico Bariloche. El corazón de la misma yace en la imposición de las condiciones asintóticas del problema en cuestión a través de las propias funciones de base, hecho que simplifica notablemente las implementaciones respecto de, por ejemplo, el CCC o el J-Matrix, que requieren de sofisticados subterfugios para modelar las condiciones de doble continuo.

Repasaremos de manera sintética la trayectoria del método y las aplicaciones llevadas a cabo por el grupo de Física Atómica de la Universidad Nacional del Sur.

La metodología de las Funciones Sturmianas Generalizadas (GSF, por sus siglas en inglés) fue introducida recientemente si se la compara con las otras ya mencionadas. Comenzó a ser implementado por el grupo a partir del trabajo de Frapiccini *et al* [34], en el que se introdujeron los aspectos esenciales de la metodología. En las referencias [35, 36] se pueden encontrar las propiedades matemáticas de los conjuntos de base Sturmianos. Entre las contribuciones del grupo hallamos aplicaciones al problema de dos cuerpos [34, 36] y de estados ligados de tres cuerpos [37, 38, 35]. Para sistemas ligados la base de Funciones Sturmianas ha mostrado ser sumamente eficiente, puesto que se pueden obtener, comparativamente con escasos recursos computacionales, representaciones muy precisas de átomos libres [37, 38, 35] y confinados [39]. El método GSF también se ha visto implementado a problemas de dispersión de tres cuerpos en los trabajos [40, 41, 42, 43]. En todos ellos se estableció la eficiencia y precisión que puede entregar la metodología GSF. Un compendio completo puede encontrarse en la referencia [44].

La serie de datos experimentales con la problemática que apuntamos a resolver procede de mediciones publicadas en 1998 [1], un subconjunto de las mediciones presentadas en 1999 [2] junto con una serie de cálculos realizados por la metodología CCC. Experimentos más recientes son los de A. Dorn [45, 46], también en el régimen de interés en esta tesis, pero los mismos no disponen de una escala absoluta. Siendo que varias teorías, incluso aquellas basadas en funciones analíticas aproximadas, producen secciones eficaces físicamente plausibles [3, 47], es determinante disponer de datos experimentales en escala absoluta.

A continuación describiremos la diagramación de la presente tesis y el ordenamiento de la información presentada. En el marco de este trabajo se realizaron numerosos estudios sobre problemas de dos y tres cuerpos, frecuentemente interrelacionados, ya que en la mayoría de los casos un experimento numérico sobre dos cuerpos constituía prospecciones sobre mejoras a implementar sobre los de tres. Por ende, la distribución más adecuada consistió en agrupar los resultados en dos secciones principales. Una primera abocada a los problemas de dos cuerpos y una segunda donde se presentan los cálculos de problemas de tres cuerpos. Al final de cada una se delinea una recapitulación con los aportes realizados y futuras continuaciones. Como cierre del trabajo en su totalidad se presentan las conclusiones generales.

En la primera mitad se realiza un pormenorizado estudio de las bases GSF que el grupo de investigación ha utilizado hasta la fecha. Se clasifican en tres *arquetipos* básicos, y de cada uno se establecen sus rangos de idoneidad. Otro estudio realizado permite comprender las capacidades de expansión de todo un conjunto de base y cómo varía la misma de acuerdo a la región espacial en consideración. Se introdujo también un código capaz de producir bases GSF, con gran flexibilidad y generalidad que consigue añadir capacidades nuevas a las implementaciones disponibles con anterioridad en el grupo. Una implementación con argumentos similares también se introdujo para generar otro tipo de base recientemente introducido por el mismo grupo: las Funciones Quasi-Sturmianas. Con ambas herramientas se estudiaron numerosas optimizaciones, teniendo por finalidad caracterizar apropiadamente las maneras de trabajar de la base, que es en sí un aspecto en estudio principalmente por sus consecuencias sobre los problemas de tres cuerpos. En estos problemas los costes computacionales son considerablemente mayores, y por lo tanto es menester conocer los detalles técnicos que permitan reducirlos. La eficiencia en cuanto a recursos computacionales que presenta la base GSF en comparación con otras metodologías *ab-initio* preexistentes ha sido establecida en la tesis del Dr. Juan Randazzo [48]. Conforme se conocen aspectos más profundos de la base GSF, más idóneo será el uso de los recursos computacionales en el modelado de problemas físicos de interés.

En la segunda mitad se formula el problema de cuatro cuerpos, de $(e, 3e)$ y se plantea la formulación que, en el rango de energías incidentes elevadas lo transforma en uno de tres. Acto seguido se acomete la resolución del mismo por medio de la metodología GSF. En primera instancia se estudia la física subyacente en la propia función de onda de dispersión, tanto sobre los canales de simple como de doble continuo; todo esto en el marco de un modelo de onda S . En las secciones siguientes se considera el modelo completo de la problemática. Se muestran las funciones de onda del problema general, y se analizan las secciones eficaces totalmente diferenciales (FDCS) que se obtienen de nuestros cálculos. Aquellos resultados son contrastados con datos experimentales y con teorías de otros equipos de investigación. Notablemente, se obtiene un muy buen acuerdo con otra de las teorías, el CCC, en la forma y en la magnitud de las FDCS. Nuestros resultados presentan una correcta estructura de mínimos que es esperable de acuerdo a argumentos formales del régimen de bajo momento transferido, al igual que

los del CCC.

Un aspecto que refleja el crecimiento a nivel de grupo de investigación es que la presente tesis sea la primera en la que se modela un problema físico del continuo hasta el punto de poder establecer comparación con datos experimentales. Es de esperarse que la tendencia mantenga en los trabajos doctorales venideros.

Si bien esta tesis está escrita en idioma castellano, se hará uso de siglas basadas en nombres en inglés, a fin de mantener una misma nomenclatura con las publicaciones especializadas, que mayoritariamente se encuentran esta última lengua. En todo el desarrollo de la tesis se ha hecho uso del sistema de unidades atómicas, apropiado para caracterizar las magnitudes microscópicas aquí estudiadas. Tanto las siglas como las unidades utilizadas se encuentran anotadas en el apéndice A para una rápida referencia.

El problema de los dos cuerpos

Capítulo 1

Bases Sturmianas

1.1. Introducción

La formulación del problema de Sturm–Liouville y teoremas asociados se debe a J. C. P. Sturm y J. Liouville, quienes en una serie de trabajos publicados entre 1836 y 1837 definieron sus bases. En particular, las contribuciones de Sturm se centraron en las propiedades de los autovalores y comportamiento cualitativo de las autofunciones, mientras que Liouville se abocó mayormente al estudio de la expansión de una función arbitraria en términos de una serie infinita de autofunciones [49]. Este concepto constituye una generalización a las expansiones de Fourier, y es utilizado en numerosas ramas de la física. En el dominio de la física atómica, la primera aplicación de bases Sturmianas, datan de la década de los '50, con los trabajos de Shull y Löwdin [50] y Holøien [51]. Se trataba de investigaciones relacionadas con los estados ligados de átomos de dos electrones activos, empleando como base lo que se conocería luego como Sturmians Coulombianos. Fue Rotenberg [52] quien acuñó la definición de *Sturmian*, señalando su conexión con la teoría de Sturm–Liouville. Glöckle y colaboradores trabajaron con lo que denominaron estados Weinberg, que son, de hecho, Funciones Sturmianas, en problemas de dispersión [53]. Goscinski replanteó a las Funciones Sturmianas como soluciones de una ecuación de Schrödinger con una energía definida externamente, tomando como autovalor la magnitud de un dado potencial [54, 55]. En dichos trabajos solamente se estudian las funciones de energía negativa, y no se esboza un esquema que permita generarlas. El estudio formal de Goscinski considera Funciones Sturmianas, en principio, de un número arbitrario de partículas, y su aplicación es fundamentalmente en el dominio de los sistemas atómicos y moleculares ligados [55].

Las Funciones Sturmianas de energía negativa, han visto amplia aplicación en cálcu-

los de tipo *ab-initio* para átomos multielectrónicos y sistemas moleculares, como se aprecia en la referencia [55] y las referencias allí presentes. Su uso facilita tasas de convergencia rápidas en las expansiones de átomos polielectrónicos [50, 51, 56]. En cuanto al uso de Sturmians de energía positiva, pueden mencionarse los trabajos de G. Rawitscher [57] y R. Szmytkowski [58]. En años recientes, el grupo de Física Atómica de la Universidad Nacional del Sur ha generalizado el trabajo de G. Rawitscher, proponiendo diversos métodos con los que generar conjuntos de base Sturmianos [59, 37, 60] de valores complejos y comportamiento asintótico entrante o saliente.

Durante este trabajo se utilizó la experiencia previamente adquirida por el grupo en cuanto a Funciones Sturmianas, a la vez que se aportaron conocimientos nuevos. Se presenta en la sección 1.2 un compendio de sus propiedades matemáticas fundamentales, señalando cuáles de éstas las convierten en herramientas útiles para el estudio de problemas físicos. Asimismo, se discute en profundidad una metodología numérica desarrollada en el marco de esta tesis. La misma se basa en un esquema de diferenciación lagrangiano y posee grandes prestaciones y potencialidades. Posteriormente se analizan distintos problemas de aplicación de la base para establecer y mejorar su rendimiento.

1.2. Propiedades generales

Comenzaremos por proporcionar la ecuación que define a las Funciones Sturmianas Generalizadas:

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \nabla^2 + \mathcal{U}(r) - E_s \right] Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \frac{S_{l,n}(r)}{r} = -\beta_{l,n} \mathcal{V}(r) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \frac{S_{l,n}(r)}{r}, \quad (1.1)$$

donde $Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$ son los denominados Armónicos Esféricos [61, 62, 63], autoestados del operador de momento angular. Esta separación en una parte angular y otra radial es posible dado que los potenciales $\mathcal{U}(r)$ y $\mathcal{V}(r)$ son únicamente dependientes de la distancia r al origen. Para la función $S_{l,n}(r)$ esto representa

$$[\mathcal{T}_l + \mathcal{U}(r) - E_s] S_{l,n}(r) = -\beta_{l,n} \mathcal{V}(r) S_{l,n}(r), \quad (1.2)$$

siendo $\mathcal{T}_l = -\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}$. La ecuación (1.2) es similar a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. La diferencia subyace en que en (1.2) el autovalor interviene como peso $\beta_{l,n}$ de un potencial dado, siendo la energía E_s un parámetro fijado exter-

namente. Para determinar completamente un conjunto de autofunciones necesitamos imponer dos condiciones de contorno. En el origen forzamos la regularidad del conjunto, es decir,

$$S_{l,n}(r=0) = 0. \quad (1.3)$$

En la región externa, donde $r > R$, la ecuación radial (1.2) se reduce a:

$$[\mathcal{T}_l + \mathcal{U}(r) - E_s] S_{l,n}(r) = 0. \quad (1.4)$$

Puede imponerse entonces una forma asintótica, $S_{l,n}(r) \rightarrow f_{as}(r)$, que sea compatible con la ecuación (1.4). Dependiendo de la energía E_s y el potencial $\mathcal{U}(r)$ serán las elecciones posibles de $f_{as}(r)$.

A continuación, se listan algunas posibles $f_{as}(r)$ de interés físico. Suponiendo que $\mathcal{U}(r)$ tenga comportamiento asintótico coulombiano y la energía sea positiva:

$$f_{as}(r) = c_+ H_l^+(Z, k, r) + c_- H_l^-(Z, k, r), \quad (1.5)$$

es decir, una combinación de las soluciones con condición de flujo entrante $H_l^-(Z, k, r)$, saliente $H_l^+(Z, k, r)$. No es estrictamente necesario que la carga Z de la condición asintótica coincida con la carga que se percibe a grandes distancias en el potencial $\mathcal{U}(r)$. Este detalle se explotará más adelante en la tesis, en el estudio de la ionización simple en problemas de tres cuerpos.

Si en cambio la energía fuese negativa, la forma asintótica físicamente aceptable sería:

$$f_{as}(r) = e^{-kr - \frac{ZZ_e}{k} \log(2kr)}. \quad (1.6)$$

Una situación diferente se encuentra en los problemas confinados armónicamente, es decir por un potencial $\mathcal{U}(r) \rightarrow \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. Las funciones no se extienden indefinidamente, sino que están moduladas por una exponencial gaussiana:

$$f_{as}(r) = e^{-\frac{1}{2}m\omega r^2}. \quad (1.7)$$

Siendo las funciones Sturmianas solución de un problema de Sturm–Liouville (de allí su nombre), satisfacen una relación de ortogonalidad pesada por el potencial generador $\mathcal{V}(r)$:

$$\mathcal{V}_{n'n} = \int_0^\infty S_{l,n'}(r) \mathcal{V}(r) S_{l,n}(r) dr \propto \delta_{n',n}, \quad (1.8)$$

así como una relación de clausura:

$$\sum_n \frac{S_{l,n}(r') \mathcal{V}(r) S_{l,n}(r)}{\mathcal{V}_{n,n}} = \delta(r - r'). \quad (1.9)$$

Esta expresión de la relación de clausura fue presentada por O. Goscinski [54]. En trabajos previos del grupo [41, 37, 64, 36] se ha empleado una expresión similar pero sin el factor $\frac{1}{\mathcal{V}_{n,n}}$. En estos casos se asume que las funciones Sturmianas se encuentran normalizadas de manera tal que la relación de ortogonalidad (1.8) adopte estrictamente la igualdad con una delta de Kronecker. Otra opción es normalizar las funciones de manera tal que en la región asintótica se comporten estrictamente como la función asintótica $f_{as}(r)$. Esto puede resultar de utilidad para los problemas de dispersión, como se verá más adelante.

Para los casos de $f_{as}(r)$ con flujo no nulo los autovalores del problema resultan complejos. Por tanto, las funciones están verificando una ecuación de Schrödinger con un potencial complejo, hecho que implica la creación de flujo saliente ($H_l^+(Z, k, r)$) o entrante ($H_l^-(Z, k, r)$) de corriente de probabilidad [61].

Es importante destacar que la proyección sobre los elementos de la base GSF, como por ejemplo en (1.8) no lleva conjugación compleja [44], hecho que permite que ciertas integrales oscilatorias de extensión espacial infinita posean un valor definido [36].

En los próximos apartados se ilustrará la forma y las propiedades de algunos tipos de bases Sturmianas utilizados significativamente en esta tesis doctoral.

1.2.1. Sturmians: $\mathcal{V}(r)$ concentrado

Estos potenciales generadores han sido los más extensamente utilizados por el grupo, tanto para calcular estados ligados [37, 64, 59] como para problemas del continuo [41, 36].

El potencial más emblemático de este estilo es una forma apantallada del potencial coulombiano:

$$\mathcal{V}(r) = \frac{e^{-r/\alpha}}{r}. \quad (1.10)$$

Dado que la magnitud decrece exponencialmente con r , en (1.2) se alcanza el comportamiento asintótico rápidamente, si bien esto está modificado por la magnitud del autovalor $\beta_{l,n}$.

En el caso de energías positivas, en un gráfico de los autovalores en el plano complejo

(Fig. 1.1) se pueden evidenciar dos ramas principales. Una de ellas consta de estados cuyo autovalor posee parte real positiva: serán de tipo repulsivo, pues su amplitud cerca del origen es escasa. La otra clase se caracteriza por poseer autovalores de parte real negativa. Serán de tipo atractivo, concentrando oscilaciones cerca del origen.

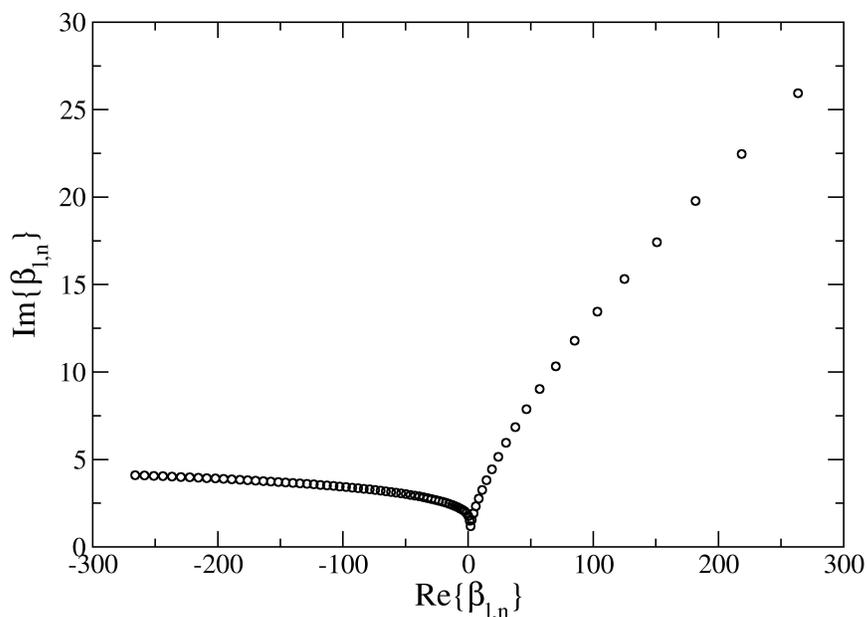


Figura 1.1: Autovalores del potencial de Yukawa para energía positiva (0.791)

Dado que $\mathcal{V}(r)$ no cambia de signo, la parte imaginaria de los autovalores deberá ser siempre positiva para estados con condición de onda saliente ($f_{as}(r) = H_l^+(Z, k, r)$), puesto que es justamente este término el que se ocupa de crear el flujo de partículas. En la figura 1.2 observamos dos autofunciones del continuo de un potencial de Yukawa. Una de tipo atractivo, en trazo continuo rojo y una de tipo repulsivo, en trazo a rayas azul. Se distingue claramente la manera de localizar las oscilaciones que presentan las funciones según el signo de la parte real del autovalor.

Para energías reales y negativas los potenciales generadores de tipo concentrado proporcionan bases sumamente adecuadas para resolver problemas de estados ligados. Los estados ligados del átomo de Helio en esta tesis se calcularon exclusivamente con bases de esta clase de potencial y energía negativa.

Otro potencial conocido de esta categoría es el de Hulthén, que posee resolución

analítica en onda S y será abordado en una sección posterior en gracia a dicha analiticidad.

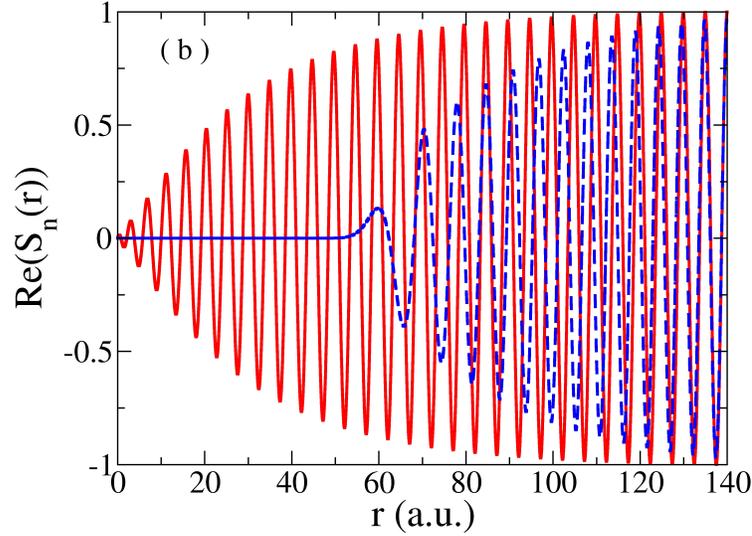


Figura 1.2: Base de tipo Yukawa

Un caso algo menos concentrado es el del potencial Coulombiano truncado, que posee el mismo tipo de singularidad en el origen que el potencial de Yukawa, pero su decrecimiento con r es más lento. Para energías positivas los Sturmians coulombianos serían divergentes como potencias de r [48], y por tanto el potencial generador debe truncarse si se desea obtener una base de estados del continuo físicamente aceptable. Los estados de energía negativa del potencial coulombiano, por otra parte, sí forman una base y han sido utilizados ampliamente en la literatura [65, 12, 51, 66, 9]. Sus características serán descritas en el apartado posterior sobre Sturmians analíticamente resolubles.

1.2.2. Sturmians: $\mathcal{V}(r)$ disperso

Este tipo de potenciales generadores proporcionan bases que guardan similitud con las de la energía. No obstante, se sigue tratando de potenciales que, fuera de un cierto radio, se anulan, con lo cual siguen siendo de corto alcance.

Son poseedores de una dinámica diferente a los Sturmians descritos en 1.2.1, puesto que no se localizan en una región particular del dominio radial. Su naturaleza se

puede comprender si se reescribe (1.2) considerando $\mathcal{V}(r) = 1$, un generador de tipo rectangular:

$$[\mathcal{T}_l + \mathcal{U}(r) - (E_s - \beta_{nl})] S_{l,n}(r) = 0 \quad (1.11)$$

Se podrá entonces apreciar la semejanza con los autoestados de la energía: el autovalor $\beta_{l,n}$ ocupa un rol similar al de E_s . No obstante, fuera del rango del potencial generador, $r > R$, se tendrá que $\mathcal{V}(r)$ será cero y las funciones presentarán el mismo comportamiento asintótico dado por (1.4).

Los autovalores se ramifican en repulsivos y atractivos al igual que se mostró en la sección de inmediato anterior, pero aquí moldean de otra manera a las autofunciones: en el caso de potenciales generadores de tipo disperso los autovalores repulsivos corresponderán a frecuencias de oscilación más lentas mientras que los atractivos lo harán con las rápidas. Vemos en la figura 1.3 los autovalores correspondientes a una base de tipo disperso.

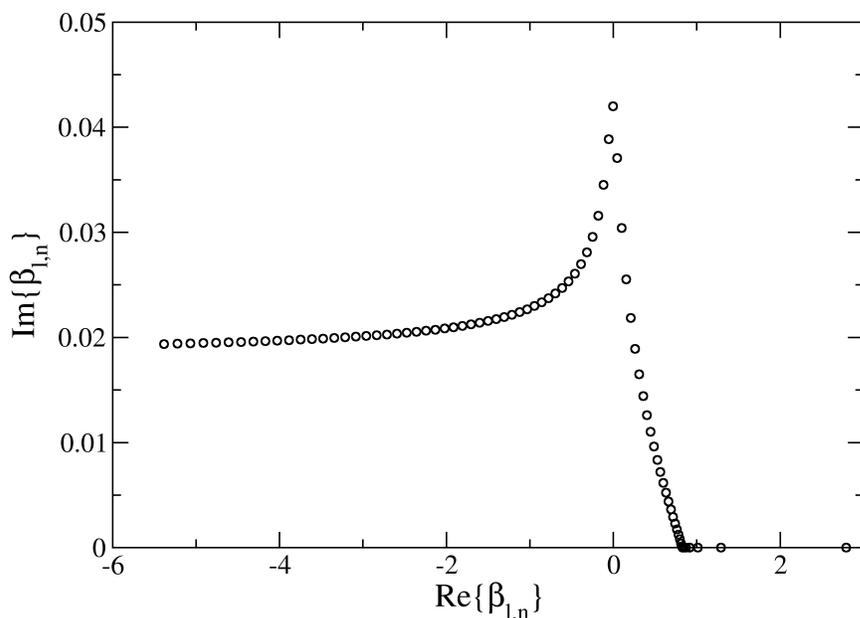


Figura 1.3: Autovalores del potencial rectangular para energía positiva (0.791)

A las dos clases ya mencionadas de autovalor es necesario añadir un tipo especial, apreciable para los potenciales $\mathcal{V}(r)$ dispersos cuando la energía es positiva. Para

comprender esta clase de autovalores particularizaremos el estudio, considerando un potencial rectangular $\mathcal{V}(r) = 1$, pero los argumentos serán válidos para cualquier potencial $\mathcal{V}(r)$ apreciable en una región del espacio donde $\mathcal{U}(r)$ también tenga presencia significativa. Se denominó a los estados de estas características *pseudoligados*, siendo los mismos por ser numéricamente coincidentes con estados ligados de $\mathcal{U}(r)$ aún cuando se haya impuesto una condición asintótica de tipo onda saliente. Se distinguen de los de tipo repulsivo o atractivo por la fase de su autovalor: su parte imaginaria es comparativamente muy pequeña respecto de la real, estando prácticamente posados sobre el eje real positivo si la energía E_s es real. Estos elementos de base son tales que $(E_s - \beta_{nl})$ se corresponde con un autovalor ligado del potencial auxiliar $\mathcal{U}(r)$.

Una forma de asegurar que los elementos *pseudoligados* estén siempre incluidos en la base consiste en seleccionar los Sturmians en orden ascendente según la parte imaginaria de su autovalor. Dado que los *pseudoligados* presentan fases y partes imaginarias muy pequeñas, serán los primeros seleccionados por este criterio. Se halló que los elementos *pseudoligados* toman existencia cuando el alcance del potencial generador excede apreciablemente al del auxiliar, siendo el auxiliar de tipo atractivo. Los *pseudoligados*, al asemejarse a autoestados de la energía, van creciendo en extensión espacial conforme más excitados son, llegando un punto en que pasan a percibir el alcance limitado del potencial generador así como las condiciones asintóticas salientes. En esta situación se observa que los autovalores comienzan a difuminarse con los de tipo repulsivo. Mostramos en la figura 1.4 elementos de base de energía positiva de un potencial rectangular y un auxiliar de tipo coulombiano atractivo, incluyendo un elemento repulsivo, uno atractivo y uno *pseudoligado*.

Según se mostrará más adelante en la presente tesis, los elementos *pseudoligados* resultan importantes en la resolución de problemas de tres cuerpos donde están abiertos los canales de simple ionización. Dentro de la clase de potenciales generadores extendidos podemos encontrar también al de Woods-Saxon, utilizado en trabajos de G. Rawitscher [67, 57], cuya forma funcional es:

$$\mathcal{V}(r) = \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R_{ws}}{\alpha_{ws}}}}. \quad (1.12)$$

Este potencial puede considerarse una versión suave del pozo rectangular, con un radio máximo R_{ws} y un decaimiento exponencial cuya rapidez viene dada por α_{ws} . Se

puede establecer una analogía entre las bases de tipo disperso y las bases de Fourier: ambas edifican una solución aportando, a grandes rasgos, una frecuencia de oscilación cada elemento.

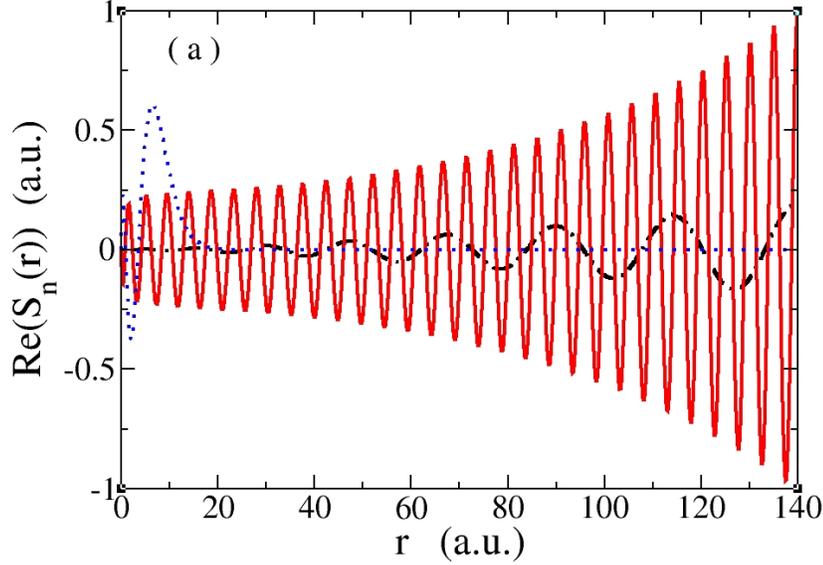


Figura 1.4: Funciones Sturmianas asociadas a un potencial generador de tipo rectangular.

1.2.3. Sturmians: $\mathcal{V}(r)$ híbrido

Las dos clases de potencial generador presentadas hasta ahora podrían pensarse como los casos límite de una más general, con la posibilidad de tener un pronunciamiento importante en las proximidades del origen a la par que una extensión espacial que abarque todo el dominio radial considerado.

Ejemplos sencillos de potencial híbrido podrían ser:

$$\mathcal{V}(r) = A + B \frac{1}{r} \quad (1.13a)$$

$$\mathcal{V}(r) = A \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R_{ws}}{\alpha_{ws}}}} + B \frac{e^{-r/\alpha}}{r} \quad (1.13b)$$

La primera combinación extendería su potencia de expansión estrictamente a todo el dominio, mientras que en la segunda la idea es fijarle un alcance del orden de R_{ws} . Ambas poseen un término de gran peso en el origen, cuyo efecto es entregarle a la base la capacidad de expandir funciones de rápida oscilación allí. La proporción entre las constantes A y B sirve para regular el grado de concentración/dispersión de la base

resultante.

En este tipo de potencial también puede darse la presencia de elementos *pseudoligados*. Una argumento teórico sobre la presencia de esta clase de funciones se detalla en el apéndice B. La discusión allí presentada se realizó teniendo en cuenta potenciales generadores de tipo híbrido, pero los argumentos contienen también al caso de los *pseudoligados* en potenciales extendidos.

No han sido empleados aún por el grupo estos generadores para problemas de dispersión de tres cuerpos, pero es posible suponer que podrían proporcionar una base de rendimiento comparable a la del potencial rectangular. Los *pseudoligados* de esta base ya no serían coincidentes con autoestados de la energía del potencial $\mathcal{U}(r)$, pero la ganancia sería en cuanto a disponer de oscilaciones concentradas en el origen para caracterizar variaciones allí.

1.3. Ejemplos analíticos de bases Sturmianas

Se analizarán en esta sección dos tipos de funciones Sturmianas de expresión analítica conocida. Las primeras, denominadas Funciones Sturmianas Coulombianas han sido utilizadas exhaustivamente en el campo de la física atómica, tanto en la obtención de autoestados de sistemas ligados como en las metodologías Close Coupling [68, 18] y J–Matrix [9, 7, 12, 13] para el continuo. Sobre las segundas, cuyo potencial generador es el de Hulthén [69, 70], se realizó un estudio intensivo [36].

1.3.1. Funciones Sturmianas Coulombianas

Describiremos a continuación un conjunto de funciones que ha visto extensísimo uso: las Funciones Sturmianas Coulombianas. Tomando un potencial generador de tipo coulombiano y energía negativa se puede obtener este tipo de funciones. A diferencia de los autoestados coulombianos de la energía, los Sturmians coulombianos constituyen una base completa sin requerir elementos del continuo.

Su expresión formal, normalizada, es

$$S_{l,n}(r) = \sqrt{\frac{(n+2l)!}{(n-1)!}} (2\lambda r)^{l+1} e^{-\lambda r} L_{n-1}^{2l+1}(2\lambda r), \quad (1.14)$$

siendo los autovalores

$$\beta_{l,n} = -(n+l)\lambda. \quad (1.15)$$

En las aplicaciones mencionadas, para sistemas ligados [51, 50] como para el continuo [9, 7], se utiliza para regular la extensión de los orbitales tipo Laguerre al parámetro λ , tal como se expresó en (1.14). Puede emplearse como parámetro la energía de ligadura (negativa) correspondiente a dichos orbitales, reemplazando de acuerdo a $\lambda = \sqrt{-2\mu E}$ allí.

El comportamiento asintótico de las Funciones Sturmianas Coulombianas es dependiente del autovalor. Por este motivo, en el cálculo de energías de sistemas ligados se han obtenido mejores resultados [48] reemplazando los Sturmians Coulombianos por Sturmians Generalizados de energía negativa y potencial generador de corto alcance.

Las metodologías de tipo J–Matrix utilizan estas funciones para construir funciones con el comportamiento asintótico senoidal o cosenoidal a grandes distancias [9, 7]. En el cálculo de sistemas ligados las funciones Sturmianas Coulombianas u Orbitales de Laguerre han visto extensísimo uso [50, 51]. En sus dos libros, [55, 71], Avery y Avery construyen una base de N electrones en base a este tipo de Sturmians. Las aplicaciones de Avery y Avery se abocan principalmente a los estados ligados de átomos multielectrónicos así como moléculas.

En cuanto a las funciones coulombianas de energía positiva, mencionaremos que Szymtkowski [58] demostró que, si su condición asintótica es estacionaria, poseen un espectro continuo. Más aún, si el autovalor tuviese parte imaginaria no nula las funciones serían divergentes como $r^{Im\{\beta\}}$ y por ende no serían físicamente aceptables.

1.3.2. Autovalores y autofunciones del potencial de Hulthén

El potencial de Hulthén es un caso particular de los denominados potenciales de Eckart [69]. Parte de su utilidad radica en que se asemeja a un potencial apantallado, como el de Yukawa, pero a diferencia de éste, el de Hulthén sí posee resolución analítica para el caso de momento angular cero. Su definición es:

$$\mathcal{V}(r) = \mathcal{V}_0 \frac{e^{-r/a}}{1 + ce^{-r/a}}, \quad (1.16)$$

donde $a > 0$ es un parámetro que marca el grado de apantallamiento, $c = -1$ y $\mathcal{V}_0 < 0$. El potencial de Hulthén es claramente de corto alcance: se comporta coulombianamente ($-Z/r$ si se elige como peso $\mathcal{V}_0 = -Z/a$) a distancias pequeñas y decae exponencialmente para valores grandes de r . A causa de su corto alcance, y en contraposición

con el caso Coulombiano, el potencial de Hulthén puede albergar un número finito de estados ligados.

Para el problema de autovalores de la energía existe una solución analítica conocida en onda S ($l = 0$); no así para otros valores del momento angular [72, 70, 69]. Lo mismo vale para el problema de autovalores del potencial, es decir, la ecuación (1.2). Este potencial fue estudiado en profundidad en [36], donde se analizaron las propiedades matemáticas de las bases GSF.

Las autofunciones de condición asintótica saliente vienen dadas por:

$$S_n(r) = N_n e^{ikr} {}_2F_1(-n, -2iak + n, -2iak + 1, e^{-r/a}), \quad (1.17)$$

y sus correspondientes autovalores son:

$$\beta_n^{(0)} = -\frac{n(-2iak + n)}{2\mu a^2}, \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (1.18)$$

La discretización proviene de haber forzado la condición asintótica saliente a grandes distancias así como la regularidad en el origen. La función ${}_2F_1(a, b, c, z)$ es conocida como Hipergeométrica de Gauss [73]. Para satisfacer la condición de regularidad en el origen, el primer argumento de ${}_2F_1(a, b, c, z)$ queda reducido a un entero negativo. En consecuencia, la serie que define a ${}_2F_1(a, b, c, z)$ se ve truncada, quedando limitada a un número finito de términos. Es decir, se convierte en un polinomio. A grandes distancias se verifica, $e^{-r/a} \rightarrow 0$ y ${}_2F_1(-n, -2iak + n, -2iak + 1, e^{-r/a}) \rightarrow 1$, cumpliéndose asintóticamente $S_{l,n}(r \rightarrow \infty) \propto e^{ikr}$. En [36] se tomó como normalización N_n para (1.17)

$$N_n = \frac{(-2iak + n)!}{(-2iak)!} \sqrt{\frac{(-2iak + 2n)}{n! \Gamma(n) a (-2iak + n)}}. \quad (1.19)$$

de manera tal que $\mathcal{V}_{n',n} = 1$ y la relación de clausura (1.9) se ve simplificada. Si el interés está en disponer de funciones que se comporten a grandes distancias estrictamente como e^{ikr} , entonces $N_n = 1$ será una mejor elección.

La estructura de (1.2) permanece similar si añadimos un potencial auxiliar de la forma $\mathcal{U}(r) = \mathcal{U}_0 \mathcal{V}(r)$. En este caso las autofunciones permanecen inalteradas, pero los autovalores experimentan un corrimiento dado por el peso \mathcal{U}_0 del potencial auxiliar.

$$\beta_n = \beta_n^{(0)} - \mathcal{U}_0 \quad (1.20)$$

El lector más interesado en los detalles formales es referido a la referencia [36].

1.4. Espectrograma de las Funciones Sturmianas

Con el fin de comprender en qué medida los distintos tipos de base podían servir para la resolución de problemas de dispersión se desarrolló un código capaz de reexpandir cada Función Sturmiana de un dado conjunto en una base de autoestados de energía de algún potencial arbitrario $U(r)$. Este trabajo es una continuación, si bien con un objetivo distinto, del desarrollo previamente llevado a cabo por Gómez, Gansano y Mitnik [74]. Su estudio permitía conocer en qué medida una dada GSF se compone de las diversas autofunciones de energía del potencial coulombiano. El interés aquí está desplazado a obtener no una descomposición espectral de las GSF en *todo su dominio radial* sino información detallada de cómo dicha composición varía con la coordenada r . Luego, tomando aquella información, se evalúan colectivamente las capacidades de toda una base GSF para expandir soluciones con distintos rangos de energía, y cómo esta capacidad varía con la coordenada radial.

Matemáticamente se puede expresar a cada Sturmian como combinación lineal de autofunciones de la energía de la siguiente manera:

$$S_{l,n}(r) = \int c(E) \varphi_E(r) dE. \quad (1.21)$$

Las funciones $\varphi_E(r)$ son los autoestados de energía de un dado potencial $U(r)$. Pueden existir estados discretos; estos representarían contribuciones deltiformes en la función $c(E)$. Del espectro de estados $\varphi_E(r)$ se selecciona un conjunto discreto por la imposición de condiciones de contorno de tipo caja en un dado dominio radial finito, adoptando (1.21) la siguiente estructura:

$$S_{l,n}(r) = \sum_q c_q^{l,n} \varphi_{E_q}(r). \quad (1.22)$$

Los coeficientes c_q se determinan mediante la relación

$$c_q^{l,n} = \int_0^R \varphi_{E_q}^*(r) S_{l,n}(r) dr. \quad (1.23)$$

En la implementación numérica se procede copiando la grilla radial donde está evaluado el Sturmian $S_{l,n}(r)$, a expandir, incluyendo el valor máximo de la coordenada, R . Se

define un potencial $U(r)$ del cual extraer los autoestados de energía. Con la discretización de la coordenada radial se aproxima la derivada segunda por diferencias finitas de segundo orden.

$$\frac{d^2 \varphi_{E_q}(r_i)}{dr^2} \approx \frac{1}{h^2} (\varphi_{E_q}(r_{i+1}) - 2\varphi_{E_q}(r_i) + \varphi_{E_q}(r_{i-1})) \quad (1.24)$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se aproxima por una ecuación en diferencias finitas. Imponiendo condiciones de borde nulas en $r = 0$ y $r = R$ se obtiene un problema de autovalores tridiagonal y simétrico, resoluble eficientemente con la rutina DSTEVSX de LAPACK [75]. Este procedimiento es, salvando la añadidura del potencial genérico $U(r)$, similar al empleado por Gómez y Mitnik [74] para obtener de manera rápida un conjunto de autoestados de energía. Disponiendo de la base $\varphi_{E_q}(r_i)$ se obtienen de manera numérica los coeficientes c_q por medio de (1.23).

La presente herramienta extiende a la preexistente en dos sentidos. Primero, es posible utilizar un potencial arbitrario $U(r)$ en lugar del caso Coulombiano. En segundo lugar, la descomposición en autoestados se realiza *por tramos* en la coordenada radial. Es decir, el intervalo radial es dividido en subintervalos y sobre cada uno de estos se efectúa la proyección de una dada GSF contra los autoestados de la energía. Entonces, por cada GSF y subintervalo se obtiene su composición en las diferentes energías. Con esta información podemos precisar de qué manera varía, con la coordenada radial, la capacidad de las GSF para caracterizar distintas energías. O, dicho de otra manera, es posible determinar si un conjunto de GSF será capaz de expandir apropiadamente la solución de un problema de dispersión en el dominio radial considerado. Este aspecto resulta de suma importancia a la hora de resolver problemas de dispersión, principalmente de tres cuerpos, como se discutirá en las secciones 4.1 y 4.3.

Para tratar la descomposición por tramos, definimos los coeficientes $c_{I,q}^{l,n}$ correspondientes a un dado subintervalo $[r_I - \Delta, r_I + \Delta]$:

$$c_{I,q}^{l,n} = \int_{r_I - \Delta}^{r_I + \Delta} \varphi_{E_q}(r) S_{l,n}(r) dr. \quad (1.25)$$

Los coeficientes $c_{I,q}^{l,n}$ de esta reexpansión en principio pertenecen al campo complejo, por lo cual en todos los análisis de esta sección se presenta su módulo.

En la figura 1.5 se puede observar la descomposición espectral de una GSF del potencial de Yukawa con autovalor de parte real negativa, es decir, de tipo atractivo.

La misma está generada en un intervalo de 90 u.a., que se subdivide en tramos de 10 u.a. para la descomposición espectral. Se puede apreciar que para radios progresivamente mayores el pico principal de energía (señalado con un trazo rojo) se desplaza hacia energías menores. Este comportamiento se debe al carácter atractivo de su autovalor, que genera un incremento de la frecuencia de oscilación donde mayor sea la presencia del potencial generador $\mathcal{V}(r)$. Conforme su influencia disminuye, la energía predominante se aproxima a la energía con la cual se generó dicha base, en este ejemplo 0.759 u.a..

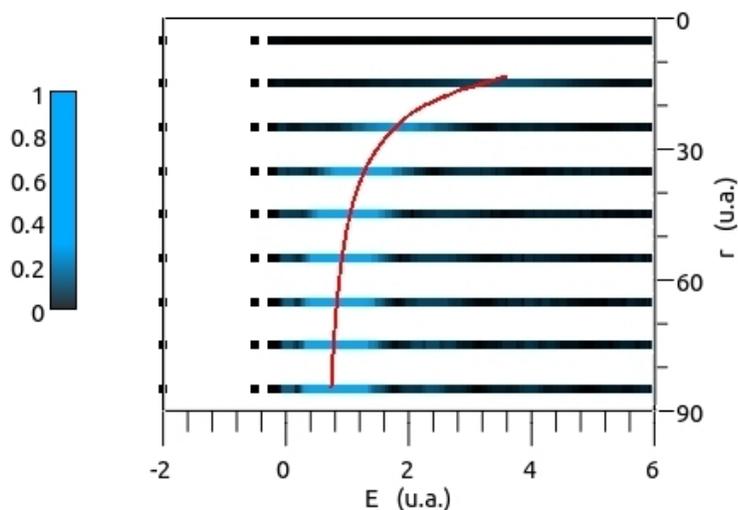


Figura 1.5: Espectrograma de una GSF correspondiente a un potencial de Yukawa. Su autovalor posee parte real negativa. De esta manera, la función presenta oscilaciones más rápidas donde el potencial generador es más significativo. El trazo rojo señala el desplazamiento de la energía predominante para los distintos intervalos radiales.

De manera similar se muestra en la figura 1.6 el espectrograma de una GSF de generador rectangular. Se hace evidente la presencia de una energía principal (señalada con un trazo rojo), predominante, y que la misma no varía apreciablemente conforme el radio aumenta.

Se aprecia sobre todo en la figura 1.5 un incremento de la amplitud de los coeficientes $c_{I,q}^{l,n}$ hacia valores mayores de la coordenada radial. El mismo se debe al crecimiento de la amplitud de oscilación que poseen las GSF dentro del intervalo en el cual fueron generadas y fue discutido en los apartados 1.2.1 y 1.2.2.

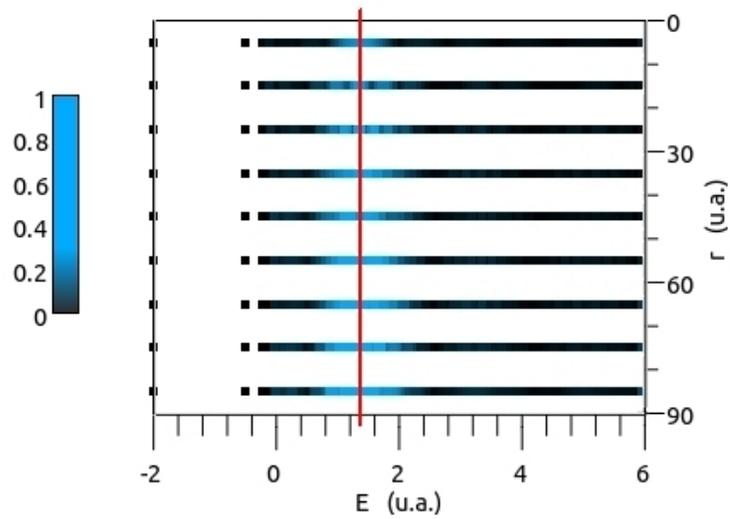


Figura 1.6: Espectrograma de una GSF correspondiente a un potencial de tipo rectangular. Las energías se agrupan más estrechamente que en el caso de la figura 1.5.

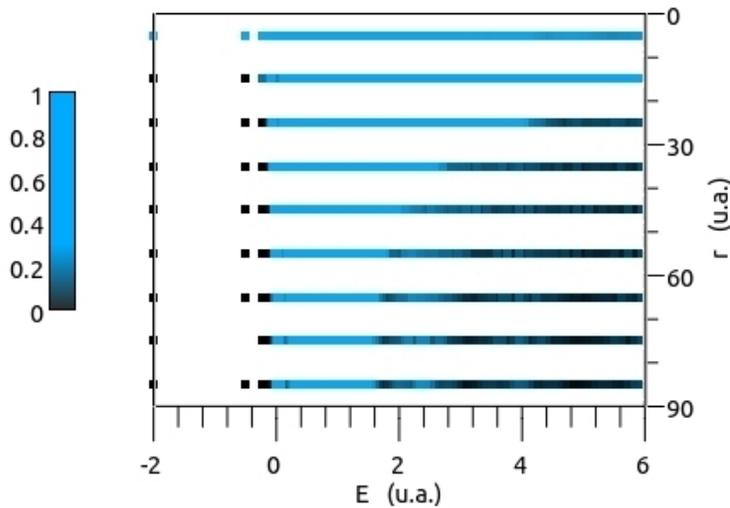


Figura 1.7: Espectrograma colectivo, base de Yukawa

El interés final de este apartado consiste en disponer de una herramienta capaz de caracterizar las capacidades de expansión de una base GSF *en su totalidad*. Esto no

puede hacerse simplemente considerando sus elementos en forma individual, sino que es necesaria alguna forma de analizar todo el conjunto. Con este propósito, por cada intervalo radial I y energía E_q , selecciona el $c_{I,q}^{l,n}$ de mayor peso de entre los calculados para cada GSF de la base. Así se compone, de manera colectiva, un espectrograma que proporciona información de las capacidades de la base *en su conjunto*. Finalmente, para negar los efectos de la amplitud creciente (por la creación de flujo saliente/entrante) hacia el extremo de la caja, en cada subintervalo radial I se efectúa una renormalización. De otra manera los espectrogramas siempre mostrarían un crecimiento de todas las amplitudes hacia R , que no revelaría información sobre las capacidades de expansión la base.

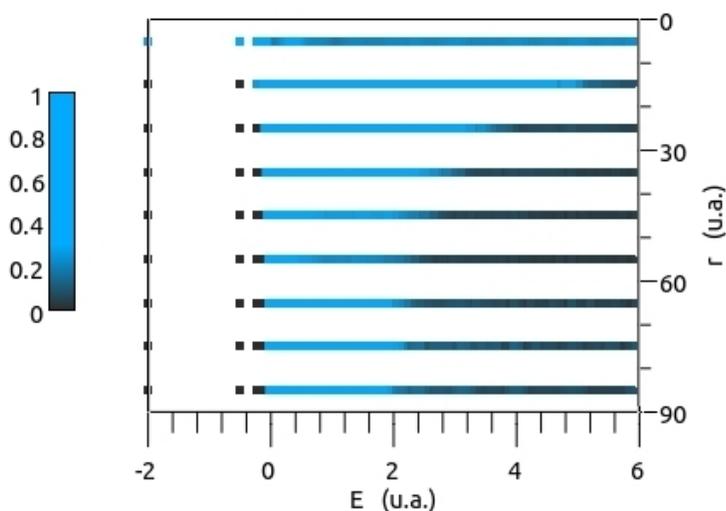


Figura 1.8: Espectrograma colectivo, base de potencial coulombiano truncado

Con la renormalización el espectrograma colectivo sí proporciona una fuerte visualización de la capacidad de expansión que presenta una dada base Sturmiana. Los coeficientes $c_{I,q}^{l,n}$ renormalizados en el espectrograma colectivo yacen en el intervalo $[0,1]$, pero se optó por presentarlos con una escala de saturación en 0.3. Es decir, que no discrimina por encima de este valor. Las figuras 1.7, 1.8, 1.9 y 1.10 condensan de manera muy sintética parte de las discusiones de los apartados 1.2.1, 1.2.2 y 1.2.3. En la figura 1.7 la base es de tipo Yukawa, con el parámetro $\alpha = 0,02$. Es claro que concentra la ca-

pacidad de caracterizar un amplio espectro de frecuencias en las regiones más próximas al origen.

Esta información se distorsionaría si en lugar de utilizar subintervalos radiales se efectúa una descomposición espectral en *el intervalo radial completo*. Se podría, erróneamente, suponer que una base posee la capacidad de expandir cierto rango de energías cuando verdaderamente esta capacidad es válida en una subregión de la coordenada radial.

En la figura 1.8 se muestra el espectro de una base Sturmiana cuyo potencial generador es de tipo Coulombiano truncado. Sería el caso límite de un potencial de Yukawa en el límite de alcance largo y truncado en el final del intervalo radial. Es apreciable que existe una mayor dispersión de la capacidad de expansión de la base, permitiendo a valores grandes del radio, caracterizar algunas energías más que el caso previo.

La base de potencial rectangular presenta un espectro muy regular en todo el dominio radial, graficado en la figura 1.9. El hecho de que posea amplias capacidades de expansión en toda la grilla resulta de interés para problemas de tres cuerpos, como se discute en la sección 4.2.

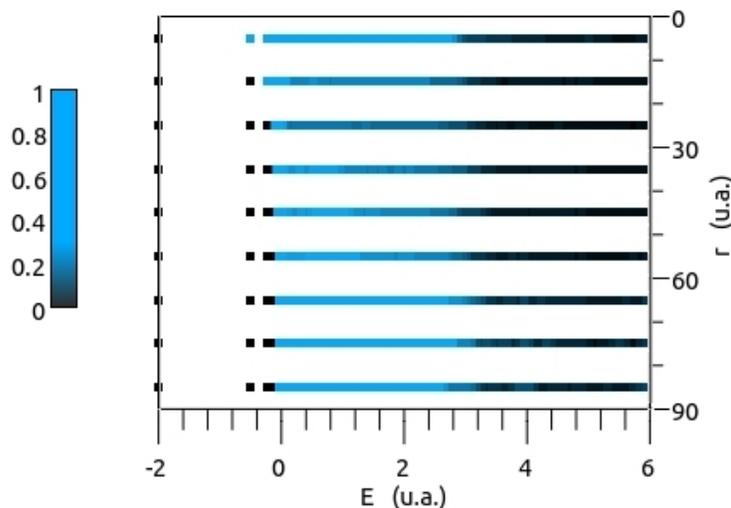


Figura 1.9: Espectrograma colectivo de una base de generador rectangular

Finalmente se muestra en la figura 1.10 el espectrograma colectivo de una base

generada con un potencial de tipo híbrido. Específicamente, uno de tipo Coulombiano sumado a uno rectangular. La base resultante combina una buena capacidad de expandir varias energías a distancias grandes mientras que cerca del origen se incrementa un parcialmente dicha capacidad. Este tipo de base presenta buenas perspectivas para ser utilizado en problemas de tres cuerpos, como se discute más adelante.

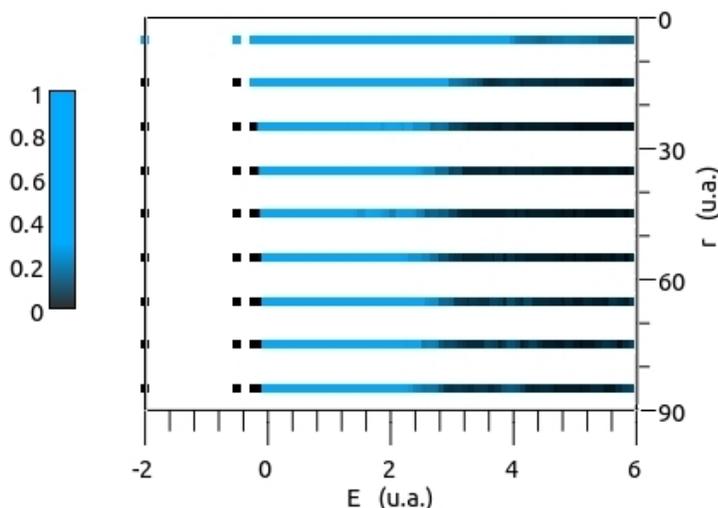


Figura 1.10: Espectrograma colectivo de una base cuyo generador es suma de un potencial rectangular y uno coulombiano.

La idoneidad de una base GSF depende fuertemente del problema que se desea resolver. Con los argumentos delineados en esta sección se ha establecido un criterio con el cual, es posible estimar de antemano si una dada base GSF es apropiada para resolver determinado problema del continuo. Existe la posibilidad de realizar estudios más exhaustivos con este código empleado para la confección de los espectrogramas. Para el estudio de bases aplicadas a sistemas confinados del tipo quantum-dot [76], la descomposición podría efectuarse, por ejemplo, en términos de estados de un oscilador armónico cuántico, utilizando sencillamente un potencial $U(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$ para crear las funciones $\varphi_E(r)$. Esta es una de las direcciones en las que se continuará el trabajo en los próximos años.

1.5. Metodología numérica : diferencias finitas de orden arbitrario

Durante el desarrollo de la presente tesis se diseñó y codificó una estrategia para generar funciones sturmianas. En este apartado se presentará la misma y se compararán algunos aspectos de otras formulaciones numéricas implementadas previamente por otros integrantes del grupo de investigación.

El corazón de la presente implementación numérica de resolución de (1.2) es la diferenciación lagrangiana. Es decir, se hace uso de fórmulas lagrangianas de diferenciación para obtener aproximaciones de alto orden a la derivada segunda en la ecuación (1.2). Comenzaremos por discretizar la coordenada radial r desde $r = 0$ hasta un valor máximo $r = R_{max}$.

Luego se propone que el Sturmian en cuestión será adecuadamente aproximado por un interpolante lagrangiano de n_s puntos, siendo n_s un número *impar*.

$$S_{l,n}(r) = \sum_{i=p_0}^{p_0+n_s-1} S_{l,n}(r_p) \prod_{\substack{k \neq p \\ k=p_0}}^{n_s+p_0-1} \frac{(r-r_k)}{(r_p-r_k)}. \quad (1.26)$$

Efectuando dos derivaciones respecto a r en (1.26) obtenemos:

$$\frac{d^2 S_{l,n}}{dr^2}(r_i) = \sum_{p=p_0}^{n_s+p_0-1} S_{l,n}(r_p) \sum_{\substack{j \neq p \\ j=p_0}}^{n_s+p_0-1} \frac{1}{(r_p-r_j)} \sum_{\substack{m \neq p,j \\ m=p_0}}^{n_s+p_0-1} \frac{1}{(r_p-r_m)} \prod_{\substack{k \neq p,j,m \\ k=p_0}}^{n_s+p_0-1} \frac{(r_i-r_k)}{(r_p-r_k)}. \quad (1.27)$$

Debe verificarse $p_0 \leq i \leq p_0+n_s-1$ para el índice i , puesto que de otra manera se estaría extrapolando. Dado un punto r_i perteneciente a la grilla, es posible tomar un intervalo de n_s puntos contiguos que contenga a aquel r_i . Entonces establecemos una relación entre la derivada segunda en un dado r_i en términos de los valores $S_{l,n}(r_p)$ $p = p_0, p_0+n_s-1$ y recordando que $p_0 \leq i \leq p_0+n_s-1$. De ser posible, se elegirán para la diferenciación $\frac{n_s-1}{2}$ puntos a cada lado de r_i a fines de disponer de una expresión centrada. Esto se logra tomando $p_0 = i - \frac{n_s-1}{2}$. Esta es la mejor opción, ya que las derivadas lagrangianas con grillado uniforme presentan menor grado de error mientras más centradas sean.

Definiremos una forma más compacta para (1.27):

$$\frac{d^2 S_{l,n}}{dr^2}(r_i) = \sum_{p=p_0}^{n_s+p_0-1} S_{l,n}(r_p) c_{i,p}^{(2)}. \quad (1.28)$$

Utilizando (1.28) transformamos la ecuación (1.2) en un problema matricial. Se introdujo, para trasladar la formulación a un entorno explícitamente matricial, el vector $\mathbf{S}_{l,n}$, y denotaremos su elemento i como $[S_{l,n}]_i$

$$-\frac{1}{2\mu} \sum_{p=i-\frac{n_s-1}{2}}^{i+\frac{n_s-1}{2}} c_{i,p}^{(2)} [S_{l,n}]_p + \left[\frac{l(l+1)}{2\mu r_i^2} + \mathcal{U}_i - E \right] [S_{l,n}]_i = -\beta_{l,n} [\mathcal{V}_i] [S_{l,n}]_i, \quad (1.29)$$

$$i = \frac{n_s-1}{2} + 1, \dots, N - \frac{n_s-1}{2} + 1.$$

No obstante, en los primeros y últimos $\frac{n_s-1}{2}$ puntos de la grilla radial no es posible utilizar trivialmente un esquema de diferencias centradas, puesto que estaríamos requiriendo puntos más allá de r_{N+1} o puntos $r < 0$.

Mostraremos primero cómo resolver la situación del origen. Se conoce que la función $S_{l,n}(r)$ es regular allí: $S_{l,n}(r=0) = 0$ de acuerdo con las condición de borde 1.3. Con esto en mente, para los primeros $i = 1, \dots, \frac{n_s-1}{2}$ puntos aproximaremos la derivada segunda con puntos del subconjunto $p = 0, n_s - 1$. En la sumatoria (1.28) tendremos que el término $p = 0$ es naturalmente cero. Explícitamente, para aquellos primeros $i = 1, \dots, \frac{n_s-1}{2}$ puntos tendremos:

$$-\frac{1}{2\mu} \sum_{p=0}^{n_s-1} c_{i,p}^{(2)} [S_{l,n}]_p + \left[\frac{l(l+1)}{2\mu r_i^2} + \mathcal{U}_i - E \right] [S_{l,n}]_i = -\beta_{l,n} \mathcal{V}_i [S_{l,n}]_i, \quad i = 1, \dots, \frac{n_s-1}{2}. \quad (1.30)$$

Para facilitar la comprensión, en la figura 1.11 se mostrará la esquina superior izquierda de la matriz resultante de la discretización del problema de autovalores. Aquí hemos definido la cantidad auxiliar $q = \frac{n_s-1}{2}$, y habiendo tomado $n_s = 7$, dicho auxiliar verifica $q = 3$. Los símbolos cuadrados con cruz indican en qué punto de la grilla se está evaluando la derivada segunda y los círculos indican qué otros puntos intervinieron en el interpolante. En particular, los círculos con un trazo vertical corresponden a posiciones donde el valor de $[S_{l,n}]_0$ es conocido por la condición de regularidad en el origen. A partir de $q + 1$ se puede emplear las expresiones centradas, como se observa de la figura 1.11.

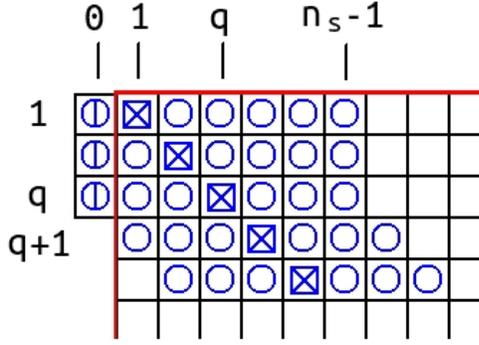


Figura 1.11: Descripción gráfica de la estructura de la matriz en su sector superior izquierdo, donde se impone la condición de regularidad en el origen. Los cuadrados representan los puntos de grilla donde se evalúa la derivada segunda y los círculos indican los puntos que se emplean para la diferenciación lagrangiana. Los círculos rayados, corresponden a r_0 ; allí se asume la nulidad de la función incógnita.

Trataremos ahora los $\frac{n_s-1}{2}$ puntos finales de la grilla radial. Puesto que aquí conocemos el comportamiento asintótico de las funciones buscadas, dictado por $f_{as}(r)$, utilizaremos esta información para poder extender la utilización del esquema centrado a puntos que en principio caerían fuera del dominio considerado. Al imponer sobre las $S_{l,n}(r)$ la forma dada por $f_{as}(r)$ a menos de una constante multiplicativa, podemos entonces plantear las siguientes relaciones:

$$\frac{S_{l,n}(r_i)}{S_{l,n}(r_{n_{max}})} = \frac{f_{as}(r_i)}{f_{as}(r_{n_{max}})}, \quad i = n_{max} + 1, \dots, n_{max} + \frac{n_s - 1}{2}. \quad (1.31)$$

Esta condición se reduce, en el caso $n_s = 3$ a imponer una derivada logarítmica en $r_{n_{max}}$. Implica (1.31) que $S_{l,n}(r_i)$, para $i = n_{max} + 1, \dots, n_{max} + \frac{n_s-1}{2}$, es $S_{l,n}(r_{n_{max}})$ multiplicado por una constante conocida, $\frac{f_{as}(r_i)}{f_{as}(r_{n_{max}})}$. Por tanto, se sigue aplicando (1.29) pero se deben introducir las siguientes sustituciones:

$$[S_{l,n}]_i = [S_{l,n}]_{n_{max}} \frac{[f_{as}]_i}{[f_{as}]_{n_{max}}} \quad (1.32)$$

En forma explícita, las últimas ecuaciones del sistema serán:

$$-\frac{1}{2\mu} \left(\sum_{p=i-\frac{n_s-1}{2}}^{n_{max}-1} c_{i,p}^{(2)} [S_{l,n}]_p + \tilde{c}_{i,n_{max}}^{(2)} [S_{l,n}]_{n_{max}} \right) + \left[\frac{l(l+1)}{2\mu r_i^2} + \mathcal{U}_i - E \right] [S_{l,n}]_i = \quad (1.33)$$

$$-\beta_{l,n} \mathcal{V}_i [S_{l,n}]_i, \quad i = n_{max} - \frac{n_s - 1}{2} + 1, \dots, n_{max}$$

con

$$\tilde{c}_{in_{max}}^{(2)} = \sum_{p=n_{max}}^{i+\frac{n_s-1}{2}} c_{i,p}^{(2)} \frac{[f_{as}]_p}{[f_{as}]_{n_{max}}}. \quad (1.34)$$

Haremos una clarificación gráfica similar a la presentada en la figura 1.11. Es conveniente definir aquí la cantidad $n_{tot} = n_s + \frac{n_s-1}{2}$, puesto que la grilla radial debe, en principio, extenderse hasta allí, aún cuando en la resolución matricial participen de manera directa los puntos $i = 1, \dots, n_s$.

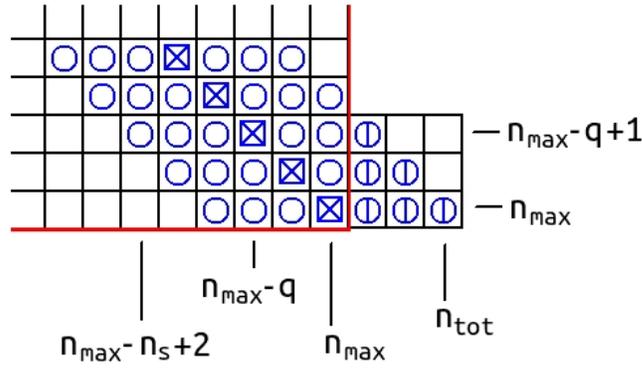


Figura 1.12: Descripción gráfica de la estructura de la matriz en su sector inferior derecho con la información asintótica tomada solamente de $r_{n_{max}+1}$. Los cuadrados representan los puntos de grilla donde se evalúa la derivada segunda y los círculos indican los puntos que se emplean para la diferenciación lagrangiana. Los círculos rayados, corresponden a $r_{n_{max}+1}$, que es donde se asume para la función incógnita el comportamiento asintótico dado por la ecuación (1.5).

La forma de introducir la información asintótica yacente fuera de R_{max} vía la ecuación (1.33) no es única. Aquella enfatiza el uso de las ecuaciones centradas. La alternativa que se describe a continuación busca utilizar la información asintótica solamente del punto $n_{max} + 1$. De esta manera la diferenciación se basa mayoritariamente en puntos interiores a la resolución directa ($i \leq n_{max}$) pero a la misma vez deja que en cada ecuación $i = n_{max} - \frac{n_s-1}{2}, \dots, n_{max}$ se introduzca información asintótica desde $i = n_{max} + 1$.

$$-\frac{1}{2\mu} \left(\sum_{p=n_{max}-n_s+2}^{n_{max}-1} c_{i,p}^{(2)} [S_{l,n}]_p + c_{in_{max}}^{(2)} \frac{[f_{as}]_{n_{max}+1}}{[f_{as}]_{n_{max}}} [S_{l,n}]_{n_{max}} \right) + \quad (1.35)$$

$$\left[\frac{l(l+1)}{2\mu r_i^2} + \mathcal{U}_i - E \right] [S_{l,n}]_i = -\beta_{l,n} \mathcal{V}_i [S_{l,n}]_i, \quad i = n_{max} - \frac{n_s-1}{2} + 1, \dots, n_{max}.$$

Presentamos en la figura 1.13 la estructura del extremo inferior derecho de la matriz resultante del empleo de (1.35).

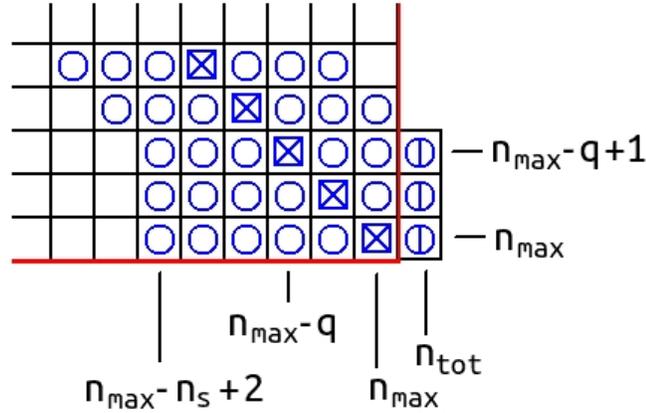


Figura 1.13: Descripción gráfica de la estructura de la matriz en su sector inferior derecho con la información asintótica tomada solamente de $r_{n_{\max}+1}$. Los cuadrados representan los puntos de grilla donde se evalúa la derivada segunda y los círculos indican los puntos que se emplean para la diferenciación lagrangiana. Los círculos rayados, corresponden a $r_{n_{\max}+1}$, que es donde se asume para la función incógnita el comportamiento asintótico dado por la ecuación (1.5).

El esquema (1.35) resulta apropiado para cuando se desean imponer condiciones de borde de tipo caja. Sería una aproximación dudosa imponer estas condiciones de borde con (1.33), puesto que aquí la solución física posee una derivada discontinua en R_{\max} , y en $r > R_{\max}$ es idénticamente nula. Un aproximante lagrangiano que tome *más de un punto* $r > R_{\max}$, no podría verificar exactamente estas condiciones. La forma (1.33), no obstante, entregaba resultados más precisos que (1.35) para las otras condiciones asintóticas, de manera tal que ambas resultan mutuamente complementarias para proporcionarle generalidad a la metodología de cálculo de la base Sturmiana.

Debido a que el paso entre puntos contiguos r_i y r_{i+1} es siempre el mismo, los coeficientes $c_{i,p}^{(2)}$ pueden calcularse de una vez y almacenarse en una matriz de $n_s \times n_s$. Todas las ecuaciones (1.29,1.30,1.33) se pueden reescribir como un sistema matricial, cuyas incógnitas serán los valores del sturmian $S_{l,n}(r_p)$ y los autovalores $\beta_{l,n}$:

$$[\mathbf{H}] \mathbf{S}_{l,n} = -\beta_{l,n} [\mathbf{V}] \mathbf{S}_{l,n}. \quad (1.36)$$

La ecuación (1.36) constituye un problema de autovalores, que se resuelve con la rutina ZGGEVX [75]. A lo largo de esta tesis se emplearon GSF con comportamiento

asintótico dado por $f_{as}(r) = H_l^+(r)$, la solución Coulombiana con comportamiento de onda saliente [61]. No obstante, la metodología es suficientemente general para permitir diferentes $f_{as}(r)$. Se implementaron, además de la condición de onda saliente, la entrante, la estacionaria con un defasaje o derivada logarítmica predeterminados, la condición tipo caja e incluso una de confinamiento por un potencial cuadrático. Esta última sería apropiada para el estudio de sistemas armónicamente confinados como los tratados en [76, 77].

Como un caso particular $n_s = 3$ este esquema de diferencias finitas contiene formalmente a la metodología desarrollada por Randazzo en su trabajo doctoral [48]. No obstante, las implementaciones numéricas difieren considerablemente, ya que aquel procedimiento está específicamente optimizado para explotar la forma tridiagonal y simétrica del esquema, de acuerdo con el algoritmo de Luk y Qiao [78]. De esta manera, dicho esquema compensa un menor orden de diferenciación con la posibilidad de utilizar grillados muy finos. El presente esquema está concebido bajo la idea fundamental de utilizar la rutina ZGGEVX. Debido a que el costo computacional se incrementa fuertemente con la cantidad de puntos de la discretización, la premisa fue la de explotar dichos puntos lo máximo que fuese posible, con las diferencias finitas que se han descrito. Veremos más adelante en esta sección que no es necesario incorporar una gran cantidad de puntos para obtener autovalores y autofunciones de muy buena precisión.

Si se observan las ecuaciones (1.30, 1.29 y 1.33) puede notarse que se está sacrificando la simetría de la matriz en el proceso. La consecuencia de esto es la aparición de algunos autovalores espurios. No obstante, se encontró de manera empírica que dichos valores espurios ocurren en pares conjugados, aún cuando las condiciones de contorno impuestas a través de $f_{as}(r)$ fueran reales. Esto hace fácil su eliminación de entre los autovalores buscados. Otro hecho que limitó su incidencia fue que correspondían a autovalores de índice n alto en el esquema de ordenamiento utilizado principalmente, ascendente por módulo de $\beta_{l,n}$.

Esta metodología, al utilizar la rutina de ZGGEVX, presenta una tolerancia completa al decrecimiento de la magnitud de $\mathcal{V}(r)$, puesto que en ningún momento se invierte la matriz diagonal de la discretización de $\mathcal{V}(r)$. Esto representa un progreso respecto al procedimiento presentado en [48, 37], que además constituye la inicialización del publicado en la ref. [60]. En la referencia [48] se denota la necesidad de añadir un pe-

queño valor constante cuando el potencial alcanza valores pequeños en la frontera del dominio, hecho que es completamente innecesario para en la presente implementación.

La metodología aquí introducida, al encontrar todos los autovalores que la discretización proporciona, y luego ordenarlos de acuerdo al criterio seleccionado, está exenta de un inconveniente que afecta a la técnica iterativa de la ref. [60]. Dicho procedimiento asume que los autovalores semilla con los que se inicia un proceso iterativo deben estar, en un entorno del valor correcto, puesto que de otra manera el método de corrección no es estable y las sucesivas iteraciones pueden apartarse definitivamente del resultado exacto. En consecuencia, se pierden pares autovalor–autovector que debería contarse en el conjunto de base.

n	$\beta_{0,n}$ analíticos	$\beta_{0,n}$ numéricos
1	1.50	0.14999999995E+01
2	3.50	0.34999999998E+01
3	5.50	0.54999999992E+01
\vdots	\vdots	\vdots
30	59.5	0.595000000005E+2
31	61.50	0.615000000005E+02
32	63.5	0.635000000005E+02
\vdots	\vdots	\vdots
98	195.50	0.1955000008E+03
99	197.50	0.197500002E+03
100	199.50	0.199500003E+03
\vdots	\vdots	\vdots
148	295.50	0.295502E+03
149	297.50	0.297502E+03
150	299.50	0.299502E+03

Tabla 1.1: Autovalores de la energía del oscilador armónico por el *método de la Sturmiana equivalente*. Para los primeros cien autovalores se observa un acuerdo de nueve cifras o más. Llegando al autovalor 150 el mismo decae a seis cifras, todavía aceptable. Se emplearon 800 puntos en esta resolución y el tiempo total de cálculo fueron 35 segundos en un procesador de 3.2 GHz. Se trabajó con $n_s = 25$.

Es necesario destacar otro aspecto interesante de esta formulación, que se relaciona con la naturaleza lagrangiana sobre la cual está edificada. Si bien la resolución matricial se efectúa con $i = 1, \dots, n_{max}$, estos puntos fueron concebidos como puntos de un esquema de interpolación, que verifica (1.26). Por ende, el método posee un esquema de interpolación natural. En concreto, permite la evaluación de los Sturmians resultantes en puntos arbitrarios de la grilla, siempre que estén contenidos dentro del los

extremos de la resolución. Se puede añadir a este respecto que el caso particular $n_s = 3$ desarrollado en [48] naturalmente asume un interpolante de tipo cuadrático.

Con la finalidad de mostrar la precisión que la metodología puede alcanzar aún con un número relativamente pequeño de puntos de grilla mostramos la resolución del problema del oscilador armónico esférico, reduciendo la ecuación (1.2) a la de Schrödinger tomando $E_s = 0$, $\mathcal{V}(r) = -1$ e imponiendo condiciones de borde de tipo caja. Con estos parámetros el código evaluador de GSF calcula autoestados de la energía. Este procedimiento fue denominado en [48] como *método de la Sturmiana equivalente*. Con 800 puntos de resolución y $n_s = 23$ se pueden obtener más de ciento cincuenta autovalores en buen acuerdo con sus contrapartes analíticas. Todo el proceso de cálculo, desde el armado de las matrices, la resolución del sistema lineal y la exportación insume 35 segundos en un procesador de 3.2 GHz.

Presentamos a modo de control de la convergencia de los autovalores generados por esta metodología el siguiente ejemplo. La tabla 1.2 muestra la variación porcentual de los autovalores de un potencial de Woods–Saxon al incrementar en 100 la cantidad de puntos de la resolución. Para este caso se tomó una energía $E_s = 0.735$ u.a., $\alpha_{ws} = 0.5$, $R_{ws} = 55.0$, $r_{max} = 60.0$ y condición asintótica de tipo saliente. En ambos rangos mostrados ($400 \rightarrow 500$ y $1100 \rightarrow 1200$) se observa que la variación es pequeña. Más aún al pasar de 1100 a 1200 puntos que de 400 a 500. Para nuestros propósitos los autovalores pueden aceptarse como convergidos. Podemos agregar que la resolución con 1200 puntos precisa 90 segundos en un procesador de 3.2 GHz.

Esta metodología de obtener GSF es particularmente óptima para potenciales similares a los cubiertos en las subsecciones 1.2.2 y 1.2.3. Menos óptima resulta para casos similares a los de la subsección 1.2.1, como por ejemplo, el potencial de Hulthén y el de Yukawa. Estos potenciales varían abruptamente cerca del origen, introduciendo oscilaciones muy rápidas en los Sturmians. Así, se requiere una mayor densidad de puntos para poder caracterizarlas. Se halla numéricamente que, a partir de cierto n , las funciones $S_{l,n}(r)$ tienen un crecimiento no natural en aquella región que las evidencia como falaces.

Existen dos soluciones para esta limitación. La primera, dado que se está utilizando un potencial muy concentrado que se torna asintótico rápidamente, utilizar un R_{max} más reducido, puesto que se estarán desperdiciando puntos en caracterizar el de ante-

mano conocido comportamiento asintótico. La segunda solución sí implica una variante en el código, consistente en utilizar un grillado no uniforme, en particular, más nutrido en la región próxima al origen. Este es uno de los aspectos que se discutirá en la siguiente subsección.

n	$n_{max} = 400 \rightarrow 500$	$n_{max} = 1100 \rightarrow 1200$
1	1.06E-5	0.17E-5
2	9.87E-5	0.16E-5
3	7.26E-5	0.12E-5
4	4.14E-5	0.66E-5
5	7.31E-5	0.12E-5
\vdots	\vdots	\vdots
50	4.66E-5	0.75E-5
51	4.75E-5	0.76E-5
52	4.84E-5	0.78E-5
53	4.93E-5	0.79E-5
54	5.02E-5	0.81E-5
55	5.12E-5	0.82E-5
\vdots	\vdots	\vdots
95	2.92E-5	0.14E-5
96	3.26E-5	0.15E-5
97	3.61E-5	0.15E-5
98	3.97E-5	0.14E-5
99	4.31E-5	0.15E-5
100	4.62E-5	0.15E-5

Tabla 1.2: Tasa de convergencia de los autovalores del potencial de Woods–Saxon. Se muestra la variación porcentual de los autovalores al agregar 100 puntos a la grilla. En ambos rangos mostrados se observa que la variación es pequeña. Más aún al pasar de 1100 a 1200 puntos. Para nuestros propósitos los autovalores pueden aceptarse como convergidos.

Se observó que, por el hecho de emplear la rutina ZGGEVX, este código era tolerante a la elección de potenciales $\mathcal{V}(r)$ estrictamente nulos a partir de algún radio dentro del intervalo $[0, R_{max}]$. Dicha restricción se aplicaba a la metodología presentada en [48, 37], que además constituye la inicialización del procedimiento presentado en [60].

1.5.1. Grillados generales

Se establecieron ya los lineamientos básicos del esquema de diferencias finitas de orden arbitrario. En principio, la expresión (1.26), no está restringida a grillados uniformes. Es posible, por tanto, trabajar discretizaciones más densas en una región y menos en otra. Una mayor concentración de puntos r_i cerca del origen permitirá una

mejor representación de los Sturmians similares a los del apartado 1.2.1, mientras que un grillado distribuido más homogéneamente se adaptará mejor a los del tipo 1.2.2. De las metodologías preexistentes en el grupo, únicamente aquella basada en B-Splines [79] puede naturalmente incorporar grillados variables. La metodología de diferencias finitas presentada por Randazzo [37, 48] así como la basada en el método de *shooting* [80, 81] presentada en [60] no pueden ajustarse a grillados variables puesto que la matriz Hamiltoniana resultante deja de ser simétrica, hecho del cual dependen ambos esquemas; el primero completamente y el segundo para la inicialización. Debe destacarse, no obstante, que estos métodos pueden con mayor liberalidad incrementar la densidad de puntos y no necesitar trabajar con grillados variables. El paso de un grillado uniforme a uno general implica un incremento en el costo en los coeficientes de diferenciación $c_{i,p}^{(2)}$, que deberán ser generados punto a punto teniendo en cuenta los r_p tomados para evaluar la derivada segunda en r_i . Ya no se podrá asumir que $c_{i,p}^{(2)}$ será un conjunto de $n_s \times n_s$ que se repetirá en todo el esquema. Aún con este incremento en el costo, el método resulta notoriamente más eficiente que uno de grillas uniformes. No es necesario aumentar de sobremanera la cantidad de puntos, sino simplemente en la región de interés. Esto da lugar a matrices \mathbf{H} y \mathbf{S} de menor tamaño y por tanto tiempos de operación menores de ZGGEVX. Se abre, por lo tanto, un grado de libertad sobre la distribución de los puntos de la grilla. Se implementaron varias alternativas al tipo de grillado uniforme. Describiremos las dos más significativas en cuanto a la flexibilidad que le otorgan al código para tratar con los tres arquetipos de potencial generador descritos anteriormente. Los llamaremos $r_s(i)$, donde s denota el tipo de grilla e i es un índice entero que cuenta los sucesivos valores de la coordenada radial. El caso uniforme, $r_0(i)$ es simplemente:

$$r_0(i) = h i, \quad i = 0, \dots, n_{tot}, \quad (1.37)$$

siendo $h = R_{max}/n_{max}$.

La propuesta siguiente contiene una mayor concentración de puntos cerca del origen, disminuyendo la densidad del grillado conforme crece la coordenada radial.

$$r_1(i) = h_{as} [(i_0^p + i^p)^{(1/p)} - i_0], \quad i = 0, \dots, n_{tot}. \quad (1.38)$$

En (1.38) la estructura es tal que el paso comienza muy pequeño y se va expandiendo hasta tomar un valor asintótico h_{as} cuando i excede a i_0 significativamente. La variable

p ajusta qué tan gradual o brusca es la transición al paso asintótico. Este esquema resultó sumamente eficiente para casos de $\mathcal{V}(r)$ concentrado. El valor de p que mejores resultados proporcionó fue 2. El parámetro h_{as} queda determinado por R_{max}, i_0 y p :

$$h_{as} = \frac{R_{max}}{[i_0^p + n_{max}^p]^{(1/p)} - i_0}. \quad (1.39)$$

En los casos donde $\mathcal{V}(r)$ presenta una amplitud apreciable al alcanzar $r = R_{max}$ se requiere de una mayor densidad de puntos allí. Dichas funciones presentan capacidad de expansión en aquella región, no habiendo alcanzado su régimen asintótico dentro del dominio de la resolución. Se necesita de un paso suficientemente fino con tal de caracterizar dentro del marco de grillado discreto, la discontinuidad del potencial generador al cruzar R_{max} y empalmar las funciones con su régimen asintótico.

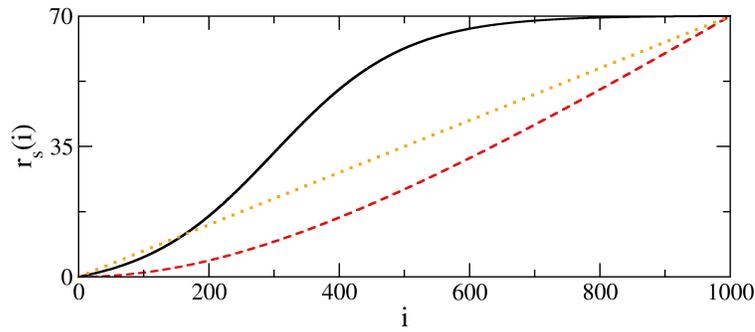


Figura 1.14: Ejemplos de los esquemas $r_s(i)$ empleados. El caso uniforme, $r_0(i)$ (trazo punteado amarillo), $r_1(i)$ (trazo segmentado rojo) y el de la tangente hiperbólica, $r_2(i)$ (trazo continuo negro).

Con la idea de poder concentrar a voluntad los puntos de la grilla cerca del origen, de R_{max} , o bien densificar el grillado cerca de ambos se desarrolló un esquema basado en la tangente hiperbólica. La misma posee un rango lineal y un rango asintótico de variación muy lenta. Regulando los parámetros incorporados se permite hacer uso de uno, del otro o de ambos simultáneamente. La discretización se traza como sigue:

$$r_2(i) = A_{th} [\tanh(\alpha_{th} I_{th}) + \tanh(\alpha_{th} (i - I_{th}))], \quad i = 0, \dots, n_{tot}, \quad (1.40)$$

donde las variables auxiliares definidas aquí son $A_{th} = \frac{R_{max}}{[\tanh(\alpha_{th} I_{th}) + \tanh(\alpha_{th} (n_{max} - I_{th}))]}$. El parámetro α_{th} regula la pendiente de la tangente hiperbólica e I_{th} indica en qué valor i de la grilla se tendrá centrado el régimen lineal de dicha función.

En la figura 1.14 vemos un ejemplo de cada una de las fórmulas para la coordenada radial en función de su índice i .

Recapitularemos brevemente las aptitudes de cada grillado. El uniforme, $r_0(i)$, se muestra idóneo para casos de $\mathcal{V}(r)$ disperso que no alcanzan R_{max} , como podría ser el potencial de Woods–Saxon. El esquema $r_1(i)$ representa la elección más indicada para generar Sturmians de potenciales de tipo concentrado y singular en el origen, como el de Yukawa, el Coulombiano o el de Hulthén. El $r_2(i)$ es aún más general: si bien se diseñó para potenciales generadores que alcanzan R_{max} con amplitud apreciable, como el pozo rectangular, variando los parámetros es posible generar grillados aptos para cualquier clase de $\mathcal{V}(r)$.

A modo de ilustración en la figura 1.15 presentamos un caso donde el potencial generador es de variación deliberadamente abrupta, que presentaría una exigencia extrema a la versión de grillado uniforme. Se empleó como potencial generador el de Hulthén, tomando $\alpha = 1.0$, $E_s = 0.5$, $l = 0$. La caja de la resolución se delimitó en 30 u.a. y se emplearon para la resolución 1200 puntos.

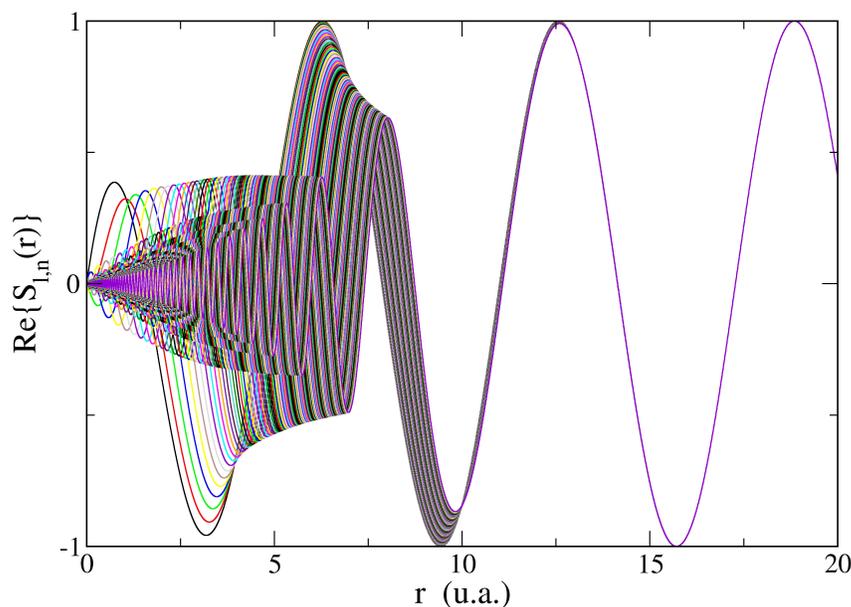


Figura 1.15: Primeras 120 autofunciones del potencial de Hulthén con $\alpha = 1,0$ y un radio máximo de 30 u.a.. Para esta resolución se emplearon solamente 1200 puntos. Se muestran las funciones hasta 20 u.a., puesto que son indistinguibles más allá. La resolución precisa solamente 90 segundos en un solo procesador de 3.2 GHz.

Este tipo de prueba es simplemente para mostrar la versatilidad del código, puesto que en aplicaciones habituales no se requiere semejante concentración de la base en una pequeña región del espacio. Queda de esta manera establecido que los potenciales de tipo concentrado no presentan un desafío para la metodología. Asimismo mostramos en la tabla 1.3 autovalores numéricos comparados con los analíticos correspondientes al mismo juego de funciones de la figura 1.15.

n	$\beta_{0,n}$ analíticos	$\beta_{0,n}$ numéricos
1	-0.50 + i 1.00	-0.499999999957 + i 0.99999999990
2	-2.00 + i 2.00	-2.000000000052 + i 2.00000000013
3	-4.50 + i 3.00	-4.500000000043 + i 2.99999999934
4	-8.00 + i 4.00	-8.0000000010 + i 4.0000000023
5	-12.50 + i 5.00	-12.4999999987 + i 4.99999999966
⋮	⋮	⋮
30	-450.00 + i 30.00	-450.000000005 + i 30.00000004
31	-480.50 + i 31.00	-480.499999997 + i 31.000000044
32	-512.00 + i 32.00	-511.999999992 + i 32.000000041
33	-544.50 + i 33.00	-544.499999998 + i 33.000000041
34	-578.00 + i 34.00	-577.999999998 + i 34.000000037
35	-612.50 + i 35.00	-612.499999975 + i 35.000000038
⋮	⋮	⋮
115	-6612.50 + i 115.00	-6612.500097 + i 115.000019
116	-6728.00 + i 116.00	-6728.00011 + i 116.00002
117	-6844.50 + i 117.00	-6844.50013 + i 117.000025
118	-6962.00 + i 118.00	-6962.00016 + i 118.000028
119	-7080.50 + i 119.00	-7080.50019 + i 119.000032
120	-7200.00 + i 120.00	-7200.00022 + i 120.000036
⋮	⋮	⋮
148	-10952.00 + i 148.00	-10952.0043 + i 148.000094
149	-11100.50 + i 149.00	-11100.5044 + i 149.000021
150	-11250.00 + i 150.00	-11250.0043 + i 149.999924

Tabla 1.3: Autovalores del potencial de Hulthén con $\alpha = 1,0$. Este valor impone una concentración muy fuerte de las oscilaciones de la base hacia el origen, como se mostró en la figura 1.15. Se utilizó el esquema de discretización $r_1(i)$. Los autovalores analíticos de este ejemplo son de parte imaginaria entera y parte real semientera, facilitándose la contrastación directa de los obtenidos numéricamente.

El paso más pequeño y más cercano al origen en esta resolución fue de 2.78E-005 u.a., mientras que el mayor y más lejano fue de 0.05 u.a., donde la longitud de onda de las Sturmianas es $\sim 2\pi$. Para poder contar con un paso como el inicial, la metodología de la referencia [60], de grillado uniforme, debería emplear alrededor de un millón de puntos. Se debe destacar también que la formulación de diferencias finitas

aquí presentada no precisa iteraciones de los autovalores y autovectores para lograr precisiones elevadas, hecho fundamental para la metodología de la misma referencia.

Ya hemos observado las ventajas en eficiencia obtenidas por utilizar grillados de tipo no uniforme. No obstante, éstos permiten una generalidad aún mayor: es posible seleccionar un conjunto de puntos r_i yacentes sobre un contorno complejo. Esta idea ya ha sido presentada en [82, 83]; la presente sería la primera implementación capaz de obtener, para potenciales $\mathcal{U}(r), \mathcal{V}(r)$ generales, funciones de base definidas en un contorno complejo, pero hasta la fecha ninguna de las implementaciones preexistentes ha sido adaptada para resolver un caso general de la ecuación con la coordenada rotada. Se disponía hasta el momento de dos alternativas más limitadas. Una de ellas consiste en aplicar, sobre alguna función de expresión analítica conocida, la rotación sobre la variable radial [74]. La restante, que se muestra en [82] se basa en rotar la energía E_s al plano complejo a partir de un dado radio. Esto último puede incluirse dentro del siguiente esquema, aún más general: el empleo de una energía compleja en *todo el dominio* y un potencial auxiliar que se encargue, hasta cierto rango, de cancelar su parte imaginaria. Más allá del mismo, la energía compleja podrá imponer el decrecimiento exponencial sobre las funciones, a la vez que, regulando la forma en la que el potencial auxiliar decrece, obtener un mayor control sobre la transición de régimen. También es posible, directamente, emplear un potencial auxiliar que adopte a partir de cierto radio un valor complejo, de absorción [61], para forzar el decrecimiento de las funciones de base. Son un objetivo de estudio los efectos de aplicar la rotación compleja sobre la coordenada o sobre la energía (directamente o vía el potencial auxiliar), ambas opciones posibles para la metodología presentada aquí.

La rotación de la coordenada radial al plano complejo puede imponerse, en principio, desde cualquier punto del dominio de resolución, estando o no dentro del alcance de $\mathcal{V}(r)$. Hemos hallado de particular utilidad al hecho de poder definir la rotación ligeramente dentro del rango $\mathcal{V}(r)$. La importancia de esta posibilidad se mostrará en la sección de aplicaciones a problemas de dos cuerpos. Resulta fundamental en aplicaciones de interés donde la energía del problema físico es distinta a la de la propia base. Es decir de esta manera se añaden verdaderamente las potencialidades del ECS a la formulación Sturmiana.

En cuanto a la definición del contorno complejo, la componente imaginaria de la

coordenada r no tiene incidencia alguna sobre la real. Se optó, por definir primero la parte real según alguno de los esquemas descritos previamente y luego, determinados aquellos puntos, de la parte imaginaria de r como función de la real. Se implementaron dos formas de escaleo complejo. Uno de tipo *sharp* (abrupto) y uno de tipo *smooth* (suave). La versión *sharp* simplemente impone una fase $e^{i\vartheta_{ecs}}$ a partir de algún valor R_{ecs} , siendo ϑ_{ecs} el ángulo que marca la dirección del contorno en el plano complejo.

$$\mathcal{I}\{r\} = \begin{cases} 0 & r < R_{ecs} \\ e^{i\vartheta_{ecs}} (\mathcal{R}\{r\} - R_{ecs}) & r \geq R_{ecs} \end{cases}, \quad (1.41)$$

mientras que para la forma *smooth* se eligió efectuar el paso al campo complejo siguiendo lo que se definió como una *circunferencia de transición*. La misma proporciona continuidad y diferenciabilidad al contorno, y permite acoplar suavemente el contorno en su parte puramente real con el mismo en su forma compleja con una angulación $\vartheta_{ecs} \in [0, \frac{\pi}{2}]$

$$\mathcal{I}\{r\} = \begin{cases} 0 & \mathcal{R}\{r\} < R_{ecs} \\ R_{circ} - \sqrt{R_{circ}^2 - (\mathcal{R}\{r\} - R_{ecs})^2} & R_{ecs} < \mathcal{R}\{r\} < R_{tr} \\ y_{tr} + e^{i\vartheta_{ecs}} (\mathcal{R}\{r\} - R_{tr}) & \mathcal{R}\{r\} \geq R_{tr} \end{cases}, \quad (1.42)$$

siendo $R_{tr} = R_{ecs} + R_{circ} \text{sen}(\vartheta_{ecs})$ e $y_{tr} = R_{circ}(1 - \cos(\vartheta_{ecs}))$. En la figura 1.16 se ilustra la manera en la que se determinan los parámetros auxiliares y_{tr} y R_{tr} en base a R_{ecs} y ϑ_{ecs} .

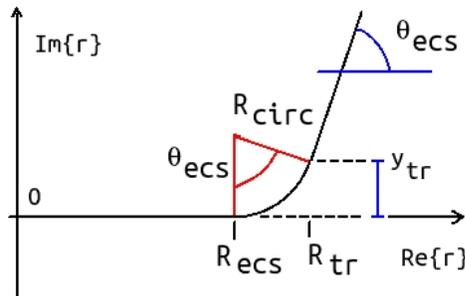


Figura 1.16: Ilustración de las variables auxiliares involucradas en el esquema de escaleo complejo de tipo *smooth*.

En la figura 1.17 mostramos las características de una base Sturmiana resuelta con

su coordenada radial rotada. El potencial generador es levemente apreciable dentro de la región de escaleo. De esta manera, posee cierta capacidad de expansión aún dentro de la región escaleada, aspecto que será de utilidad en la resolución de problemas de dispersión.

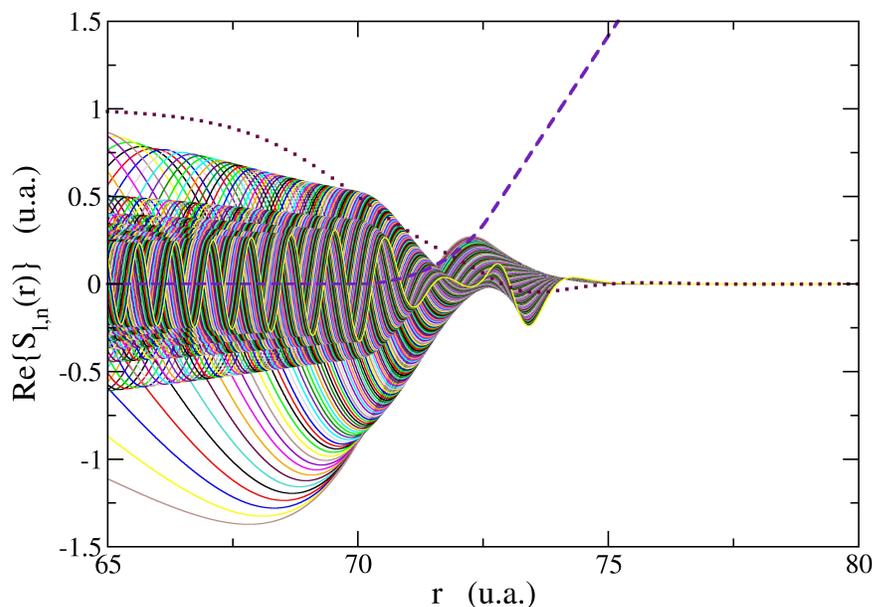


Figura 1.17: Parte real de las GSF obtenidas de un generador de tipo Woods–Saxon, utilizando una rotación compleja suave de la coordenada radial. Se muestra también el contorno de escaleo complejo (trazo a rayas) reducido en amplitud en un factor de 4 por para su visualización en el gráfico así como el potencial generador $\mathcal{V}(r)$ (trazo punteado) evaluado en el contorno complejo empleado en la obtención de la base.

Veremos en la sección 2.3 que la utilización de bases Sturmianas con rotación al complejo de la coordenada radial le otorga a la base resultante una mayor capacidad de lidiar con energías diferentes de la propia. Esta situación se encuentra forzosamente en la resolución de problemas de tres cuerpos con una base de tipo esférico (r_2, r_3) , y se estudiará en las secciones 4.2 y 4.3.

1.5.2. Proyecciones a futuro

Discutiremos en este apartado algunas posibilidades de implementación que dentro del marco temporal de la tesis no alcanzaron a ser exploradas, pero que en principio

resultan factibles para la metodología.

Es posible, con total naturalidad, incorporar en la ecuación diferencial derivadas primeras por medio de diferenciación Lagrangiana, propuesta válida tanto para grillos uniformes como no uniformes. El estudio realizado por Gómez [74] basado en las referencias [84, 85] sobre distintas implementaciones de la rotación compleja de la coordenada podría extenderse a cualquier potencial, momento angular y energía, a la par que contrastarse con los esquemas de rotación descritos en la sección previa.

Hemos discutido dos maneras de imponer las condiciones asintótica en R_{max} . No obstante, una sola forma se proporcionó para lidiar con la condición de regularidad en el origen, pero existe la posibilidad de modificar la imposición de la tal condición y, simultáneamente, conservar el uso de las expresiones centradas de diferenciación. La mejora consiste en extender el problema *en espejo* respecto del origen. Solamente sería necesario hacerlo para $\frac{n_s-1}{2}$ puntos, imponiendo la relación: $S_{l,n}(r_{-i}) = -S_{l,n}(r_i)$.

Una posibilidad que puede resultar eficiente consiste en implementar un grillado radial basado en puntos de cuadratura. Es decir, emplazar sobre el intervalo radial los nodos de algún esquema de cuadraturas, como de Gauss–Legendre o Gauss–Laguerre, y luego añadir entre nodos una cantidad prefijada de puntos.

Otro desarrollo factible para el código consiste en la añadidura de potenciales de tipo no local en el cálculo de la base Sturmiana. Esto se puede hacer tanto para el potencial auxiliar como para el generador en (1.2). Los detalles de esta formulación se exponen en el apéndice C.

Habiendo repasado las capacidades y proyecciones de la metodología podemos concluir entonces que se trata de una herramienta sumamente versátil y eficiente, a la par que abre un espectro de posibilidades considerable al permitir naturalmente la extensión al campo complejo de la coordenada radial.

Capítulo 2

Resolución de problemas de dispersión y optimización de la base

Discutiremos en este capítulo la aplicación práctica de las bases GSF a problemas de dispersión. Dado que dicha base es parte fundamental de la metodología *ab-initio* utilizada a lo largo de este trabajo, se destina la presente sección para una descripción de sus características operacionales. Las mismas establecen un conjunto de reglas básicas para su adecuada aplicación. De las optimizaciones que se discutirán a continuación, algunas son de inmediata utilidad para problemas de dos cuerpos, mientras que otras están orientadas al empleo de bases Sturmianas en problemas de tres. Detallaremos a continuación los aspectos esenciales de la teoría de dispersión que precisaremos para ilustrar el rendimiento de las bases GSF aplicadas a estos problemas. Comenzamos por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \nabla^2 + \tilde{V}(r) - E \right] \Phi(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.1)$$

y las condiciones de asintóticas apropiadas para determinar completamente la solución de dispersión:

$$\Phi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \gamma \log(kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}))} + f(\theta, \phi, k) \frac{e^{i(kr - \gamma \log(2kr))}}{r}, \quad (2.2)$$

con $\gamma = -\frac{Z\mu}{k}$, $k = \sqrt{2\mu E}$ la magnitud de la cantidad de movimiento, y Z la carga asintótica del potencial. Si el potencial es esféricamente simétrico, el Hamiltoniano conmuta con el operador momento angular y su proyección en un eje de cuantización. Resulta entonces conveniente descomponer la solución en una expansión en autoestados

del momento angular:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_l(r) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}). \quad (2.3)$$

A su vez, a las funciones $\varphi_l(r)$ las expresamos como

$$\psi_l(r) = \varphi_0(r) + \psi_{sc,l}^+(r), \quad (2.4)$$

siendo $\phi_0(r)$ solución estacionaria de

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + U(r) - E \right] \varphi_0(r) = 0. \quad (2.5)$$

Hemos descompuesto al dispersor $\tilde{V}(r) = U(r) + V(r)$ de (2.1) en una componente de corto alcance $V(r)$ y una de largo alcance $U(r)$. Arribamos finalmente a la ecuación que debemos resolver para determinar $\psi_{sc,l}^+(r)$:

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) + U(r) - E \right] \psi_{sc,l}^+(r) = -V(r)\varphi_0(r). \quad (2.6)$$

Se elaboró como parte del presente trabajo un código para resolver problemas de scattering utilizando funciones de base GSF. Este código resultó de utilidad para comprender y optimizar la base tanto para dos cuerpos como para, indirectamente, problemas de tres cuerpos. La ecuación más general que puede abordar el código es de la forma:

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + V_L(r) - E \right] \psi_{sc,l}^+(r) = -V_R(r)\varphi_0(r) \quad (2.7)$$

Es un caso más general que un problema de dispersión, que implicaría $V_L(r) = U(r) + V(r)$ y $V_R(r) = V(r)$.

Con el objeto de contrastar las funciones de dispersión obtenidas con método espectral se utilizó una implementación capaz de resolver directamente la ecuación (2.7) aplicando el esquema de diferenciación Lagrangiano descrito en la sección 1.5. Estos controles se realizan con grillas suficientemente densas, asegurando soluciones precisas y convergidas. El procedimiento de resolución directa se describe en el apéndice E.

2.0.3. Problemas de dispersión: formulación con la base GSF

Para obtener la solución de la ecuación (2.7) se propone una expansión de $\psi_{sc,l}^+(r)$ en términos de la base GSF:

$$\psi_{sc,l}^+(r) = \sum_{n=1}^{N_s} a_{l,n} S_{l,n}(r). \quad (2.8)$$

Introducimos (2.8) en (2.7) y hacemos uso de (1.2) para eliminar el operador diferencial de (2.7).

$$\sum_{n=1}^{N_s} a_{l,n} (V_L(r) - \mathcal{U}(r) - \beta_{n,l} \mathcal{V}(r) - (E - E_s)) S_{l,n}(r) = -V_R(r) \varphi_0(r) \quad (2.9)$$

Se proyecta luego contra cada elemento de base $S_{l,n'}(r)$, lo que nos permite reescribir (2.9) como un sistema lineal en los coeficientes $a_{l,n}$:

$$\mathbf{H}\mathbf{a} = -\mathbf{b}, \quad (2.10)$$

donde los elementos de la matriz \mathbf{H} y el vector \mathbf{b} son:

$$\mathbf{H}_{n'n} = \int_0^\infty dr S_{l,n'}(r) (V_L(r) - \mathcal{U}(r) - \beta_{n,l} \mathcal{V}(r) - (E - E_s)) S_{l,n}(r) \quad (2.11)$$

$$\mathbf{b}_{n'} = - \int_0^\infty dr S_{l,n'}(r) V_R(r) \varphi_0(r) \quad (2.12)$$

El sistema lineal se resuelve empleando la rutina ZGESV de la librería LAPACK [75]. Si la base GSF se encuentra normalizada a $H_l^+(Z, E, r)$, la amplitud de dispersión T_l puede ser factorizada trivialmente:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{N_s} a_{l,n} S_{l,n}(r) &\rightarrow \sum_{n=1}^{N_s} a_{l,n} H_l^+(Z, E_s, r) = \\ \left(\sum_{n=1}^{N_s} a_{l,n} \right) H_l^+(Z, E_s, r) &= T_l H_l^+(Z, E_s, r). \end{aligned} \quad (2.13)$$

La implementación es capaz de trabajar con bases GSF evaluadas en grillados variables como los descritos en la sección 1.5.1. Para ello, las integrales radiales se realizan por la regla trapezoidal basada en puntos espaciados arbitrariamente en la coordenada radial y que incluso pueden contener una rotación compleja. Los detalles de esta regla de integración se describen en el apéndice D.

2.1. Estrategias de optimización de la base GSF

En este apartado se describirá un conjunto de optimizaciones y conceptos que permiten obtener un mejor rendimiento de la base Sturmiana. Los mismos se derivaron de la experiencia en el uso de bases Sturmianas tanto en problemas de dos cuerpos como de tres. Dado que en problemas de dos cuerpos es posible hacer una evaluación más clara de los efectos de cada modificación, estos estudios se tratarán en el presente capítulo.

2.1.1. Concentración-dispersión

En esta sección se analizará la idoneidad de las bases Sturmianas para distintos arquetipos de problema de dispersión. Desde un punto de vista formal, cualquier elección de potencial generador dará lugar a una base completa. No obstante, lo acertado o desacertado de la misma permitirá o no resolver el problema en cuestión con un número reducido de funciones de base. Complementaremos con experimentos numéricos en problemas de dispersión los argumentos presentados en los apartados 1.2.1,1.2.2, Es de gran importancia poseer esta información para efectuar *educated guesses* a la hora de confeccionar bases para problemas de dos y tres cuerpos.

Comenzaremos con un problema cuyo dispersor es extremadamente concentrado en la vecindad del origen, específicamente $V_R(r) = -10\frac{e^{-\alpha r}}{r}$ y $V_L(r) = -10\frac{e^{-\alpha r}}{r} - \frac{-2}{r}$, siendo $\alpha = 1.3$. En este ejemplo, $E = 0,5$ y $l = 0$. El problema se resuelve separadamente con dos bases GSF, ambas con $E_s = 0,5$, pero de diferente potencial generador. Una de ellas con un Coulombiano truncado y la otra con un potencial rectangular. En la figura 2.1 se despliegan los módulos de los coeficientes de expansión $a_{0,n}$ obtenidos para una y otra base. Claramente la convergencia se alcanza significativamente más rápido con una base concentrada.

Se puede percibir en la figura 2.1 que, para el potencial coulombiano truncado aparecen funciones de escasa contribución, aún en elementos por debajo de $n = 50$. Una revisión de los autovalores de aquellos elementos los evidencia como de tipo repulsivo, es decir, cuya parte real de $\beta_{l,n}$ es positiva. Actualmente se encuentra en estudio la manera de excluir del cálculo a los estados que no intervendrán significativamente en la expansión de la solución de dispersión. Principalmente para problemas de tres cuerpos esto puede proporcionar un ahorro significativo de costo computacional. Por otra parte,

una base dispersa, del tipo relevado en 1.2.2, no logra la convergencia aún con 120 elementos de base. Lo evidencia la escasa disminución relativa de los coeficientes.

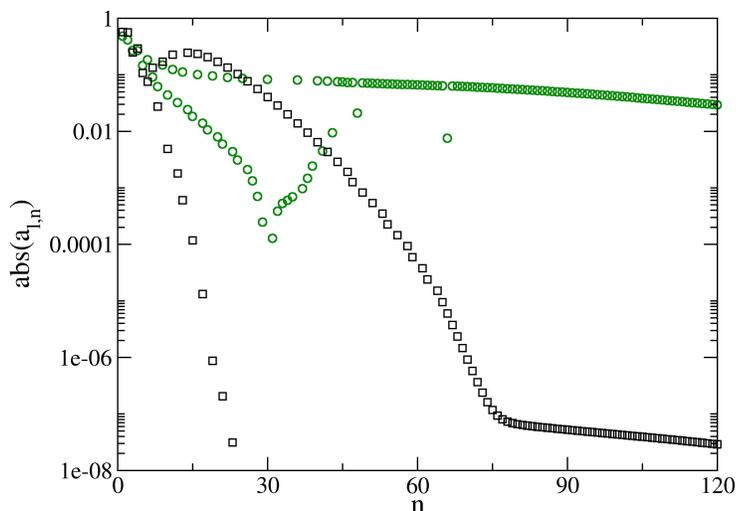


Figura 2.1: Módulo de los $a_{0,n}$ obtenidos de la resolución de un problema de dispersión con un dispersor de Yukawa muy concentrado sobre el origen. Los cuadrados negros corresponden con una base de potencial Coulombiano truncado, mientras que los círculos verdes a una base de potencial rectangular. La convergencia es alcanzada con apenas 50 elementos para el primero y no es alcanzada con 120 para el segundo.

El siguiente caso considerado en complejidad también consta en resolver un problema de dispersión de dos cuerpos con una base de energía igual a la del problema, con la diferencia de que esta vez, el lado derecho de la ecuación se extiende significativamente dentro de la caja radial considerada. Trabajamos con $V_R(r) = 1$ dentro del dominio, anulándose fuera, y $\varphi_0(r)$ como un estado de dispersión de condición saliente calculado de manera numérica con la implementación de diferencias finitas discutida en el apéndice E.

Se resuelve el mismo problema de dispersión con tres bases diferentes: una de tipo Yukawa, una de potencial Coulombiano truncado y una de pozo rectangular. Esta última fue la que obtuvo mejor convergencia, al decrecer más rápidamente el tamaño relativo de los coeficientes. La base más concentrada, la de Yukawa, en cambio, fue la que obtuvo el peor rendimiento, dado por el decrecimiento más lento de sus $|a_{l,n}|$ (fig. 2.2).

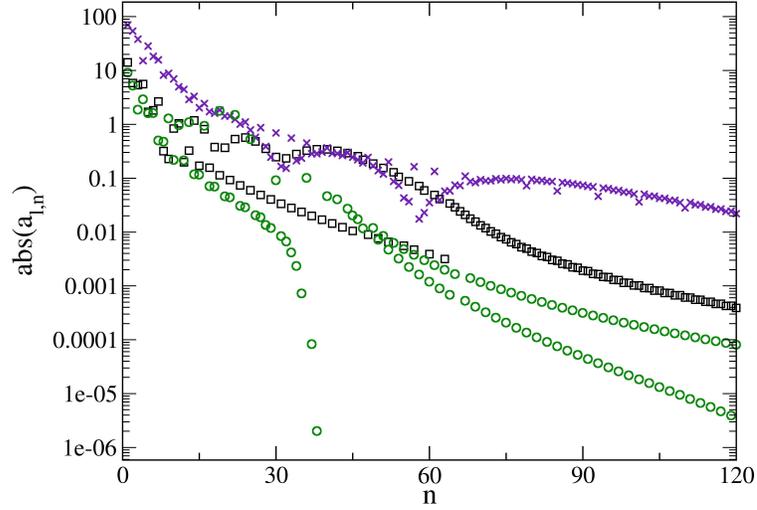


Figura 2.2: Módulo de los coeficientes $a_{l,n}$ de un problema de dispersión generalizado. En este ejemplo $\mathcal{V}_{\mathcal{R}}(r) = 1$ y $\varphi_0(r)$ es un estado de dispersión numérico de condición saliente. Resoluciones con bases GSF de Yukawa (cruces violeta), potencial Coulombiano truncado (cuadrados negros) y de pozo rectangular (círculos verdes).

Mayor complejidad se encuentra cuando la base no posee la misma energía del problema. Este caso se halla forzosamente en problemas de tres cuerpos, como se analizará más adelante. La base debe expandir un comportamiento asintótico que no es el propio, y por tanto, si es del tipo 1.2.2 o 1.2.3 tendrá la capacidad de caracterizar frecuencias distintas a la propia en todo el dominio, como se estudió en la sección 1.4.

Si la base tiene capacidad de expansión en todo el dominio considerado, hay un obstáculo que no se puede evitar y limita su flexibilidad. Es el hecho de que las condiciones de contorno (energía y carga asintótica) de la base no se condigan con las de la solución esperada. Por ello la misma no se reproducirá del todo correctamente. No obstante, en la sección siguiente se enuncian alternativas para lograr que la base resuelva problemas con energías cercanas a la propia aún cuando no coincidan exactamente.

Queda por destacar el escenario más exigente para una base Sturmiana: un problema con una energía distinta a la propia y un lado derecho de variación abrupta y a la vez extensión apreciable en todo el intervalo radial. Un problema así requerirá un mayor esfuerzo, en términos de cantidad de funciones de base, para ser resuelto adecuadamente. La mejor apuesta en este caso sería el tipo discutido en la sección 1.2.3, a raíz de que concentra algún grado de oscilaciones en el origen mientras que también puede caracterizar ondas de diferentes energías en todo el dominio.

2.1.2. Extensión analítica de las integrales

Una integral de solapamiento es aquella donde el integrando es un producto de funciones Sturmianas,

$$\int_0^\infty S_{l,n'}(r)S_{l,n}(r)dr = \int_0^R S_{l,n}(r)S_{l,n}(r)dr + \int_R^\infty S_{l,n}(r)S_{l,n}(r)dr. \quad (2.14)$$

Desde la perspectiva formal dichas integrales radiales están definidas en toda la semirrecta real. Por supuesto, en aplicaciones de tipo numérico es necesario detenerse en algún valor finito, descartándose el segundo término de (2.14). Aún así, el conocimiento de la forma asintótica de las funciones de base Sturmianas permite adicionar analíticamente este término. Esta mejora se discutió por primera vez en [40] sobre integrales de solapamiento, y la misma fue de utilidad en los cálculos de tres cuerpos que se desarrollaron a lo largo de este trabajo doctoral. Resulta complejo aislar los efectos de esta modificación en un problema de tres cuerpos, y más aún contrastar que se esté tratando de una corrección genuina, más allá de la evidente disminución de las oscilaciones espurias en la solución. Por este motivo se realiza un experimento numérico con un problema de dispersión de dos cuerpos para mensurar los efectos de añadir analíticamente el segundo término de (2.14).

El término de (2.10) pesado por $E - E_{st}$ implica la integración entre dos GSF sin mediar la atenuación de ningún potencial; es decir, un caso como (2.14). Cuando las energías del problema y de la base son coincidentes, dicho término no interviene en la resolución. Ahora bien, cuando difieren, el valor de (2.14) juega un rol activo. Podemos notar de (1.5) que una integral de solapamiento entre dos GSF de condición puramente saliente o entrante será de tipo oscilatorio, extendiéndose hasta el infinito. No obstante, debido a que el producto escalar entre dos funciones Sturmianas no implica conjugación, la integral puede, mediante un artificio similar al de la integral de Bethe [86] entregar un valor finito [36]. La integración desde el final de la grilla numérica, $r = R$, hasta $r \rightarrow \infty$ se obtiene analíticamente. Desde $r = 0$ hasta R_0 debe mantenerse la integración por la vía numérica, puesto que aquí las GSF tienen capacidad de expansión y difieren considerablemente entre sí. La integral analítica similar a la mostrada en [36] pero con la complejidad adicional de incluir un comportamiento eikonal, es decir, que considera los efectos asintóticos de una distorsión coulombiana. Se presenta a continuación un problema de dispersión de energía $E = 0.905$ resuelto con una base

de energía $E_s = 0.605$. Se puede notar cómo la añadidura del solapamiento hasta el infinito corrige la función hacia el valor correcto, obtenido por diferencias finitas de orden 23 con las condiciones de borde correspondientes a la energía E del problema. Los detalles de dicha implementación numérica se hallan en el apéndice E.

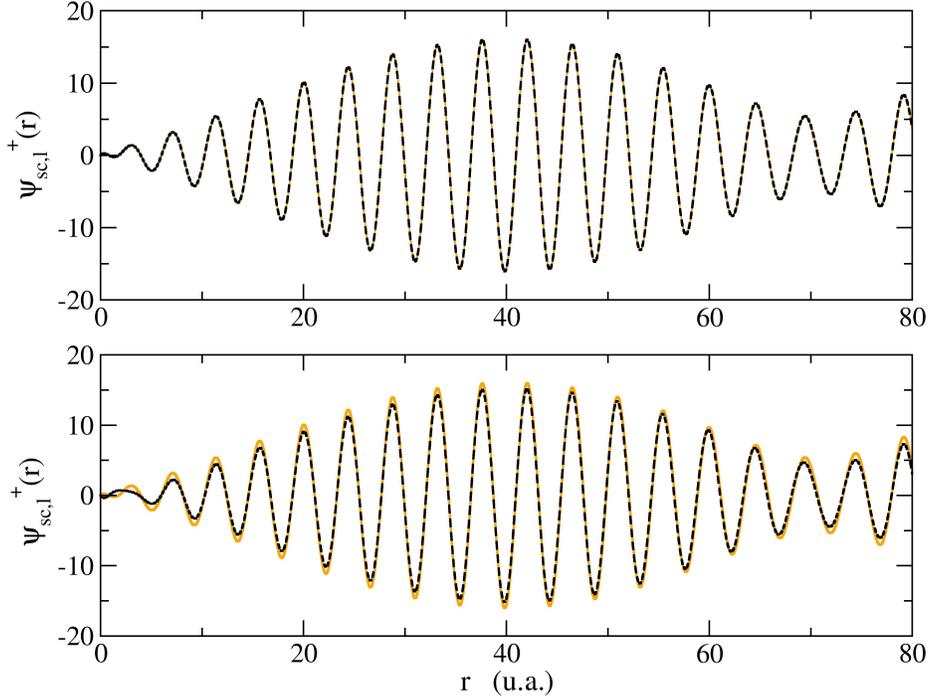


Figura 2.3: Problema de dispersión con energía $E = 0.905$. La base Sturmiana posee $E_s = 0.605$. Panel superior: resultado con la extensión analítica del solapamiento. Panel inferior: sin la extensión más allá del dominio de integración numérico. En ambos casos comparamos la resolución (trazo negro segmentado) con una por diferencias finitas (curva anaranjada continua). El lado derecho empleado era no decreciente en el dominio pero nulo fuera del mismo.

Esta mejora, no obstante, posee una cota. Extiende el rango de validez de una base Sturmiana a valores razonablemente cercanos en energía. Al resolver el mismo problema utilizando la misma base pero una energía $E = 1.205$ la solución no resulta corregida completamente, aunque sí posee menor error que su contraparte sin la extensión del solapamiento.

La solución del problema posee una condición asintótica moldeada principalmente por E , mientras que la de la base lo es por E_s . Por lo tanto, se dificulta expandir la solución correcta si estos valores no son próximos. Se escribe a continuación la fórmula que se ha derivado para extender las integrales analíticamente:

$$\begin{aligned}
& \int_R^\infty S_{l_a, n_a}(r) S_{l_b, n_b}(r) r^p e^{-\lambda r} dr = \\
& \int_R^\infty N_1 e^{i s_1 (k_1 r - \gamma_1 \log(2k_1 r))} N_2 e^{i s_2 (k_2 r - \gamma_2 \log(2k_2 r))} r^p e^{-\lambda r} dr = \quad (2.15) \\
& N_1 N_2 (2k_1)^{-i s_1 \gamma_1} (2k_2)^{-i s_2 \gamma_2} R^{1-\nu} E_\vartheta(\mathcal{Z}R).
\end{aligned}$$

Hemos añadido cierta generalidad a la expresión vía $r^p e^{-\lambda r}$ y definido las variables auxiliares $\vartheta = i s_1 \gamma_1 + i s_2 \gamma_2 - p$ y $\mathcal{Z} = -(i s_1 k_1 + i s_2 k_2 - \lambda)$. A través de los parámetros p y λ se pueden considerar interacciones de tipo Yukawa, Coulombiano, armónico, exponencial o constante (manteniendo $p = 0$ y $\lambda = 0$), siendo esta última la necesaria para evaluar el segundo término de (2.14). Con los parámetros s_1 y s_2 se pueden imponer condiciones asintóticas de tipo entrante o saliente, según $s_i \pm 1$. Los momentos k_1 se k_2 relacionan con las energías de los integrandos como sigue: $k_i = \sqrt{2\mu E_i}$. Las constantes de normalización N_1 y N_2 se incluyen debido a que los integrandos podrían tener amplitud no unitaria y alguna fase. La integral exponencial $E_n(x)$ [87] se evalúa por medio de fracciones continuas. Disponemos también de expresiones asintóticas para argumento grande y pequeño, presentes en [87] como verificación del código.

Debe destacarse que en (2.15) asumimos implícitamente que $S_{l_a, n_a}(r) \rightarrow N e^{i s (kr - \gamma \log(2kr))}$. Si bien esto es aproximadamente correcto, no es coincidente con el comportamiento Coulombiano exacto $S_{l_a, n_a}(r) \rightarrow N H_l^\pm(Z, E, r)$. Según sean la carga (a través de γ) y los momentos angulares, la función $H_l^\pm(Z, E, r)$ asumirá un comportamiento de tipo eikonal a mayores o menores distancias. Una integral involucrando las funciones coulombianas exactas $H_l^\pm(Z, E, r)$ sería marcadamente más compleja que la presentada en (2.15).

La misma metodología puede extenderse, a problemas de tres cuerpos, si bien esta modificación no llegó a implementarse en el marco temporal de la presente tesis. La formulación así como pruebas preliminares de factibilidad se encuentran en el apéndice F.

2.2. Elección de una base de alcance deliberadamente restringido

Para resolver un problema de dispersión con una base de energía no coincidente con la del mismo ya se estableció la necesidad de que la base fuera capaz caracterizar diferentes frecuencias de oscilación en una región que abarque más allá de la zona cercana al origen. Por otro lado, se mostró la mejora en la aproximación de las condiciones asintóticas que añade la extensión analítica de las integrales tanto en el lado izquierdo como el derecho de (2.7).

Implícitamente se trabajó, en las pruebas previas, con juegos de base que para la cantidad de elementos utilizados tenían capacidad de expansión en todo el intervalo radial considerado.

Se halló una estrategia conceptualmente opuesta, que permite a la base lidiar con energías muy diferentes a la propia. El procedimiento consiste en buscar deliberadamente que la base posea capacidad de expansión en todo el dominio *exceptuando* la zona inmediata a R_{max} . Esto excluye, en primera instancia a la base del potencial rectangular en su versión habitual (valor unitario hasta R_{max}). Tras consideraciones de tipo práctico, se concluye que esta estrategia no se puede implementar con bases de tipo Yukawa y coulombiano truncado. Una base de Yukawa, según sea su parámetro α_{yuk} alcanzará o no el extremo R_{max} con capacidad de expansión. Ahora bien, suponiendo que se escoja α_{yuk} de manera tal que el alcance sea limitado, se lograra la premisa de evitar el extremo, pero a la misma vez la base consigue expandir la solución buscada en una región demasiado estrecha y próxima al origen. Un potencial generador cuya base puede mantener capacidad de expansión en buena parte del dominio empleado, pero intencionadamente perderla al alcanzar un dado R_{max} es el de Woods-Saxon. A modo de ilustración de los resultados de este procedimiento, resolvemos un problema de dispersión, donde el lado derecho está dado por el estado ligado coulombiano $3s$ de carga $Z = -4$. La energía del problema es $E = 2.3$ u.a., mientras que para la base Sturmiana se tomó $E_s = 0.5$ u.a.. La diferencia entre estos valores es del orden que podría esperarse en un problema de tres cuerpos con un núcleo de Helio, como se estudiará más adelante. Los parámetros del potencial generador fueron $R_{ws} = 65.0$ y $\alpha_{ws} = 0.5$, mientras que como auxiliar se usó $\frac{-2}{r}$.

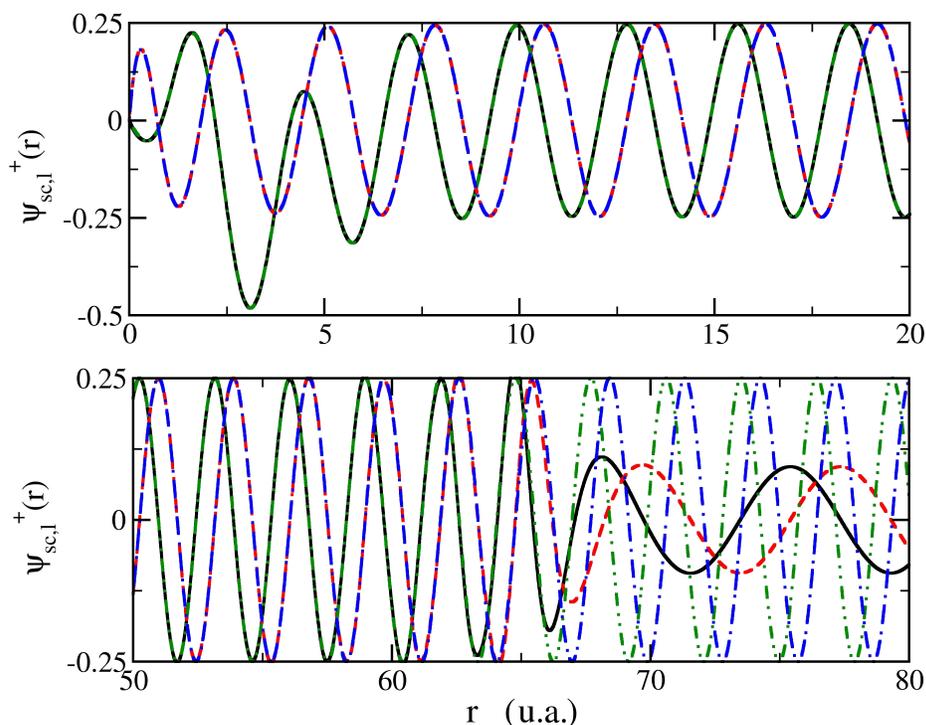


Figura 2.4: Resolución de un problema de dispersión con una base de alcance deliberadamente acotado. Es posible observar que a pesar de diferir en energía respecto del problema, la base consigue construir una función de dispersión con el comportamiento correcto. La resolución por medio de la base GSF (parte real: trazo negro continuo, parte imaginaria: trazo rojo segmentado) se contrasta con la resolución directa de (2.7) por diferencias finitas (parte real: trazo raya-punto en azul, parte imaginaria: trazo doble punto-rama en verde). Panel superior: región cercana. Las soluciones son indistinguibles. Panel inferior: región lejana, donde se observa que alrededor de 65 a.u. la base pierde la capacidad de expansión.

El grado de acuerdo reflejado en la figura 2.5 requiere de alrededor de 130 funciones de base. Aún cuando no está claramente establecida la razón por la que esto sucede, sí disponemos de la siguiente hipótesis plausible. Debido a que el comportamiento asintótico de la base difiere significativamente del de la solución real del problema, la *mejor combinación lineal alcanzable* por la base es aquella en la que la región cercana a R_{max} no se halla bien expandida. No obstante, sí puede mejorarse la región interna al añadir más elementos de base, que no modifican la forma en la región asintótica (ya de por sí en desacuerdo con la de la solución buscada). Al utilizar la misma base, pero una energía negativa no se logró una solución aceptable, posiblemente por no contener ésta una parte imaginaria, por ende no teniendo el sistema de ecuaciones manera de

introducir esa información.

Esta estrategia presenta buenas perspectivas para problemas de tres cuerpos, a la vez que requeriría escasas modificaciones a las implementaciones ya existentes y será objeto de experimentación en el futuro próximo. La extensión analítica de las integrales de solapamiento reduce aproximadamente a la mitad las ya de por sí pequeñas discrepancias con la solución por diferencias finitas; es decir ambos procedimientos resultan compatibles.

2.3. Resolución de problemas de dispersión con la base de Sturmians con rotación al plano complejo de la coordenada radial

Mostraremos, en una aplicación de dos cuerpos, las potencialidades de la base Sturmiana con rotación de la coordenada radial al plano complejo. El objetivo es, nuevamente, resolver un problema cuya energía difiera de la de base, ya que esta situación es habitualmente encontrada al resolver problemas de tres cuerpos. Resolvemos el mismo problema físico del apartado inmediatamente anterior.

De acuerdo a la figura 2.5, se consigue una precisión del orden de la obtenida por el procedimiento 2.2. Para corroborar que la rotación de la coordenada desempeña un rol, y que el resultado de la figura 2.5 no es simplemente una consecuencia del alcance escogido para potencial generador (Woods–Saxon) de acuerdo a lo discutido en la sección anterior, se llevó a cabo la resolución del mismo problema removiendo dicha rotación. El acuerdo entre el resultado por diferencias finitas y la metodología GSF se deterioró significativamente, mostrando la parte real y la imaginaria amplitudes diferentes en la región asintótica. Como se mencionó en la sección previa, la diferencia de energías se corresponde con la de mayor exigencia demandada a una base Sturmiana en un problema de tres cuerpos con energía positiva. Hemos empleado una base de energía $E_s = 0,3$ u.a.; su generador fue uno de tipo Woods–Saxon, de alcance $R_{ws} = 70$ u.a. y difusividad $\alpha_{ws} = 2.0$. La rotación al campo complejo comienza a aplicarse a las 70 u.a., con una circunferencia de transición de radio 3 u.a. y un ángulo final $\vartheta_{ecs} = 60,0$ grados. Alcanzan 130 funciones de base para lograr el acuerdo de la figura.

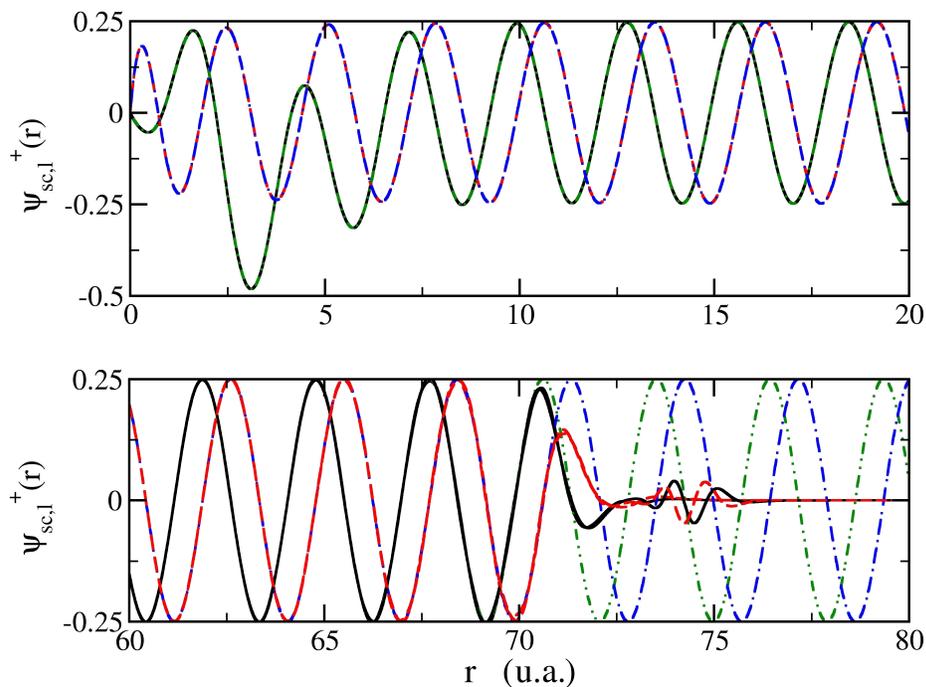


Figura 2.5: Resolución de un problema de dispersión con una base GSF con ECS. La resolución por medio de la base GSF (parte real: trazo negro continuo, parte imaginaria: trazo rojo segmentado) se contrasta con la resolución directa de (2.7) por diferencias finitas (parte real: trazo raya-punto en azul, parte imaginaria: trazo doble punto-rama en verde). Panel superior: región cercana. Panel inferior: región lejana. La rotación compleja se aplica a partir de 70 u.a.

2.4. Conclusiones y perspectivas del problema de los dos cuerpos

En las secciones previas de la tesis se han presentado las propiedades básicas de las GSF, a la vez que se realizaron estudios en profundidad con la finalidad de alcanzar una comprensión más completa de la herramienta que primordialmente utiliza el grupo de investigación. Se organizaron las clases de GSF según la extensión espacial de su potencial generador y se estudió la idoneidad de cada clase para diferentes tipos de problema de dispersión. Ciertos experimentos numéricos, si bien se realizaron sobre problemas de dos cuerpos, incorporaban una exigencia que se encuentra en los problemas de tres cuerpos: la necesidad de que la base sea capaz de caracterizar energías distintas a la propia. A este aspecto se retornará en los capítulos siguientes, abocados

ya a problemas de tres cuerpos.

Se introdujo una nueva metodología capaz de generar GSF, basada en diferencias finitas de orden elevado. Es un esquema que proporciona gran precisión a la vez que eficiencia de cálculo, y permite una flexibilidad mayor que los esquemas preexistentes, al ser capaz, de manera natural de incorporar grillados radiales generalizados. Los mismos pueden incluso ser contornos sobre el plano complejo. La metodología comprende la posibilidad de incorporar en la resolución potenciales de tipo no-local, herramienta que puede facilitar el tratamiento de interacciones no-locales introducidas por el intercambio con los electrones no activos del problema en cuestión.

El problema de los tres cuerpos

Capítulo 3

Introducción

Hemos mencionado en la introducción general de la tesis que el problema de la doble ionización de Helio por impacto de electrones en el régimen de proyectil rápido y electrones eyectados lentos constituía aún un problema no resuelto. Los resultados experimentales presentados en [1, 2] no han sido aún adecuadamente reproducidos por ninguna teoría, y más aún, no existe hasta la fecha acuerdo entre las predicciones teóricas en cuanto a la magnitud de la sección eficaz completamente diferencial. Son aquellos experimentos los únicos que disponen, en el régimen que estamos estudiando, de una escala absoluta. Dado que las formas de las secciones eficaces calculadas por diferentes métodos cualitativamente son similares, al factor decisivo lo constituye la escala absoluta de los datos experimentales, sea para definir cuál, si alguno de los cálculos publicados [2, 88, 13] es completamente correcto. Otro desenlace posible es que distintos cálculos teóricos se respaldacen entre sí, y esto les otorgaría cierta plausibilidad para cuestionar los experimentos.

En la sección siguiente plantearemos el fundamento teórico del problema y la aplicación de la metodología GSF al mismo. Más adelante se presentan los resultados y análisis físicos extraídos de la función de onda en un modelo de momento angular cero. El mismo simplifica el problema del álgebra intrincada de los momentos angulares, pero a la vez mantiene la dificultad dada por el acoplamiento interelectrónico. Para realizar una comparación con datos experimentales es necesario contar con la resolución del problema completo, con suficientes ondas parciales del momento angular de manera tal que la física de la colisión pueda ser bien caracterizada. Es decir, es necesario ir más allá de dicho modelo de onda S . A esto nos abocaremos en los capítulos finales de la presente tesis. Se presentan allí los resultados propios de la metodología GSF en

comparación con los datos experimentales de [1, 2] y otros cálculos teóricos publicados en las referencias [88, 14].

3.1. Formulación para proyectiles rápidos

En un experimento de colisiones de electrones contra una especie atómica típicamente se dirige un haz de estos proyectiles contra un gas a muy baja presión de dichos átomos. En este trabajo se tomó como especie atómica al Helio. Se trata de un átomo de dos electrones, que incluyendo al núcleo y al proyectil electrónico constituyen un problema de cuatro cuerpos. No obstante, dentro del marco de proyectil rápido son posibles ciertas aproximaciones que reducen la complejidad a un problema de tres cuerpos.

Se escribe la ecuación de Schrödinger (no relativista) para la colisión de un electrón contra un átomo de Helio. En principio será una ecuación de cuatro cuerpos. Se trabajará bajo la aproximación de masa nuclear infinita. El operador Hamiltoniano del sistema completo a resolver será:

$$H = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}}. \quad (3.1)$$

Por tanto, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo adoptará la siguiente forma:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} - E \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = 0. \quad (3.2)$$

Denotaremos por 1 al electrón incidente/dispersado y por 2 y 3 a los propios del átomo de Helio.

Debido a que consideramos que la velocidad de incidencia del electrón proyectil es elevada, se propone el desarrollo perturbativo siguiente. Al Hamiltoniano total (3.1) lo descompondremos en una parte asintótica y una parte perturbativa.

$$H_0(Z_p) = h_p(Z_p) + h_{He}, \quad (3.3a)$$

$$\bar{W}(Z_p) = -\frac{Z - Z_p}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}}, \quad (3.3b)$$

donde hemos denotado

$$h_{He} = \left(-\frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{1}{r_{23}} \right) \quad (3.4a)$$

$$h_p(Z_p) = \left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{Z_p}{r_1} \right). \quad (3.4b)$$

El hamiltoniano $H_0(Z_p)$ incluye todas las interacciones del subsistema (2,3) mediante h_{He} , mientras que la interacción proyectil-núcleo $-Z_p/r_1$ es descrita por $h_p(Z_p)$. Los dos subsistemas se hallan acoplados por la interacción $\bar{W}(Z_p)$.

Se propone ahora para la función de onda de cuatro cuerpos una serie perturbativa con parámetro λ , cuyo valor numérico será luego igualado a 1. Este parámetro está asociado a la magnitud de la interacción \bar{W} .

$$\Psi^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \sum_n \lambda^n \Psi^{(n)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \quad (3.5)$$

Los órdenes sucesivos de $\Psi^{(n)+}$ satisfacen el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$[E - H_0] \Psi^{(0)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = 0, \quad (3.6a)$$

$$[E - H_0] \Psi^{(1)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \bar{W} \Psi^{(0)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (3.6b)$$

$$\vdots$$

$$[E - H_0] \Psi^{(n)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \bar{W} \Psi^{(n-1)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \quad (3.6c)$$

La solución de orden cero entonces se constituirá de la siguiente manera, puesto que es separable en una parte atómica y otra debida al proyectil libre de interacciones, tomando $Z_p = 0$:

$$\Psi^{(0)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1} \Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \quad (3.7)$$

Aquí $\Phi^{(0)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ representa el estado fundamental del átomo de Helio. El momento del proyectil se denota por \mathbf{k}_i . La solución $\Psi^{(0)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$, representa el estado inicial del sistema, mientras que el electrón proyectil es modelado por una onda plana. Introducimos entonces esta proposición en la ecuación (3.6b) para obtener la relación que

verifica $\Psi^{(1)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 + h_{He} - E \right) \Psi^{(1)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\ & - \left(-\frac{Z}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} \right) \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Expresamos la función del primer orden perturbativo $\Psi^{(1)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ como una combinación de ondas planas para el electrón dispersado, pesada por una función $\Phi_{sc}^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ a ser determinada:

$$\Psi^{(1)+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} \Phi_{sc}^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \quad (3.9)$$

Con la proposición (3.9) reemplazada en (3.8) y proyectando sobre un autoestado $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_1}$ del momento lineal final \mathbf{k}_f obtenemos:

$$(h_{He} - E_a) \Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{q^2} (-Z + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2} + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_3}) \Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (3.10)$$

en donde hemos definido $E_a = E - \frac{1}{2}k_f^2$, la energía total del sistema compuesto por el núcleo de Helio y sus dos electrones luego de haber recibido el impacto. La misma puede o no hallarse por encima del umbral de doble ionización, es decir, ser suficiente para que ambos electrones puedan ser eyectados al continuo. El vector \mathbf{q} es el momento transferido por el proyectil al blanco: $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$.

Estando por encima del umbral de ionización doble, $E_a = 0$, como resultado de la colisión es posible que ambos electrones sean emitidos, o bien que uno solo de ellos lo sea. El restante queda ligado en algún estado de He^+ . Por la conservación de la energía las configuraciones finales aceptables son tales que $E_2 + E_3 = E_a$. Todos estos procesos deben estar contenidos simultáneamente en la solución $\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$, que formalmente podrá escribirse de la siguiente manera:

$$\Phi_{sc}^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \int d\mathbf{r}'_2 d\mathbf{r}'_3 G_a^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_3) \bar{W}(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_3) \Phi_0(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_3). \quad (3.11)$$

con el operador de Green definido en [89]. Resulta conveniente definir cuatro sectores asintóticos [90], según sobre qué coordenada se observa el límite de valores grandes. Emplearemos una convención ligeramente distinta a la de la referencia [90] para que

sea consistente con los rótulos que hemos elegido para denotar los electrones:

$$\Omega_0 : \quad r_2, r_3, r_{23} \rightarrow \infty, \quad \frac{r_3}{r_2} \rightarrow \mathcal{C} \neq 0, \quad (3.12)$$

$$\Omega_2 : \quad r_2 \rightarrow \infty, \quad \frac{r_3}{r_2} \rightarrow 0, \quad (3.13)$$

$$\Omega_3 : \quad r_3 \rightarrow \infty, \quad \frac{r_2}{r_3} \rightarrow 0, \quad (3.14)$$

$$\tilde{\Omega} : \quad r_2, r_3 \rightarrow \infty, \quad \frac{r_{23}}{r_2}, \frac{r_{23}}{r_3} \rightarrow 0. \quad (3.15)$$

En las regiones Ω_i (siendo $i = 2, 3$) la función de onda debe describir principalmente la situación en que uno de los electrones permanece cercano al núcleo formando un estado ligado mientras que el otro se halla a grandes distancias, eyectado. La forma asintótica en estas regiones del dominio (r_2, r_3) deberá ser [89]:

$$\Phi_{sc,2}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \xrightarrow{r_2 \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \sum_n F_n(k_n \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{q}) \frac{e^{ik_n r_2 - i\eta_{2,n} \ln(2k_n r_2)}}{r_2} \phi_n(\mathbf{r}_3), \quad (3.16)$$

donde hemos introducido $\rho = \sqrt{r_2^2 + r_3^2}$. Hemos definido aquí el parámetro de Sommerfeld $\eta_{2,n} = \frac{Z-1}{k_n}$ y el momento k_n con el que el electrón emitido parte, dejando al otro ligado en el estado $\phi_n(\mathbf{r}_3)$ de He^+ . La sumatoria (3.16) recorre en el índice n todos los estados ligados de un solo electrón en el núcleo residual. Así, las $F_n(k_n \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{q})$ son las amplitudes de ionización simple. La definición de la función asintótica para el sector Ω_3 es totalmente análoga.

Cuando ambos electrones se encuentran en el continuo y muy apartados entre sí, estamos en la región Ω_0 [90]. En este dominio las distancias entre partículas son grandes y no existen contribuciones apreciables de parte de los estados ligados. El operador de Green en este sector será:

$$G_a^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_3) \rightarrow (2\pi i)^{1/2} \kappa^{\frac{3}{2}} \frac{e^{i[\kappa\rho - \lambda_0 \ln(2\kappa\rho) - \sigma_0]}}{\rho^{\frac{5}{2}}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}_2, \tilde{\mathbf{k}}_3}^-(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_3). \quad (3.17)$$

En el operador de Green podemos evidenciar el esperado comportamiento asintótico para el doble continuo, con frentes hiperesféricos [89]:

$$\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \rightarrow (2\pi i)^{1/2} \kappa^{\frac{3}{2}} T_{\tilde{\mathbf{k}}_2, \tilde{\mathbf{k}}_3} \frac{e^{i[\kappa\rho - \lambda_0 \ln(2\kappa\rho) - \sigma_0]}}{\rho^{\frac{5}{2}}}. \quad (3.18)$$

siendo λ_0 el parámetro de Sommerfeld, y $T_{\tilde{\mathbf{k}}_2, \tilde{\mathbf{k}}_3} = T\left(\frac{\kappa}{\rho}\mathbf{r}_2, \frac{\kappa}{\rho}\mathbf{r}_3\right)$ la amplitud de doble ionización. Los momentos dependientes de las coordenadas $\tilde{\mathbf{k}}_j$ ($j = 2, 3$) fueron

propuestos por Alt y Mukhamedzhanov [90], mientras que $\kappa = \sqrt{k_2^2 + k_3^2}$ es el hipermomento.

Al resolver la ecuación de Schrödinger resultante, todos los canales abiertos, es decir, aquellos energéticamente permitidos, se hallan representados: $\Phi_{sc,2}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$, $\Phi_{sc,3}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ and $\Phi_{sc,c}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$. Estos tres tipos de solución están incorporados de manera simultánea. Es decir, la solución completa de (3.10) tendrá la siguiente forma general para grandes distancias:

$$\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \Phi_{sc,2}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \Phi_{sc,3}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \Phi_{sc,c}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \quad (3.19)$$

La matriz de transición $T_{\bar{\mathbf{k}}_2, \bar{\mathbf{k}}_3}$ se define de acuerdo a [91]:

$$T_{\bar{\mathbf{k}}_2, \bar{\mathbf{k}}_3} = \frac{4\pi}{q^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \langle \Psi_{\bar{\mathbf{k}}_2, \bar{\mathbf{k}}_3}^-(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) | -Z + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2} + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_3} | \Phi_i(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \rangle, \quad (3.20)$$

siendo $\Psi_{\bar{\mathbf{k}}_2, \bar{\mathbf{k}}_3}^-(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ un producto de tres ondas planas con distorsión Coulombiana y condición asintótica de tipo onda entrante. La sección eficaz totalmente diferencial (FDSC) es dada por la expresión siguiente [91]:

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_2 d\Omega_3 d\Omega_f dE_a dE_3} = (2\pi)^4 \frac{k_f k_2 k_3}{k_i} |T_{\bar{\mathbf{k}}_2, \bar{\mathbf{k}}_3}|^2. \quad (3.21)$$

Si bien la matriz de transición, tal como se mostrará más adelante, es extraída de la función asintótica en los correspondientes sectores Ω_i , resultará instructivo para la interpretación de los resultados el empleo de la definición formal (3.20) de la misma.

Discutiremos ahora algunos aspectos físicos contenidos en el modelo (3.10) en relación con la formulación de colisiones múltiples (*multiple scattering*) de la referencia [91]. La ecuación (3.10) contempla una colisión simple del proyectil con algún elemento del blanco (núcleo, electrón 2, electrón 3). Es decir, de dicha interacción Coulombiana hemos considerado un primer orden. Por el contrario, los procesos de colisión secundarios que ocurran entre los tres componentes del blanco son modelados *a todo orden*, debido a que las interacciones coulombianas son tratadas de manera (numéricamente) exacta. Del árbol de procesos de colisión múltiple descritos en [91], solamente aquellos que contengan *estrictamente una* interacción con el proyectil serán incluidos en nuestro formalismo a primer orden, que es válido en el rango de altas energías. Las colisiones reiteradas del proyectil contra los constituyentes del blanco requieren de la resolución de órdenes sucesivos del sistema (3.6a), (3.6b), \dots , (3.6c). Una formulación alternativa

hemos presentado en las ecuaciones (9) y (10) de la referencia [43], para considerar el proceso de $(e, 3e)$. La ecuación (10) de [43] es de tipo integro-diferencial, e implicaría el cálculo simultáneo y acoplado de múltiples ecuaciones similares a la (3.10) de la presente tesis. Al igual que aquí, en dicho artículo se trabaja con una aproximación de primer orden, pero aquella formulación contiene en principio la posibilidad de proceder, no perturbativamente, más allá en el grado de interacción entre el proyectil y el sistema. La carga numérica y computacional, empero, se correspondería con la resolución de un problema de cuatro cuerpos y sería necesario diseñar cuidadosamente una estrategia numérica para acometer tal tarea.

3.2. Evaluación del estado $\Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$

Hemos mencionado la capacidad de las bases GSF para obtener tanto soluciones de energía negativa como positiva. En esta tesis se trabajó con representaciones del estado ligado de Helio obtenidos con dicho tipo de base. Una construcción así será, en principio *numéricamente* exacta. No se utilizan en el trabajo presente funciones aproximadas como las de Byron y Joachain [61, 92], Bonham y Kohl [93], Pluvinaige [94], Le Sech [95] ni expansiones tipo Hylleraas [96, 97], alternativas utilizadas en artículos precedentes [91].

Los autoestados de la energía para un átomo de dos electrones activos verifican la siguiente ecuación,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 + U^{(2)}(r_2) + U^{(3)}(r_3) + \frac{1}{r_{23}} - E \right] \Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = 0, \quad (3.22)$$

siendo los potenciales $U^{(2)}(r_2)$, $U^{(3)}(r_3)$ los encargados de contener tanto las interacciones de los dos electrones activos con el núcleo a la par que con los electrones restantes. Hemos considerado la aproximación de masa nuclear infinita, que ciertamente se aplica al caso de interés, con cuatro nucleones. Los operadores de energía cinética y potencial en (3.22) conmutan con el módulo del momento angular total $\mathbf{L} = \mathbf{L}_2 + \mathbf{L}_3$, así como su proyección en una dirección de cuantización, que haremos coincidir con la dirección de incidencia del proyectil. Denominaremos L_z a la proyección de \mathbf{L} y a sus respectivos números cuánticos como M y L , ambos enteros. Debido a que el vector \mathbf{L} satisface las propiedades que definen, en el dominio de la mecánica cuántica, a un operador *momento angular*, L podrá adoptar valores enteros no negativos, mientras que los M válidos

serán aquellos enteros tales que $-L < M < L$. Para definir un conjunto completo de observables que conmutan, tomamos también los módulos de los vectores $\mathbf{L}_2, \mathbf{L}_3$, cuyos números cuánticos denominaremos l_a, l_b respectivamente. Es posible, por lo tanto, definir autoestados $\Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ de los módulos de $\mathbf{L}, \mathbf{L}_2, \mathbf{L}_3$, la proyección L_z y la energía E simultáneamente. Las autofunciones de los operadores angulares son conocidas como armónicos biesféricos, cuya constitución en términos de autofunciones de \mathbf{L}_2 y \mathbf{L}_3 con sus respectivas proyecciones en z es:

$$\mathcal{Y}_{l_a l_b}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3) = \sum_{m_a m_b} \langle l_a l_b m_a m_b | LM \rangle Y_{l_a}^{m_a}(\hat{\mathbf{r}}_2) Y_{l_b}^{m_b}(\hat{\mathbf{r}}_3) \quad (3.23)$$

Las propiedades básicas de estas funciones pueden hallarse en las referencias [61, 98].

Para el cálculo del estado fundamental del átomo de Helio emplearemos la base de tres cuerpos no correlacionada, también separada en componentes angulares y radiales:

$$\Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \mathcal{Y}_{l_a l_b}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3) \frac{S_{l_a n_a}^{(2,b)}(r_2)}{r_2} \frac{S_{l_b n_b}^{(3,b)}(r_3)}{r_3}, \quad (3.24)$$

donde ν representa el conjunto de números $\{L, M, l_a, l_b, n_a, n_b\}$. Los superíndices (b) se utilizarán para distinguir la base empleada en la obtención del estado ligado de la que utilizaremos para el continuo del problema. La base de tres cuerpos no correlacionada es solución de:

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{2} \nabla_3^2 + \mathcal{U}^{(2,b)}(r_2) + \mathcal{U}^{(3,b)}(r_3) - E_s^{(2,b)} - E_s^{(3,b)} \right] \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \\ & = [-\beta_{l_a n_a} \mathcal{V}^{(2,b)}(r_2) - \beta_{l_b n_b} \mathcal{V}^{(3,b)}(r_3)] \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Las funciones $S_{l_a n_a}^{(2,b)}(r_2)$ y $S_{l_b n_b}^{(3,b)}(r_3)$ poseen energías $E_s^{(2,b)}, E_s^{(3,b)} < 0$ y condiciones asintóticas dadas por la ecuación (1.6). Se propone la expansión de $\Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ en términos de la base Sturmiana de tres cuerpos,

$$\Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \sum_{l_a, l_b} \sum_{n_a, n_b} \phi_{\nu}^{(b,b)} \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (3.26)$$

siendo $\phi_{\nu}^{(b,b)}$ los coeficientes de la expansión, aún por determinar.

A raíz de la separabilidad en las variables angulares, se fijan los valores L, M para los que se desea obtener autoestados de la energía. Ahora bien, dentro de cada onda parcial determinada por L, M es en principio necesario sumar en los infinitos valores $\{l_a, l_b\}$ triangulares con L . En cualquier implementación numérica se tomará un número finito

de ellos. Resulta conveniente trabajar por pares (l_a, l_b) bien determinados, de manera tal que no se desperdicien recursos computacionales en aquellos que no verifican la relación triangular con L .

La propuesta (3.26) es introducida en (3.22) dando lugar a :

$$\sum_{l_a l_b} \sum_{n_a n_b} \left[U^{(2)}(r_2) + U^{(3)}(r_3) - \mathcal{U}^{(2,b)}(r_2) - \mathcal{U}^{(3,b)}(r_3) - \beta_{l_a n_a} \mathcal{V}^{(2,b)}(r_2) \right. \\ \left. - \beta_{l_b n_b} \mathcal{V}^{(3,b)}(r_3) + \frac{1}{r_{23}} - (E - E_s^{(2,b)} - E_s^{(3,b)}) \right] \phi_{\nu}^{(b,b)} \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = 0. \quad (3.27)$$

Las energías E permitidas y los coeficientes $\phi_{\nu}^{(b,b)}$ constituyen las incógnitas del problema de autovalores y autovectores. El caso del átomo de Helio reduce los potenciales $U^{(2)}(r_2), U^{(3)}(r_3)$ a $-\frac{Z}{r_2}, -\frac{Z}{r_3}$ respectivamente. Se utilizaron potenciales $\mathcal{V}^{(2,b)}(r_2), \mathcal{V}^{(3,b)}(r_3)$ del tipo estudiado en la sección 1.2.1, concretamente, de tipo Yukawa, y auxiliares $\mathcal{U}^{(2,b)}(r_2), \mathcal{U}^{(3,b)}(r_3)$ de tipo coulombiano, estos últimos con la finalidad de eliminar los términos de la interacción con el núcleo de la ecuación (3.22). La ecuación (3.22) se reduce entonces a:

$$\sum_{l_a l_b} \sum_{n_a n_b} \left[-\beta_{l_a n_a} \mathcal{V}^{(2,b)}(r_2) - \beta_{l_b n_b} \mathcal{V}^{(3,b)}(r_3) + \frac{1}{r_{23}} \right. \\ \left. - (E - E_s^{(2,b)} - E_s^{(3,b)}) \right] \phi_{l_a l_b n_a n_b}^{(b,b)LM} \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = 0. \quad (3.28)$$

El término $\frac{1}{r_{23}}$, la correlación interelectrónica, impide la separabilidad de la ecuación (3.28) en las coordenadas $\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$. Se lo expande como sigue:

$$\frac{1}{r_{23}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}_2) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}_3). \quad (3.29)$$

Luego se efectúa una proyección de la ecuación (3.28) contra cada elemento $\Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$, obteniendo una representación matricial del problema de autovalores:

$$\left[\mathbf{H} - \tilde{E}\mathbf{S} \right] \phi^{(b,b)} = 0. \quad (3.30)$$

Hemos definido $\tilde{E} = (E - E_s^{(2,b)} - E_s^{(3,b)})$, que serán en definitiva los autovalores resultantes del problema matricial. Los elementos de las matrices \mathbf{H} y \mathbf{S} son, explícitamente:

$$\mathbf{H}_{\nu',\nu} = \int \mathbf{d}\mathbf{r}_2 \mathbf{d}\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu'}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \left[-\beta_{l_a n_a} \mathcal{V}^{(2,b)}(r_2) - \beta_{l_b n_b} \mathcal{V}^{(3,b)}(r_3) + \frac{1}{r_{23}} \right] \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \quad (3.31a)$$

$$\mathbf{S}_{\nu',\nu} = \int \mathbf{d}\mathbf{r}_2 \mathbf{d}\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu'}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Xi_{\nu}^{(b,b)}(r_2, r_3)$$

Las integraciones angulares, en los ángulos sólidos Ω_2 y Ω_3 , involucran armónicos esféricos y biesféricos, y se pueden realizar analíticamente. Las radiales, es decir, en (r_2, r_3) , sí se resuelven de manera numérica. Las integraciones radiales y angulares del término $\frac{1}{r_{23}}$ han sido reportadas por el grupo de investigación y no repetiremos los detalles aquí, sino que referimos al lector a las referencias [48, 44].

La resolución del problema de autovalores se lleva a cabo con la rutina ZGEEV, previa inversión de la matriz \mathbf{S} , o alternativamente con la rutina DSYGV que no precisa de dicha inversión. Ambas rutinas son parte de la librería LAPACK [75]. La energía del autoestado i del Helio es dada por $E_i = \left(\tilde{E}_i + E_s^{(2,b)} + E_s^{(3,b)} \right)$.

Una función de onda que describa la dinámica de un conjunto de fermiones debe ser antisimétrica ante la permutación de todas las coordenadas (espaciales y de spin) de dos fermiones cualquiera [61, 98]. Para el estado fundamental, la función de spin será antisimétrica, hecho que fuerza que la parte espacial sea simétrica. En la implementación numérica no se incorporó tal simetrización, si bien puede forzarse a través de la base [48, 99]. Los autoestados hallados, resultaban simétricos o bien antisimétricos. En particular para este trabajo nos resulta de interés el estado fundamental del átomo de Helio, que es simétrico. Es necesario resolver el problema seleccionando $L, M = 0$. Parte de los estudios de simple y doble ionización se realizaron empleando un modelo de Helio Temkin–Poet como estado inicial, que implica conservar únicamente los términos $l_a = 0, l_b = 0$ de (3.26). Los restantes se efectuaron con soluciones del átomo de Helio que incorporaban momentos angulares l_a, l_b de hasta dos y tres, valores que resultaron suficientes para los estudios del proceso de colisión llevados a cabo la presente tesis. En la tabla siguiente mostramos las energías que se obtenían para el estado fundamental según la cantidad de ondas parciales incorporadas.

Ondas parciales	Presente trabajo	Exacto
Temkin–Poet ($l_a, l_b = 0$)	-2.87902936	-2.879028767 [100]
Hasta ($l_a, l_b = 2$)	-2.90276658	-2.902766378 [56]
Hasta ($l_a, l_b = 3$)	-2.90324694	-2.903320527 [56]
Hasta ($l_a, l_b = 12$)	–	-2.903712009 [48]
Completo	–	-2.903724377 [101]

Tabla 3.1: Energías de los estados ligados de Helio empleados en esta tesis, así como valores de referencia pertenecientes a otros trabajos.

Estos valores se pueden reducir si se incorporan más configuraciones angulares a la par que se realiza una optimización del parámetro α de la base de Yukawa. El objetivo presente es disponer de una descripción aceptable del estado ligado de Helio para realizar el cálculo de la colisión. Estudios en profundidad sobre la obtención de estados ligados de Helio de alta precisión con bases Sturmianas han sido presentados por el grupo en las referencias [64, 37, 48, 99].

3.3. Evaluación de la función $\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$

Para la función de dispersión $\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ nos valdremos de la siguiente base de tres cuerpos:

$$\Xi_{\nu'}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \mathcal{Y}_{l'_a l'_b}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3) \frac{S_{l'_a n'_a}^{(2,c)}(r_2)}{r_2} \frac{S_{l'_b n'_b}^{(3,c)}(r_3)}{r_3}. \quad (3.32)$$

Dicha base incluye funciones GSF $S_{l'_a n'_a}^{(2,c)}(r_2)$, $S_{l'_b n'_b}^{(3,c)}(r_3)$ con energías E_a, E_b positivas y condiciones asintóticas de tipo saliente, aspectos que hemos señalado con los superíndices c . Verifica:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 + \mathcal{U}^{(2,c)}(r_2) + \mathcal{U}^{(3,c)}(r_3) - E_s^{(2,c)} - E_s^{(3,c)} \right] \Xi_{\nu'}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \quad (3.33)$$

$$[-\beta_{l'_a n'_a} \mathcal{V}^{(2,c)}(r_2) - \beta_{l'_b n'_b} \mathcal{V}^{(3,c)}(r_3)] \Xi_{\nu'}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3),$$

y con ella propondremos la siguiente expansión:

$$\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \sum_{L', M'} \sum_{l'_a, l'_b} \sum_{n'_a, n'_b} \phi_{\nu'}^{(c,c)} \Xi_{\nu'}^{(c,c)}(r_2, r_3). \quad (3.34)$$

Dada la separabilidad del Hamiltoniano atómico en el momento angular total es posible resolver individualmente las contribución de cada onda parcial definida por los valores de L', M' . La aplicación del operador $(h_{He} - E_a)$ sobre la función $\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ ya expresada en la base Sturmiana elimina los operadores diferenciales de la resolución.

Además, si deliberadamente se eligen los potenciales auxiliares $\mathcal{U}^{(i)}(r_i)$ de cada juego de base de forma tal que idénticamente cancelen las interacciones $-\frac{Z}{r_i}$, obtenemos

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{2}\nabla_3^2 - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{1}{r_{23}} - E_a \right] \Xi_{\nu}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\ & \left[-\beta_{l_a n_a} \mathcal{V}^{(2)}(r_2) - \beta_{l_b n_b} \mathcal{V}^{(3)}(r_3) + \frac{1}{r_{23}} - E_a \right] \Xi_{\nu}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \end{aligned} \quad (3.35)$$

La representación de las matrices Hamiltoniana y de solapamientos en términos de la base GSF son entonces:

$$\mathbf{H}_{\nu',\nu} = \int \mathbf{d}\mathbf{r}_2 \mathbf{d}\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu'}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \left[-\beta_{l_a n_a} \mathcal{V}^{(2,b)}(r_2) - \beta_{l_b n_b} \mathcal{V}^{(3,b)}(r_3) + \frac{1}{r_{23}} \right] \Xi_{\nu}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (3.36a)$$

$$\mathbf{S}_{\nu',\nu} = \int \mathbf{d}\mathbf{r}_2 \mathbf{d}\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu'}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Xi_{\nu}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \quad (3.36b)$$

Por otra parte, en el lado derecho de la ecuación (3.10) expresaremos la onda plana en términos de ondas esféricas. Ambos tipos de ondas poseen una energía bien definida, pero mientras las primeras son autoestados del momento lineal, las otras tienen bien definidos los valores del módulo y proyección en z del vector momento angular.

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(qr) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{q}}) Y_l(\hat{\mathbf{r}}_i). \quad (3.37)$$

Las $j_l(qr)$ son funciones esféricas de Bessel [102] de orden l . Al realizar la proyección sobre cada elemento de base obtenemos:

$$\varphi_{\nu'} = \int \mathbf{d}\mathbf{r}_2 \mathbf{d}\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu'}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \frac{4\pi}{q^2} (Z - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_3}) \Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \quad (3.38)$$

Podemos entonces reescribir la ecuación (3.10) convertida en un sistema lineal,

$$[\mathbf{H} - (E_a - E_s^{(2,c)} - E_s^{(3,c)}) \mathbf{S}] \boldsymbol{\phi}^{(c,c)} = \boldsymbol{\varphi}. \quad (3.39)$$

En el apéndice G se detalla el cálculo de los elementos del vector $\boldsymbol{\phi}^{(c,c)}$. Se presenta una expresión general, para cualquier par de valores L, M del estado inicial del átomo de Helio, así como una particularización para $L, M = 0$. Dicha formulación evidencia ciertas simplificaciones que son capitalizables en la implementación numérica. La más significativa consiste en que las soluciones correspondientes a ondas parciales de un mismo L' y distinto M' difieren entre sí únicamente en un factor global. Entonces, es

necesario resolver el sistema lineal (3.39) una sola vez para cada L' , puesto que para cada valor permitido de M' la solución se puede obtener multiplicando por aquel factor global.

Estimamos apropiado plantear aquí, ya que se ha establecido el problema a resolver, una comparación de la física del presente modelo de $(e, 3e)$ con respecto del caso de $(e, 2e)$ y las implicaciones que esto acarrea sobre la implementación numérica. En el problema de $(e, 2e)$ la interacción del blanco con el proyectil es del tipo que clásicamente denominaríamos *fuerza interna*, ya que el proyectil es parte del sistema que se está modelando. No ocurre así en la aproximación al $(e, 3e)$ estudiada en esta tesis: el proyectil colisiona con el blanco (He), transfiere una cantidad de energía E_a y momento \mathbf{q} al sistema, para luego distanciarse velozmente. El sistema que se está modelando es ahora el del átomo de Helio que luego del impacto posee una cantidad de energía positiva. La perturbación ocasionada por el proyectil es, clásicamente, una *fuerza externa*.

El problema $(e, 2e)$ posee una simetría de rotación respecto al eje de incidencia del proyectil, debido a que no existe ninguna orientación especial en torno a dicho eje. La tarea, y por ende la carga computacional, se reduce únicamente a las ondas parciales de $M' = 0$. Aquella simetría es rota en el problema de $(e, 3e)$ por el vector momento transferido \mathbf{q} , que define una dirección *privilegiada*; es necesario considerar y calcular cada onda parcial con $M' = -L', \dots, L'$. No obstante, hay una dificultad inherente al problema de $(e, 2e)$ [48, 99] que es inexistente en $(e, 3e)$: la extensión espacial del lado derecho de la ecuación de dispersión (3.10) es claramente acotada. En la misma, el estado ligado del blanco se ocupa de limitar espacialmente el término forzante, removiendo la necesidad de considerar integraciones *continuo-continuo* entre funciones de condición asintótica estacionaria con otras de tipo saliente. Esto sucede en el problema de $(e, 2e)$, ya que el estado no perturbado posee al electrón incidente en un continuo estacionario. Las interacciones están mediadas por campos coulombianos, de largo alcance, y por ello las integraciones de tipo continuo-continuo de $(e, 2e)$ requieren un tratamiento cuidadoso.

Proporcionaremos a continuación ciertos detalles relativos al costo computacional de la implementación numérica. Por coordenada, onda parcial y unidad de longitud, la cantidad de funciones de base necesarias ronda la unidad, pero creciendo ligeramente con el dominio radial considerado. Vale la unidad para cajas de 30×30 u.a., mientras

que para una caja de 140 u.a. se emplearon de 150 a 170 funciones para asegurar una descripción aceptable de la función de dispersión de tres cuerpos. Existe una cantidad mínima de espacio a ser ocupado en el disco rígido o memoria RAM, que viene dado por la representación del Hamiltoniano en la base Sturmiana del continuo. Por supuesto que en un cálculo existe información adicional que debe ser almacenada, como la base y diversos parámetros físicos y numéricos, pero claramente el volumen principal viene dado por aquella matriz. El tamaño de la matriz hamiltoniana, representada en la base Sturmiana, será de $(N_a \times N_b)^2 N_l^2$ elementos. Cada uno ocupará 16 Bytes si se trabaja con variables complejas de doble precisión del lenguaje Fortran. A modo de estimación, un cálculo realizado con cinco ondas parciales, y 70 Sturmians por coordenada insumirá aproximadamente 9.0 GB. Un cálculo con 30 Sturmians y la misma cantidad de ondas parciales requerirá al menos 0.3 GB.

3.4. Sección eficaz totalmente diferencial

El cálculo de la sección eficaz que se ha implementado en esta tesis se basa en la expresión (3.21). Es en este punto que resulta conveniente la implementación de la simetría apropiada de la función de onda, como sigue:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = & \sum_{L', M'} \sum_{l'_a, l'_b} f_{\mathcal{A}} \left[\mathcal{Y}_{l'_a l'_b}^{L' M'}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3) \Phi_{l'_a l'_b}^{L' M'+}(\mathbf{q}, r_2, r_3) + \right. \\ & \left. (-1)^S \mathcal{Y}_{l'_a l'_b}^{L' M'}(\hat{\mathbf{r}}_3, \hat{\mathbf{r}}_2) \Phi_{l'_a l'_b}^{L' M'+}(\mathbf{q}, r_3, r_2) \right], \end{aligned} \quad (3.40)$$

con el factor $f_{\mathcal{A}}$ definido por $f_{\mathcal{A}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - 1 \right) \delta_{l_a l_b} \right]$. Hemos definido en (3.4) las funciones radiales $\Phi_{l'_a l'_b}^{L' M'+}(\mathbf{q}, r_2, r_3)$ de cada onda parcial.

Con la función $\bar{\Phi}_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$, simetrizada, haremos uso de la expresión (3.21) para realizar el cálculo de las FDCS:

$$\frac{d^5 \sigma}{d\Omega_2 d\Omega_3 d\Omega_f dE_a dE_3} = (2\pi)^3 \frac{k_f k_2 k_3}{k_i \kappa^3} \lim_{\rho \rightarrow \infty} \rho^5 |\bar{\Phi}_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)|^2. \quad (3.41)$$

En un contexto computacional, el límite $\rho \rightarrow \infty$ se aproxima considerando algún hiper-radio fijo tal que se pueda asumir que $\bar{\Phi}_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ ingresó en su régimen asintótico.

Para los fines de la formulación teórica presentada en este capítulo, θ_2, θ_3 eran los ángulos polares de las coordenadas esféricas de cada electrón. No obstante, cuando

se muestren las secciones eficaces totalmente diferenciales (FDSC), los consideraremos como coordenadas polares en el plano de la colisión, recorriendo desde $[0, 2\pi]$. Esta descripción es la empleada habitualmente en los gráficos de las publicaciones afines al área temática.

Capítulo 4

Estudio de la función en onda S

La resolución en onda S permite analizar la física subyacente en el proceso de colisión sin la complejidad adicional que incorporarían las dependencias angulares de ondas parciales más altas. Es decir, se puede comprender la información contenida en la propia función de onda. Otro de los objetivos de la sección es analizar de qué manera la metodología es capaz de generar la solución conteniendo todos los canales. Considerando todos los momentos angulares iguales a cero, la ecuación (3.10) deviene en:

$$\left[-\frac{1}{2r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left(r_2^2 \frac{\partial}{\partial r_2} \right) - \frac{1}{2r_3^2} \frac{\partial}{\partial r_3} \left(r_3^2 \frac{\partial}{\partial r_3} \right) - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{1}{r_>} - E_a \right] \phi_{sc}^+(r_2, r_3) = \mathcal{F}(r_2, r_3). \quad (4.1)$$

El lado derecho está dado por

$$\mathcal{F}(r_2, r_3) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{q^2} [-Z + j_0(qr_2) + j_0(qr_3)] \phi^{(0)}(r_2, r_3), \quad (4.2)$$

donde las $j_0(x)$ son las funciones esféricas de Bessel (Riccati-Bessel) [102] de orden cero. En (4.2), $\phi^{(0)}(r_2, r_3)$ es el estado fundamental de una resolución en onda S del átomo de Helio.

La ecuación (3.34) se reduce, por lo tanto, a

$$\phi_{sc}^+(r_2, r_3) = \sum_{n_a n_b} a_{n_a n_b} \frac{S_{n_a}^+(r_2)}{r_2} \frac{S_{n_b}^+(r_3)}{r_3}. \quad (4.3)$$

Como primera imagen visual de la función de onda de $(e, 3e)$ trataremos un caso con energía por encima del umbral de doble ionización en la sección 4.1. Con estos resultados analizados se hará un estudio de cómo es el funcionamiento de la base a la hora de generar las soluciones a problemas de dispersión en la sección 4.2. A

continuación se estudian los canales de simple ionización presentes en el cálculo de energía mayor que cero. Posteriormente se analizarán los casos $E = 0$ y $E < 0$. Cada uno de ellos plantea un desafío diferente para la base Sturmiana. Finalizando el capítulo dedicado al estudio de la física contenida en la función de dispersión en onda cero, se presenta una formulación alternativa basada en la expansión del operador de Green del hamiltoniano de (4.1).

4.1. Función de onda, energía total positiva

Si la energía se encuentra por encima de cero, el umbral de doble ionización, la función presentará frentes hiperesféricos [103, 104]. Adicionalmente, todos los canales de simple ionización se encontrarán abiertos. El cálculo de la función de onda se acometió con tres tipos de base Sturmiana, difiriendo en su potencial generador. Los utilizados fueron $\mathcal{V}(r) = 1$, $\mathcal{V}(r) = \frac{e^{-r/\alpha}}{r}$ y $\mathcal{V}(r) = \frac{1}{r}$ (truncado). En las tres representaciones la función presentaba los frentes hiperesféricos de la condición de Peterkop [103, 104] además de ciertas estructuras de oscilación rápida y gran amplitud en los bordes. Estas estructuras, se mostrará claramente en la sección siguiente, se corresponden con los canales de simple ionización. En todos los casos se trabajó con dominios radiales de 140 u.a. y 150 funciones por coordenada. La energía y el momento transferido se eligieron dentro del régimen de electrones eyectados de baja energía. Como se alcanza a observar en la figura 4.1, las estructuras de los bordes permanecen con amplitud poco variable en todo el espacio considerado.

La base de Yukawa concentra las oscilaciones cerca del origen, y para un problema donde la base está obligada a expandir energías diferentes en todo el dominio esto no es ideal. Es decir, al ser una base completa sería en principio posible incrementar el número de elementos de base hasta obtener una buena expansión en cada punto del espacio. Esto acarrearía un costo computacional innecesario por dos motivos. Primeramente, el tamaño de las matrices involucradas sería significativamente mayor, mientras que al incorporar funciones de base de gran cantidad de oscilaciones (en la proximidad del origen), se necesita de una mayor cantidad de puntos de cuadratura para evaluar las integrales que surgen de proyectar (4.1) sobre cada elemento de base.

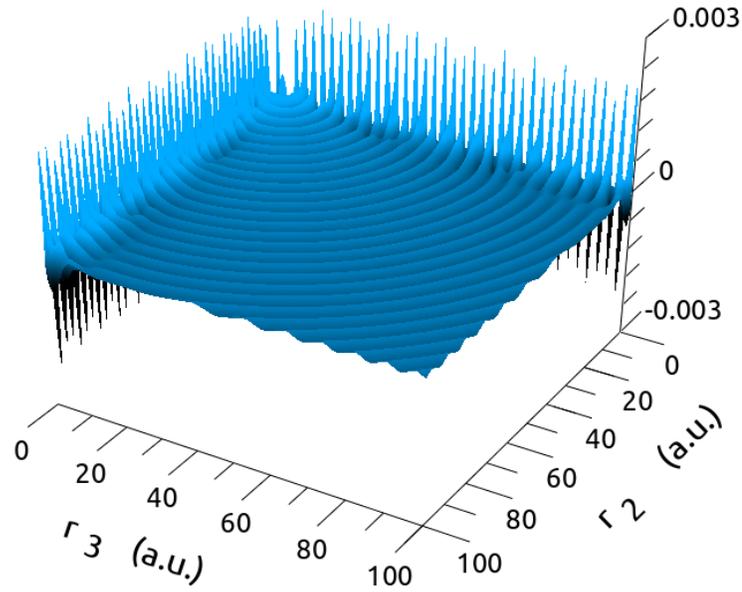


Figura 4.1: Función de onda del modelo de onda S resuelto con una base de generador rectangular.

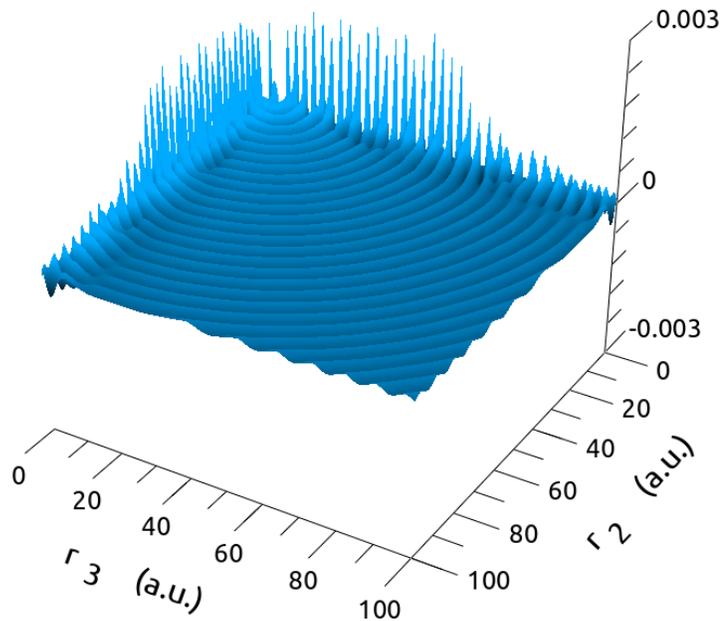


Figura 4.2: Función de onda del modelo de onda S resuelto con una base de generador de Yukawa.

El caso límite de la base de Yukawa con el parámetro $\alpha \rightarrow \infty$ sería un potencial Coulombiano truncado en el borde del dominio, donde abruptamente pasaría a valer

ceros. En principio este potencial concentra en menor medida las oscilaciones. No obstante, para dominios del tamaño considerado en el presente cálculo, la base también encuentra dificultades para lograr una buena descripción de los canales de ionización simple más allá de 80 u.a..

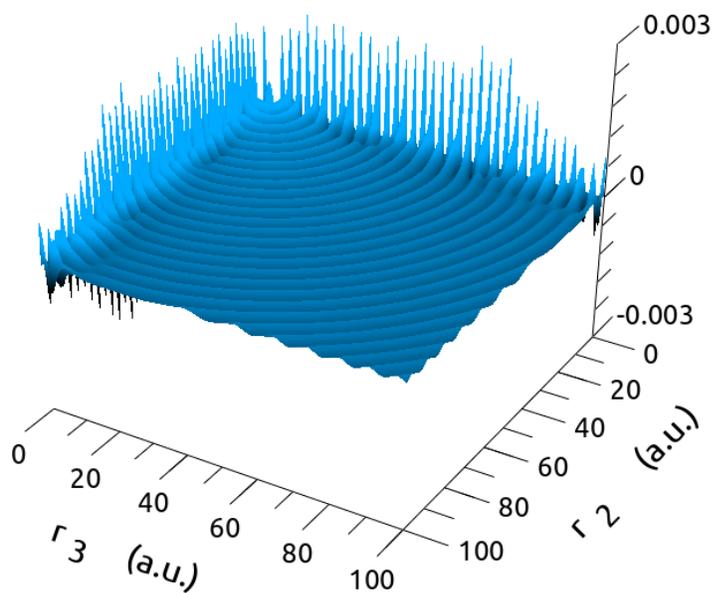


Figura 4.3: Función de onda del modelo de onda S resuelto con una base de tipo Coulombiano truncado.

Se concluye por lo tanto que la manera más eficiente de trabajar en problemas de tres cuerpos, donde la base está forzada a expandir energías no coincidentes con la propia, es utilizar una base dispersa.

En la figura 4.4 se enseña un corte realizado en las funciones de tres cuerpos a lo largo de r_3 para un valor fijo de r_2 . Se observa que, a partir de 80 u.a., la caracterización de los canales de simple ionización por parte de la base de Yukawa es insuficiente. Es decir, pierde la capacidad de expandir correctamente las oscilaciones rápidas propias del primer canal de simple ionización.

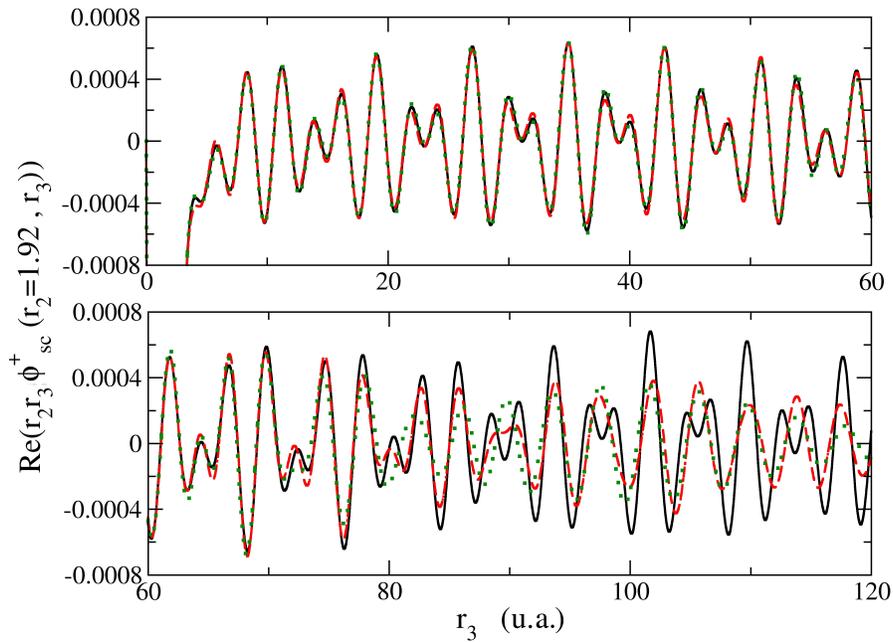


Figura 4.4: Comparación un corte hecho en $r_2 = 1.92$ en las funciones de onda obtenidas con el potencial rectangular (trazo continuo negro), con el de Yukawa (trazo punteado verde) y con el potencial Coulombiano truncado (trazo segmentado rojo).

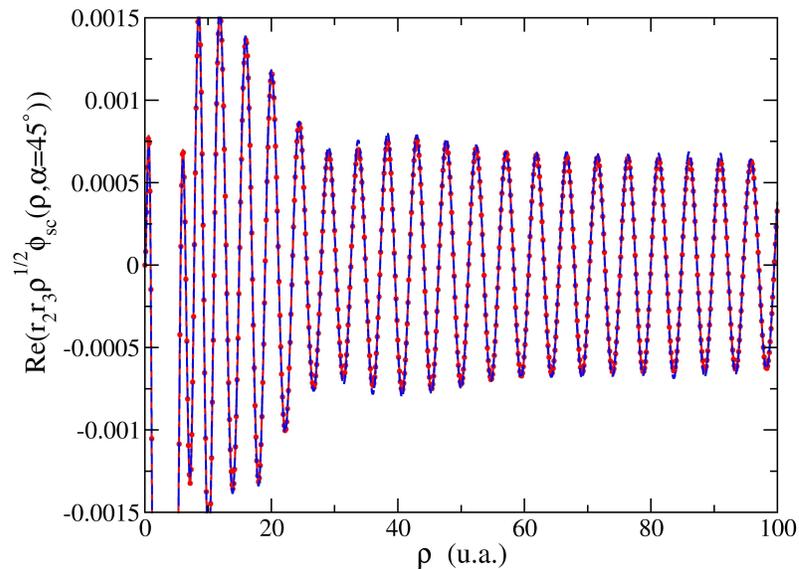


Figura 4.5: Función de onda del modelo de onda S. Se presentan las resoluciones con la base del potencial rectangular (trazo rojo continuo con círculos) y Yukawa (trazo azul a rayas). Corte a un hiperángulo $\alpha = 15^\circ$. Es claramente notable que ambas representaciones consiguen construir una idéntica función de dispersión.

Si bien las funciones de onda discrepan parcialmente en los bordes, a la hora de caracterizar los frentes hipersféricos se obtiene un acuerdo excelente, como se puede observar en los cortes siguientes hechos en $\alpha = 15^\circ$ (fig. 4.5) y $\alpha = 45^\circ$ (fig. 4.5). Este hecho es importante por una razón de consistencia interna en la formulación del problema con bases GSF: la solución física que se obtenga debe ser independiente de qué base elegida para resolver el problema.

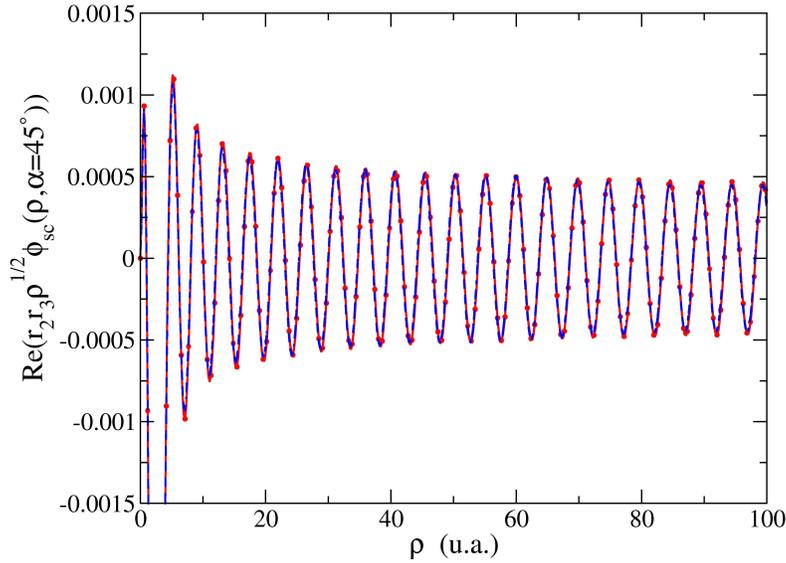


Figura 4.6: Función de onda del modelo de onda S. Se presentan las resoluciones con la base del potencial rectangular (trazo rojo continuo con círculos) y Yukawa (trazo azul a rayas). Corte a un hiperángulo $\alpha = 45^\circ$. Es claramente notable que ambas representaciones expanden la misma función de dispersión.

En la figura 4.7 se muestra la corriente de probabilidad asociada a la función de onda, definida en este modelo de momento angular nulo por:

$$\mathbf{j}_{\text{prob}}(r_2, r_3) = \text{Im} \left\{ \phi_{sc}^{+*}(r_2, r_3) \left[\hat{\mathbf{e}}_2 \frac{d}{dr_2} + \hat{\mathbf{e}}_3 \frac{d}{dr_3} \right] \phi_{sc}^+(r_2, r_3) \right\}. \quad (4.4)$$

Hemos definido los versores $\hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3$ en la dirección de los ejes coordenados del plano (r_2, r_3) . Para evidenciar el comportamiento hipersférico de la solución en la región apartada de los bordes, hemos graficado solamente la dirección de dicha corriente. Es decir, para mejor visualización de este aspecto hemos llevado todos los vectores $\mathbf{j}_{\text{prob}}(r_2, r_3)$ a una misma longitud, pero respetando su dirección.

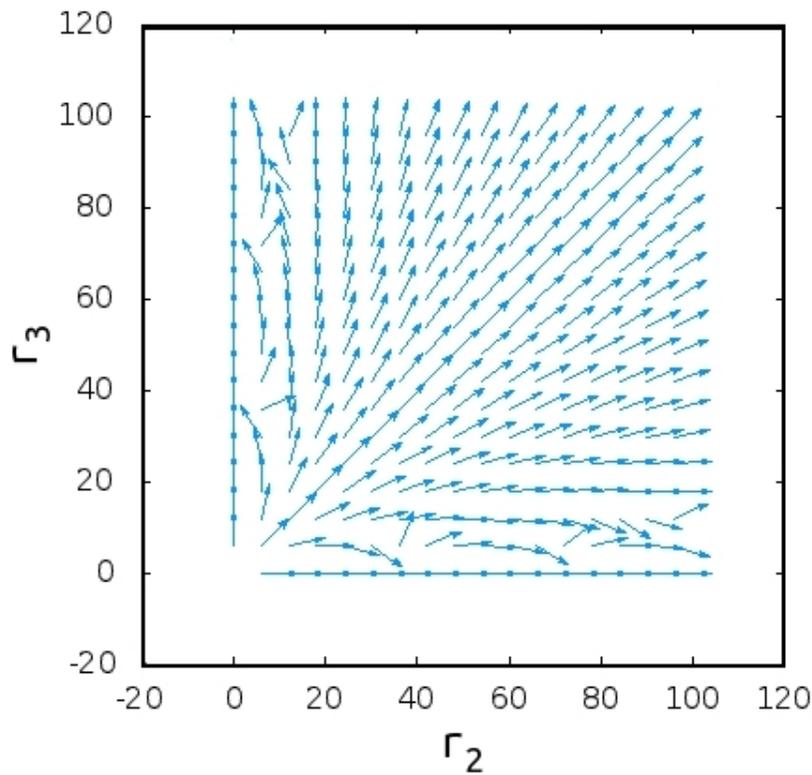


Figura 4.7: Corriente de probabilidad en forma versorial. Se mantiene la dirección de los vectores, pero son normalizados a una misma longitud por claridad visual de la figura.

Las estructuras claramente no hiperesféricas de los bordes se corresponden con canales de ionización simple. Este hecho se establecerá detalladamente en la sección 4.3. Por otro lado, es natural preguntarse si el comportamiento hiperesférico observado en las figuras 4.1 a 4.3 y 4.7 se corresponde verdaderamente con el que prescribe [103], más detallado por Kadyrov y colaboradores [105]. Esto puede proporcionar información acerca de si un dominio de (140 u.a.) x (140 u.a.) puede considerarse en el rango asintótico. Con esta intencionalidad se realiza un ajuste de un corte hiperradial de la función de onda, usando el modelo

$$f_{Fit}(\rho) = A \frac{1}{\rho^p} \cos(\kappa \rho + \lambda_0 \ln(\kappa \rho) + c_0). \quad (4.5)$$

Liberando todos los parámetros para que el algoritmo de Levenberg–Marquardt provisto en el software libre QtiPlot [106], los resultados que se obtuvieron fueron los siguientes

	A	p	κ	λ_0	c_0
Valor	9.48e-04	0.654	1.23273	3.376	137.65
Error	3.0e-06	0.001	4.0e-05	0.003	0.0014

Tabla 4.1: Parámetros de ajuste de un corte hiperradial en $\alpha = 45^\circ$ de la función de onda en momento angular cero. El intervalo hiperradial es desde $\rho = 25$ hasta $\rho = 185$ u.a..

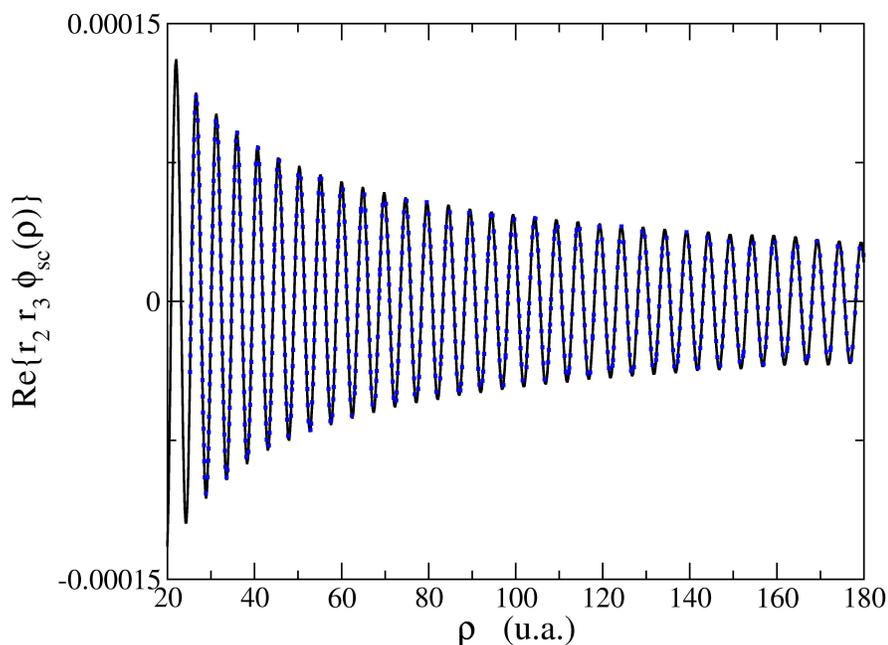


Figura 4.8: Ajuste del un corte hiperradial. Resultado GSF (trazo continuo en negro) y curva de ajuste (puntos azules)

El hipermomento del problema es $\kappa = 1.23207$; obsérvese que el ajuste libre se aproxima considerablemente. En cuanto al decrecimiento de la amplitud, marcado por el parámetro p , podemos afirmar que se aproxima al valor teórico de 0.5, aunque no coincidiendo exactamente. Esto parece indicar que a pesar de la distancia empleada en la resolución, no estamos aún en el rango asintótico propiamente dicho. El ajuste se efectuó desde $\rho = 25$ hasta $\rho = 185$ u.a.. Se puede observar en la figura 4.8 cómo el modelo propuesto (4.5), con una fase logarítmica, consigue ajustar efectivamente la función resultante en un intervalo con un gran número de oscilaciones. Un ajuste similar, pero considerando el hiperradio desde 100 hasta 180 u.a.. obtiene un resultado de p similar al de la tabla 4.1. Una variante del estudio, consistente en fijar el parámetro $p = 0.5$ de acuerdo al esperado teóricamente arroja los valores de la siguiente tabla.

	A	p	κ	λ_0	c_0
Valor	4.4872e-04	0.5 (fijado)	1.2320	3.5	-0.9
Error	2.0e-07	–	0.0006	0.1	0.4

Tabla 4.2: Idem que la tabla 4.1; esta vez con el parámetro p fijado en 0.5 de acuerdo a lo esperado teóricamente. El intervalo hiperradial de este ajuste es desde 100 hasta 180 u.a..

En los dos ajustes presentados en las tablas 4.1 y 4.2 la caracterización del hipermomento resulta sumamente precisa. Ligeramente menos lo es la tasa de decrecimiento de la amplitud de la función, evidenciando que sería recomendable trabajar con dominios radiales aún más extensos. Una alternativa para tratar adecuadamente el comportamiento de los frentes de Peterkop, que ha mostrado su eficiencia consiste en reformular el problema dado en (3.10), en coordenadas hiperesféricas [42]. La misma se halla actualmente en desarrollo por el grupo de investigación para momentos angulares generales. En este caso las propias funciones de base poseen el comportamiento asintótico apropiado, prometiendo buena eficiencia en problemas de tres cuerpos.

4.2. Condiciones de borde y dinámica de expansión de la base Sturmiana

Un aspecto que define la calidad de la solución de dispersión es su capacidad de aproximar las condiciones de contorno del problema a resolver. En particular, una solución de tres cuerpos requiere que la base sea capaz de describir adecuadamente diferentes rangos de energía permitidos a cada electrón.

Teniendo en mente los frentes hiperesféricos de Peterkop [103] en la ecuación (3.18), podemos apreciar que para valores pequeños de r_2 , dichos frentes representan al electrón 3 alejándose con una energía cercana a E_a , mientras que el 2 lo hace con escasa energía. Para otros hiperángulos α tenemos diferentes proporciones en la repartición de la energía total por parte de los electrones eyectados. A medida que el hiperángulo α crece, gradualmente pasamos de una situación en la que el electrón 2 acarrea toda la energía a una en la que es el 3 quien lo hace.

Si las condiciones de borde, que en nuestra metodología se imponen a través de la base GSF, pueden aproximar o replicar las de la solución esperada, se introducirán escasas contribuciones espurias por este desacuerdo en la frontera. En las referencias [40] y [99] se estudiaron cuáles serían las energías de base óptimas para caracterizar el

doble continuo. Se encontró empíricamente que las funciones de base para cada electrón debían poseer una energía coincidente con la total disponible en el problema.

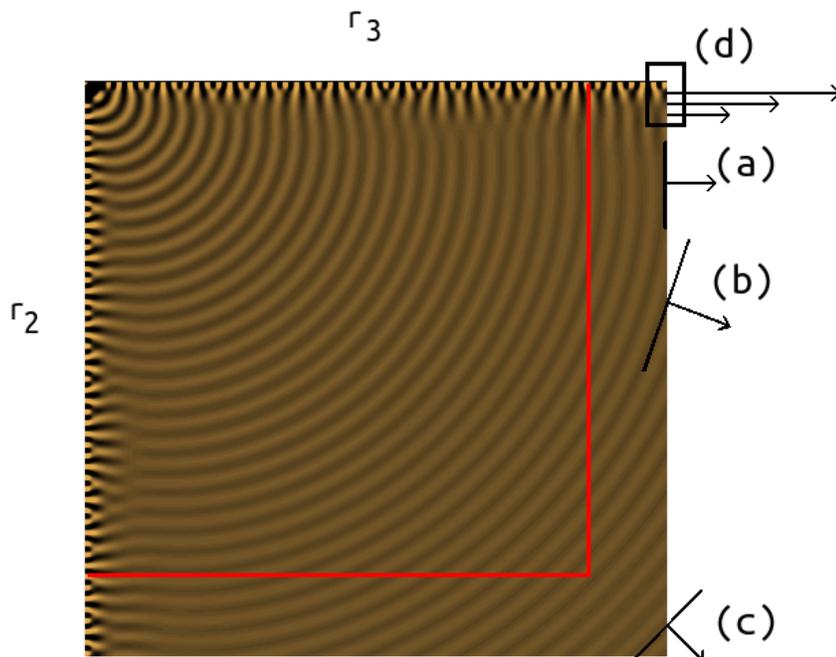


Figura 4.9: Caracterización de las condiciones en las fronteras de la caja.

Aquí proporcionaremos una justificación de por qué es ésta la mejor elección para modelar el doble continuo. Se puede establecer una analogía con el problema de un escalón de potencial, cubierto en los cursos introductorios de Física Moderna o Mecánica Cuántica. Obsérvense los frentes hiperesféricos de la figura 4.9. Requeriremos definir tres vectores pertenecientes al espacio (r_2, r_3) para el argumento que seguirá: \hat{e}_2, \hat{e}_3 son versores que se alinean con los ejes r_2 y r_3 respectivamente, y $\hat{\rho} = \cos(\alpha)\hat{e}_2 + \sin(\alpha)\hat{e}_3$ un versor normal a los frentes hiperesféricos. Comencemos describiendo la región de $\alpha \sim 0$ (sector (a) en la figura 4.9). Aquí, el electrón 2 emerge con prácticamente toda la energía disponible, mientras que el 3 apenas posee energía cinética para distanciarse del núcleo. Estos frentes hiperesféricos tienen un vector de onda dado por $\kappa = \sqrt{2E_a}\hat{\rho}$, que para $\alpha \sim 0$ prácticamente estará alineado con \hat{e}_2 . En esta región el vector de onda κ coincide con el de la base, $\mathbf{k}_b = \sqrt{2E_a}\hat{e}_2$. Conforme el hiperángulo crece, la orientación del vector de onda hiperesférico va variando (sector (b) en la figura 4.9), y el

acuerdo en la frontera $r_2 = R$ se torna menos exacto para valores crecientes de r_3 . La proyección del vector de onda en la dirección de \hat{e}_2 será $\cos(\alpha) \sqrt{2E_A}$. Dado que $\cos(\alpha) \approx 1 - \frac{1}{2}\alpha^2$, el acuerdo no se deteriora de manera importante, cuanto menos para α pequeños. Cuando α se aproxima a $\frac{\pi}{4}$ (sector (c) en la figura 4.9) la componente de κ a lo largo del eje \hat{e}_2 es $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sqrt{2E_a}$. Esta es la zona en la que el acuerdo está en su peor condición. Luego, con α creciendo nuevamente, el acuerdo del vector de onda del frente hipersférico y de la base comienza a mejorar nuevamente al recorrer $r_3 = R$ decreciendo en r_2 . Por lo tanto, para evitar las zonas afectadas por un acuerdo regular en la condición de borde en el sector (c) ($\alpha \sim \pi/4$) y tener certeza de que la función está bien calculada, será suficiente con analizarla dentro de la zona delimitada por $r_2, r_3 \leq 0.8 R_{max}$.

Se analiza ahora la situación (d) de la figura 4.9. Aquí se hallan muy fuertemente representados los canales de simple ionización. Cada uno de ellos poseerá una energía diferente, relacionada con la profundidad de los estados del núcleo residual. Aquí la base representa con corrección aquellos canales cuya energía se asemeje a la de la base. La aproximación es mejor conforme la diferencia relativa entre la energía de cada canal y la de la base sean menores. Es decir, mientras mayor sea la energía total E_a respecto de los estados ligados del núcleo residual, mejor calidad se obtiene en la representación de la simple ionización. No obstante, y como se verá en el apartado donde estudiaremos dichos canales, los mismos, en particular los más profundamente ligados, alcanzan su comportamiento asintótico rápidamente. Es posible entonces realizar un cálculo separado para obtener una buena descripción de aquellos canales que no sean bien abarcados por la resolución de toda la función de $(e, 3e)$.

Se debe señalar que los argumentos expuestos en esta sección están basados en que la base posee capacidad de expansión en todo el dominio de la resolución. Las estrategias exploradas en las secciones 2.2 y 2.3 sobre problemas de dos cuerpos presentan perspectivas de relajar las restricciones que afectan a la base GSF cuando debe expandir el frente hipersférico y los diversos canales de simple ionización de un problema de tres cuerpos. La implementación de aquellas mejoras puede representar una ventaja sustancial para el estudio de la ionización simple, que con los códigos disponibles hasta el momento es posible, pero requiere de cálculos separados para algunos canales en particular, hecho que la torna poco practicable para un problema con ondas parciales

más allá de la S .

Existe un factor ya verificado que en cierta medida permite mejorar la calidad de las soluciones obtenidas a pesar de estar *aproximándose* las condiciones de borde correctas, hiperesféricas. El mismo consiste en extender las integrales de solapamiento entre dos GSF, hasta el infinito de manera analítica como se discutió en la sección 2.1.2. Se observa cierta mejora en la descripción del doble continuo y canales de ionización simple en los que el electrón emitido no adquiera una cantidad elevada de energía respecto de E_a .

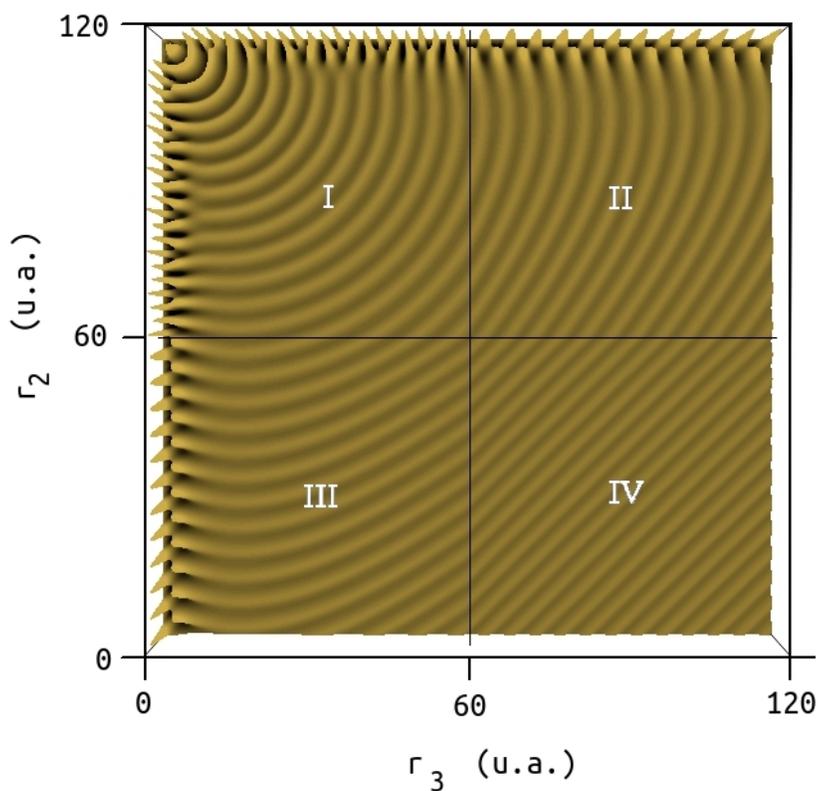


Figura 4.10: Función de onda resultante de realizar una resolución en una caja de 60 u.a. de lado y luego una prolongación asintótica de los elementos de base Sturmiana. La región I se corresponde con la caja donde se resolvió el problema. Dentro de la misma la base es capaz de expandir de manera acorde la solución. En las regiones II y III la base se ha tornado asintótica en una de las dos coordenadas. En la región IV la base es asintótica en ambas coordenadas, resultando en frentes planos.

Como parte del estudio de la dinámica de expansión de la base se realizó una prolongación asintótica de sus elementos. Luego se evaluó la función de onda normalmente, obteniéndola no solo en el dominio considerado para la resolución, sino también fuera

del mismo. Claramente no se puede aspirar a disponer de una solución válida fuera de la caja, puesto que allí la base no posee capacidad de expansión. Sin embargo, la función de onda obtenida en algunas regiones presentaba características correctas.

De acuerdo a la figura 4.10, plantearemos cuatro secciones distintas, numeradas de I a IV. La I se corresponde con la caja considerada. La calidad de la expansión aquí es la que se ha analizado al comienzo de esta sección.

En los sectores II y III la base se torna asintótica en una de las dos coordenadas, pero no en la otra. Se puede notar que aquí los canales de simple ionización son deformados, quedando con una energía que no es la propia de cada uno, sino que se amoldan todos a la energía de la base, E_s , que a su vez se escoge igual a E_a . Aquí existe una región que contiene la función de onda correctamente representada; aquella donde la dirección de salida es coincidente con alguno de los versores \hat{e}_i . Los frentes hiperesféricos aquí se ven seriamente distorsionados.

En el sector rotulado como IV podemos observar que la función ya no está bien descrita porque en ambas coordenadas se ha alcanzado el carácter asintótico de la base. La misma es aquí incapaz de expandir y por lo tanto lo que se obtiene son frentes planos angulados de acuerdo a la energía de la base de cada electrón. En estos cálculos dichas energías eran coincidentes (una sola E_s igual para las bases de ambos electrones), por lo cual los frentes tienen una dirección normal orientada en $\alpha = \pi/4$.

4.3. Estudio de los canales de simple ionización

Hemos mencionado las estructuras de rápida oscilación que se observan en las figuras 4.1, 4.2 y 4.3 y nos hemos referido a ellas como canales de ionización simple. En esta sección mostraremos que poseen no solo la energía apropiada, sino que también el comportamiento asintótico correspondiente a la ionización simple. En primera instancia se proyecta la función $\phi_{sc}(r_2, r_3)$ contra cada estados ligados de He^+ , $\phi_n(r_3)$. Esto da lugar a una función, que denominaremos $\frac{\xi_n(r_2)}{r_2}$. Dicha función se extiende hasta 140 u.a., como la función $\phi_{sc}(r_2, r_3)$ de donde procede. Seguidamente se expande $\xi_n(r_2)$ en una base GSF auxiliar $\mathcal{S}_m^{(n)}(r_2)$ con una energía $E(n) = E_a + \frac{Z^2}{2n^2}$ y carga asintótica $Z - 1$, aún cuando el potencial auxiliar se elige como $\mathcal{U}(r) = -\frac{Z}{r_2}$. La carga y energía asintóticas son las que se espera que contenga $\xi_n(r_2)$ a grandes distancias, pero al menos en las proximidades del núcleo es de esperar que el electrón emitido

perciba la carga nuclear Z al completo y por ello se toma $\mathcal{U}(r) = -\frac{Z}{r_2}$. La expansión se realiza en un dominio de 70 u.a., que es significativamente más limitado que las 140 u.a. donde está definida $\xi_n(r_2)$. Por tanto, si fuera de este radio la expansión es coincidente con $\xi_n(r_2)$, necesariamente se habrá demostrado que $\xi_n(r_2)$ verifica exactamente las condiciones necesarias para describir de manera correcta al electrón emitido. Así, se habrá probado que las estructuras presentes en los bordes de $\phi_{sc}(r_2, r_3)$ son efectivamente los canales de ionización simple.

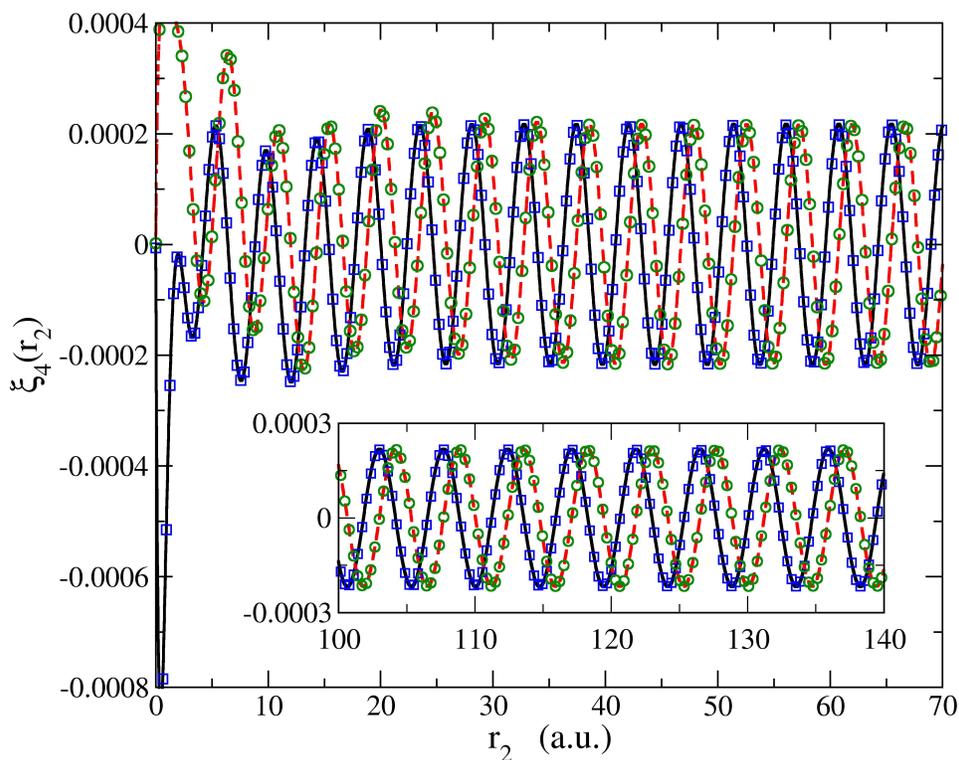


Figura 4.11: Función de ionización simple $\xi_4(r_2)$ (parte real: cuadrados azules, parte imaginaria: círculos verdes) y su reexpansión en la base auxiliar $\mathcal{S}_m^{(4)}(r_2)$ (parte real: trazo negro continuo, parte imaginaria: trazo rojo segmentado). El comportamiento asintótico de $\xi_4(r_2)$ coincide en energía de salida y carga asintótica con la base auxiliar $\mathcal{S}_m^{(4)}(r_2)$. Este hecho confirma que $\xi_4(r_2)$ se corresponde con la emisión del electrón 2 dejando al 3 ligado en el estado $4S$ de He^+ .

En las figuras 4.11 y 4.13 se muestran a las reexpansiones de los canales $\xi_4(r_2)$ y $\xi_5(r_2)$ en términos de las bases auxiliares $\mathcal{S}_m^{(4)}(r_2)$ y $\mathcal{S}_m^{(5)}(r_2)$ respectivamente. En ambos casos se puede notar que el comportamiento asintótico de $\xi_4(r_2)$ y $\xi_5(r_2)$ es alcanzado dentro de las 60 u.a.. Se hace evidente que las funciones $\xi_4(r_2)$ y $\xi_5(r_2)$ poseen el comportamiento asintótico esperado en cuanto energía y carga asintótica, aún cuando

las mismas no se imponen en el momento de hallar $\phi_{sc}(r_2, r_3)$. Se observa además que ambas funciones representan ondas salientes prácticamente puras. En conclusión, son efectivamente las funciones de onda que describen la eyección de uno de los electrones con la energía E_n y percibiendo, por el apantallamiento del electrón ligado, una carga asintótica $Z - 1$.

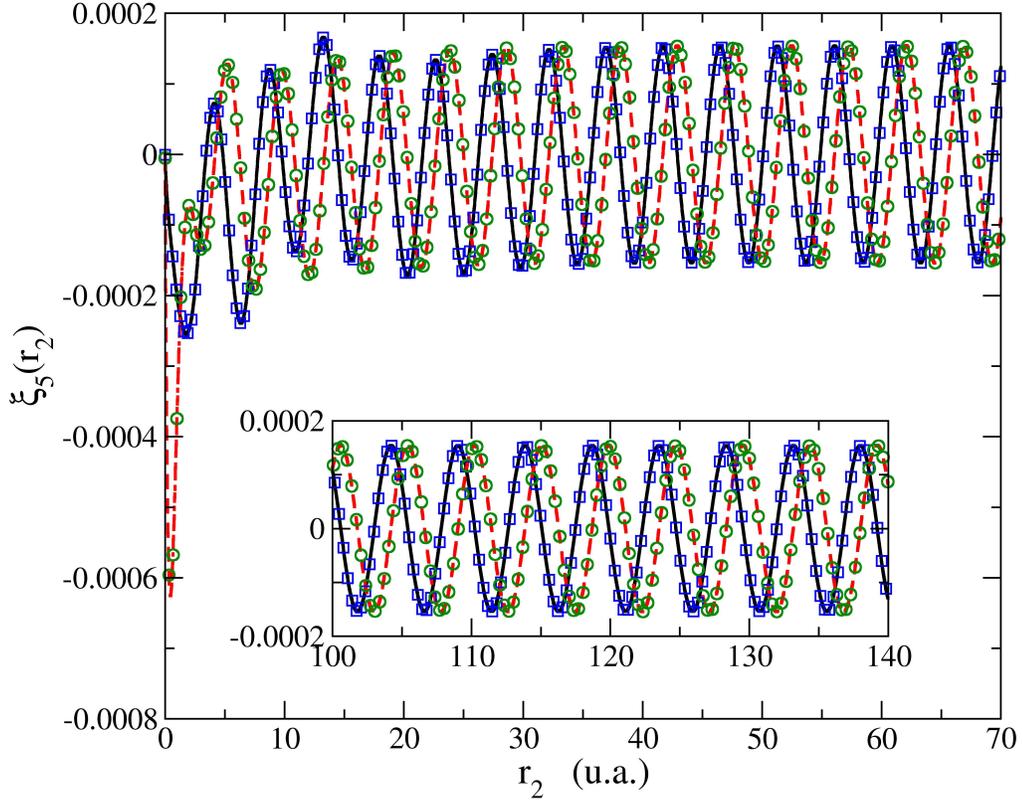


Figura 4.12: Función de ionización simple $\xi_5(r_2)$ (parte real: cuadrados azules, parte imaginaria: círculos verdes) y su reexpansión en la base auxiliar $\mathcal{S}_m^{(5)}(r_2)$ (parte real: trazo negro continuo, parte imaginaria: trazo rojo segmentado). El comportamiento asintótico de $\xi_5(r_2)$ coincide en energía de salida y carga asintótica con la base auxiliar $\mathcal{S}_m^{(5)}(r_2)$. Este hecho confirma que $\xi_5(r_2)$ se corresponde con la emisión del electrón 2 dejando al 3 ligado en el estado $5S$ de He^+ .

Las funciones $\xi_4(r_2)$ y $\xi_5(r_2)$ poseen energías de emisión de $E_4 = 0.884$ y $E_5 = 0.839$ u.a., relativamente cercanas a la energía de la base $S_{n_a}^+(r_2)$, $E_s = 0.759$. En esta situación dicha base logró expandir adecuadamente $\xi_4(r_2)$ y $\xi_5(r_2)$ en el dominio de resolución (140 u.a. x 140 u.a.). En la figura 4.13 se presenta el caso de un caso donde, por tener aquel canal de simple ionización una energía de salida demasiado apartada de $E_s (= E_a)$, la correspondiente $\xi_n(r_2)$ no posee comportamiento puramente saliente. Se

aprecia que la parte real e imaginaria oscilan con amplitudes diferentes. $\xi_n(r_2)$ puede entonces pensarse como una combinación de una componente saliente y una entrante (no deseada, introducida en la obtención de $\phi_{sc}(r_2, r_3)$).

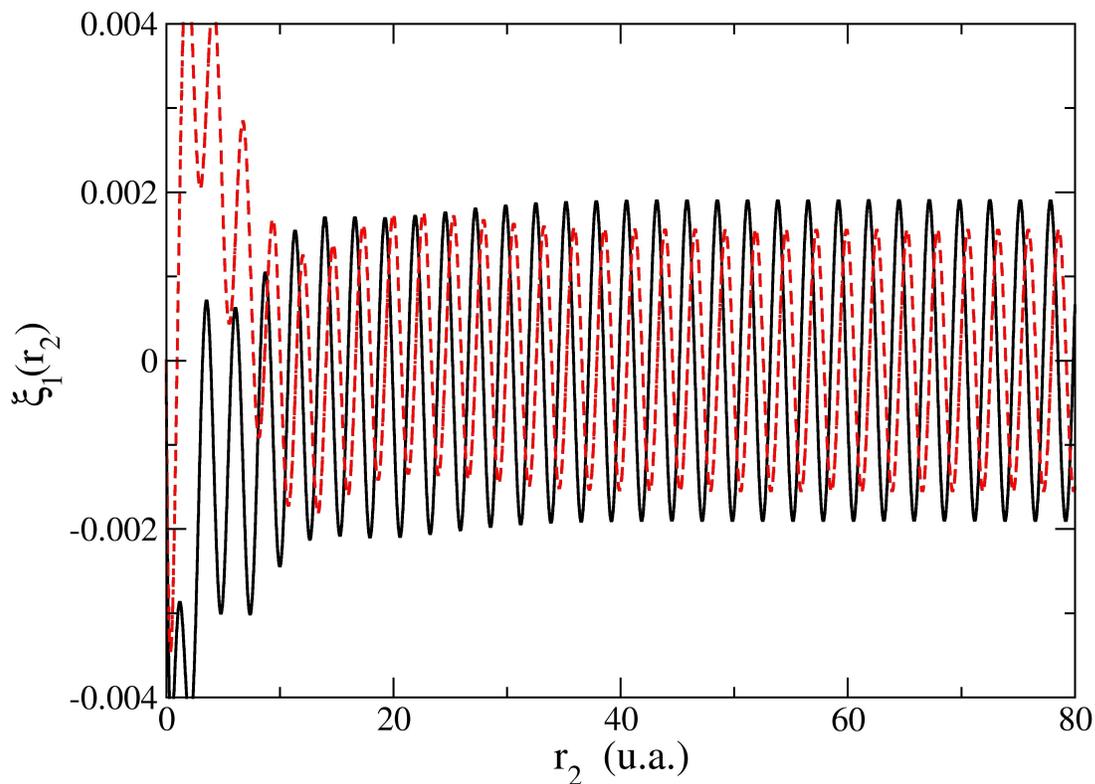


Figura 4.13: Función de ionización simple $\xi_1(r_2)$ (parte real en trazo continuo negro; parte imaginaria en trazo rojo segmentado). Se aprecia que aún en el rango asintótico la amplitud de la componente real e imaginaria no coinciden. Por lo tanto, $\xi_1(r_2)$ no se comporta como una onda saliente pura. Este problema tiene origen en que $E_s = E_a = 0.759$ mientras que $E_1 = 2.759$.

En los casos donde la función $\xi_n(r_2)$ se halla bien descrita, formando una onda puramente saliente, la reexpansión en la base $\mathcal{S}_m^{(n)}(r_2)$ y la propia $\xi_n(r_2)$ son coincidentes aún fuera del dominio donde $\mathcal{S}_m^{(n)}(r_2)$ es capaz de expandir. Cuando $\xi_n(r_2)$ no está bien caracterizada, las expansiones únicamente funcionan dentro del radio de 70 u.a., pero fuera del mismo, discrepan.

Para cuantificar en qué medida las soluciones resultan contaminadas por una componente entrante planteamos que, asintóticamente la solución se comporta como una combinación de las funciones Coulombianas linealmente independientes, $H^\pm(Z, E_n, r_2)$.

Las funciones $\xi_n(r_2)$ y $H^\pm(Z, E_n, r_2)$ se evalúan en dos radios distintos, R_1, R_2 , pertenecientes al rango asintótico de $\xi_n(r_2)$:

$$A_+^{(n)} H^+(Z, E_n, R_1) + A_-^{(n)} H^-(Z, E_n, R_1) = \xi_n(R_1) , \quad (4.6)$$

$$A_+^{(n)} H^+(Z, E_n, R_2) + A_-^{(n)} H^-(Z, E_n, R_2) = \xi_n(R_2) . \quad (4.7)$$

Separando $A_+^{(n)}$ y $A_-^{(n)}$ obtenemos:

$$A_+^{(n)} = \frac{\xi_n(R_1) H^-(Z, E_n, R_2) - \xi_n(R_2) H^-(Z, E_n, R_1)}{H^+(Z, E_n, R_1) H^-(Z, E_n, R_2) - H^-(Z, E_n, R_1) H^+(Z, E_n, R_2)} , \quad (4.8)$$

$$A_-^{(n)} = \frac{\xi_n(R_2) H^+(Z, E_n, R_1) - \xi_n(R_1) H^+(Z, E_n, R_2)}{H^+(Z, E_n, R_1) H^-(Z, E_n, R_2) - H^-(Z, E_n, R_1) H^+(Z, E_n, R_2)} \quad (4.9)$$

En la tabla 4.3 se muestran los valores numéricos de las amplitudes de simple ionización, $A_+^{(n)}$. Puede observarse de la tabla 4.3 y en la figura 4.1 que, conforme crece n , las amplitudes $A_+^{(n)}$ se reducen y progresivamente estas soluciones de simple ionización se difuminan con el doble continuo. Si se desea obtener una descripción precisa de un dado canal ionización simple $\xi_n(r_2)$, tal que el electrón ligado queda en uno de los estados menos excitados, es posible resolver el problema de tres cuerpos empleando una base $S_{n_a}^+(r_2)S_{n_b}^+(r_3)$ con energía $E_s = E_n$. De esta manera, componente $\xi_n(r_2)$ resulta libre de contribuciones entrantes, como podemos ver en los ejemplos (a),(b),(c) de la tabla.

n	Energía de emisión (u.a.)	$ A_+^{(n)} \times 10^3$	$ A_-^{(n)}/A_+^{(n)} (\%)$
1	2.759000	1.3524	10.6
2	1.259000	0.7161	6.14
3	0.981222	0.3345	3.30
4	0.884000	0.2126	1.92
5	0.839000	0.1521	1.21
6	0.814555	0.1149	0.79
7	0.799816	0.0912	0.55
1a	2.759000	1.3625	0.02
1b	2.759000	1.3426	0.15
2b	1.259000	0.4433	0.32

Tabla 4.3: Amplitudes de transición para los canales de ionización simple: valores absolutos de las componentes salientes y cocientes de los valores absolutos de las amplitudes entrante y saliente. Idealmente, dichos cocientes serían nulos. Hemos observado que si son menores o del orden de $\sim 2\%$ el comportamiento asintótico de $\xi_n(r_2)$ se torna indistinguible de una onda saliente pura. Mostramos también las amplitudes de ionización para los primeros canales calculadas en resoluciones de tres cuerpos con bases de energía coincidente con la de salida del canal respectivo. Estas resoluciones separadas se efectúan en dominios significativamente menores: 30 u.a. (1a) y 60 u.a. (1b y 2b).

Se pueden ofrecer dos alternativas a la ya propuesta de realizar resoluciones separadas para los canales más profundamente ligados. La primera opción, más inmediata, pero potencialmente muy efectiva es incorporar a los códigos existentes la opción de trabajar con la base de tipo Woods–Saxon de acuerdo a los razonamientos de la sección 2.2. Incluso el canal con más distancia a la base en términos de energía podría describirse de manera aceptable dentro del rango del potencial generador. La otra estrategia, que requeriría reformas importantes en los códigos ya desarrollados, sería la de incorporar bases GSF con rotación compleja de la coordenada. Las mismas se pueden generar con la formulación de diferencias finitas presentada en la sección 1.5.1, y según los resultados de la sección 2.3, poseen buenas perspectivas para expandir energías diferentes a la propia. Disponiendo de un método capaz de obtener en una sola resolución las amplitudes de ionización–excitación a cada canal, el tratamiento de este fenómeno más allá del modelo de onda S se vuelve practicable con la metodología GSF.

Para concluir el análisis de la separación de los canales de simple ionización mostraremos en las figuras 4.14 y 4.15 cómo varía la corriente de probabilidad al ir removiendo los primeros canales de ionización simple. Aquí, a diferencia de en la sección 4.1, decidimos utilizar una escala de tipo logarítmico. La distorsión que se observa sobre la corriente de probabilidad afecta únicamente el comportamiento sobre los bordes, es decir donde se concentran los canales de simple ionización. La región de doble continuo, en cambio, no sufre modificaciones.

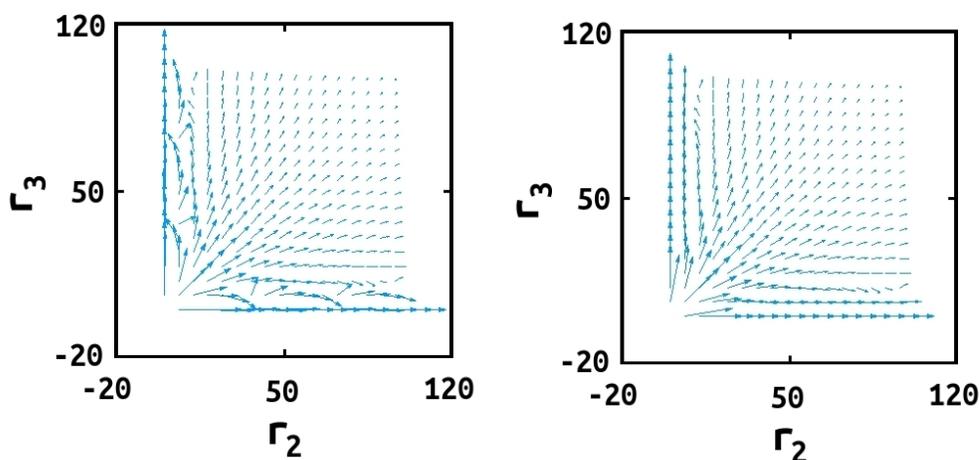


Figura 4.14: Corriente de probabilidad de la función de dispersión. Izquierda: Sin remover ningún canal. Derecha: con los dos primeros canales de simple ionización removidos.

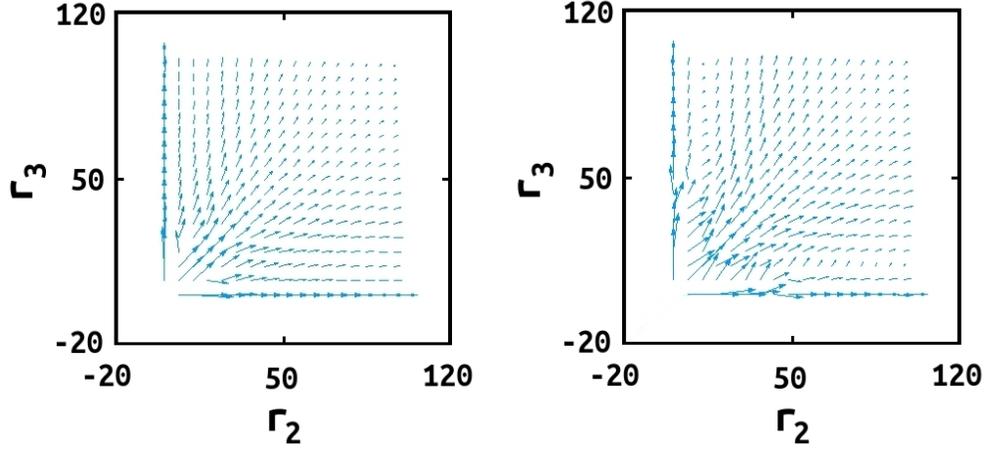


Figura 4.15: Corriente de probabilidad de la función de dispersión. Izquierda: con los primeros cuatro canales de simple ionización removidos. Derecha: con los primeros seis canales de ionización removidos. Podemos evidenciar que el frente hiperesférico permanece esencialmente inalterado, mientras que las estructuras de los bordes se afectan radicalmente.

4.4. Relevancia de los elementos de base

En este apartado discutiremos la preponderancia de los elementos de base, así como posibles formas para adoptar un ordenamiento más eficiente de las bases GSF. En este trabajo las GSF para cada valor de momento angular son indexadas de acuerdo al módulo de su autovalor. Aún cuando esto resulta adecuado, es de interés actual conocer más detalladamente en qué medida son necesarios los elementos de base según el carácter de sus autovalores. La información sobre cuáles elementos de base participan más significativamente puede emplearse en cálculos futuros, permitiendo un *educated guess* mejor orientado a la hora de seleccionarlos, reduciendo el tamaño de las matrices involucradas y con esto los tiempos y recursos computacionales necesarios.

Comenzamos el análisis de la base con la solución en onda cero llevada a cabo con la base del potencial rectangular, graficada en la figura 4.1. Los elementos de base son productos de GSF en cada coordenada, de acuerdo a (4.3). La energía total disponible para el sistema es de 0.759, y la misma se eligió para la E_s de los conjuntos de base $\{S_{n_a}(r_2)\}$ y $\{S_{n_b}(r_3)\}$.

Se muestran relevantes los elementos de base de tipo repulsivo, es decir, de oscilación más lenta que la que impondría la energía E_s . Esto es esperable debido a que, según se ha discutido en la sección 4.2 el frente hiperesférico impone una repartición de la

energía total dependiente del hiperángulo α . Según se discutió, el frente describe todas las posibles combinaciones de energías E_2, E_3 para los electrones del blanco, tal que $E_2 + E_3 = E_a$. Por lo tanto, será necesario para describir adecuadamente el frente hipersférico una cantidad de elementos de base cuya longitud de onda sea mayor que la correspondiente a la energía E_a . Para un potencial generador de tipo rectangular esto se traduce en elementos de base con autovalor de parte real positiva.

Se aprecian además dos pares de líneas claramente separadas del resto de la estructura. Estas corresponden a pares de GSF que contienen los elementos *pseudoligados* que replican los estados $1S$ y $2S$ del ión He^+ . Tal como se analizó en la sección previa, se ocupan de expandir los primeros dos canales de simple ionización.

Los productos de GSF tales que $\text{Re}\{\beta_2\}, \text{Re}\{\beta_3\} < -2.0$ contienen oscilaciones demasiado rápidas en ambas coordenadas, ya que en el canal de ionización simple con mayor energía de emisión un electrón es despedido del átomo con 2.759 u.a. de energía. Se aprecia claramente en la figura 4.16 que estos productos son prescindibles en una resolución.

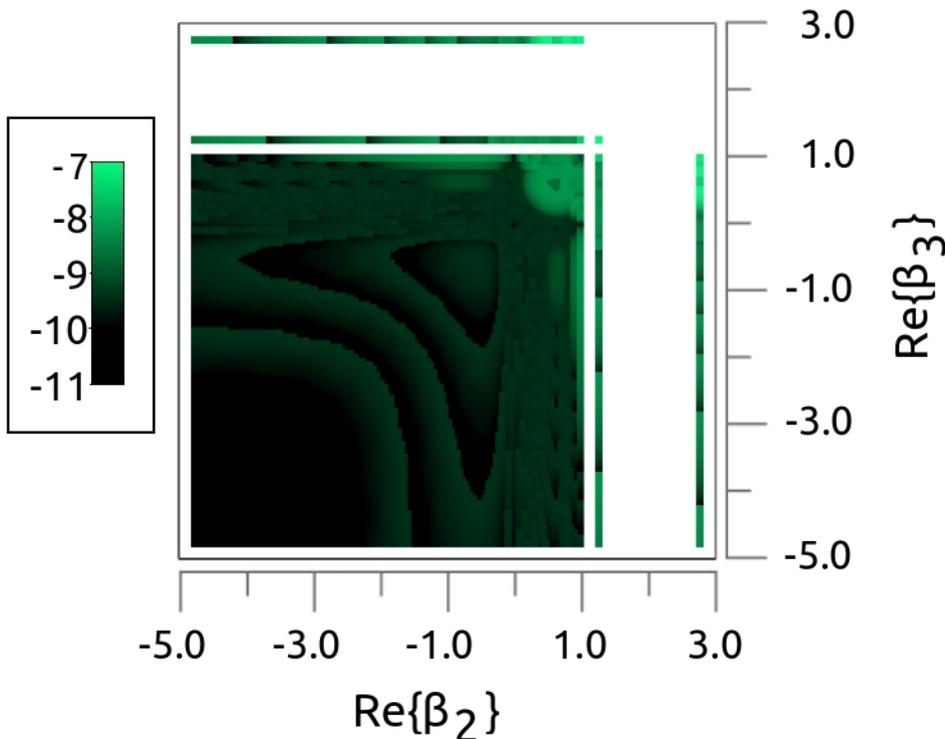


Figura 4.16: Logaritmo decimal del módulo de los coeficientes de la función de $(e, 3e)$ en onda S con la base del potencial rectangular.

Se advierte en la figura 4.16 una estructura en forma de cúpula centrada aproximadamente en $Re\{\beta_2\} = 0.25 = Re\{\beta_3\}$, cuya estructura precisa un mayor detalla para ser analizada. Es por esto que presentamos un acercamiento a dicho domo en la figura 4.17. Existe una clara frontera sobre las líneas $Re\{\beta_2 = 0,759$ y $Re\{\beta_3 = 0,759$. Hacia abajo y a la izquierda de la frontera los elementos de base son del continuo tanto en r_2 como en r_3 , mientras que en los otros cuadrantes al menos en una coordenada se tiene un estado *pseudoligado*. La estructura en forma de cúpula, por su parte, implica la mayor parte de la constitución el frente de doble continuo, puesto que aquí se ubican los elementos que son producto de dos GSF con oscilaciones más lentas que las marcadas por la energía total del problema. En las proximidades de la frontera las contribuciones de los estados *pseudoligados* se difuminan con el continuo y no es claro si conforman estrictamente canales de simple ionización o si participan en el doble continuo.

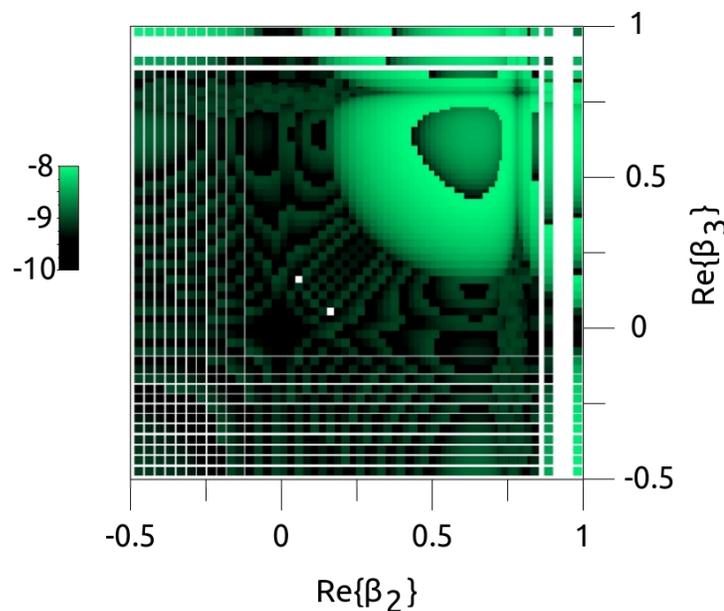


Figura 4.17: Logaritmo del módulo de los coeficientes de la función de $(e, 3e)$ en onda S con la base del potencial rectangular. Acercamiento a la estructura centrada aproximadamente en $\beta_2 = 0.25 = \beta_3$.

Analizaremos ahora la composición de la función de onda de tres cuerpos del mismo problema, pero calculada con la base del potencial de Yukawa. En este caso también vale $E_s = E_a$. A primera vista se llegan a apreciar cuatro *plateaux*, limitados por dos *barreras* que se extienden hasta los extremos del dominio mostrado. También se hace evidente una mayor variación de la magnitud de los coeficientes de la expansión de

la solución de dispersión. En la figura 4.16 se observa que los valores absolutos de los coeficientes difieren entre sí en, como máximo ocho órdenes de magnitud. Diferente es en la figura 4.18, donde se aprecian treinta órdenes de magnitud involucrados.

La participación de elementos de base constituidos por productos repulsivo–repulsivo a todas luces es irrelevante para la solución, toda vez que se apartan levemente de cero los módulos de sus autovalores.

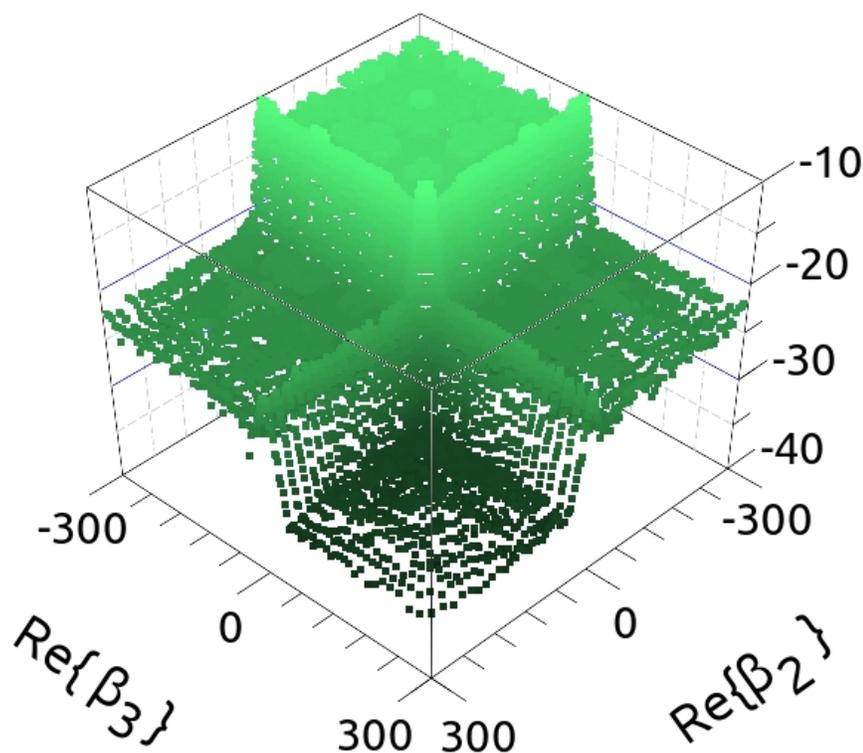


Figura 4.18: Logaritmo del módulo de los coeficientes de la función de $(e, 3e)$ en onda S con la base de Yukawa.

La configuración óptima para una base de tipo Yukawa consiste entonces en seleccionar unos pocos elementos de tipo repulsivo, de magnitud cercana a cero, tomando los restantes elementos de base asociados a autovalores de tipo atractivo (oscilaciones más rápidas). Es decir, seleccionar las configuraciones (β_2, β_3) correspondientes al *plateau* más elevado, junto con el *muro* que lo delimita. El resto de los aportes son diez o más órdenes de magnitud más reducidos y podemos afirmar que, por lo tanto, podrían obviarse del cálculo. Finalmente, debemos destacar que la solución calculada con la base de Yukawa no posee adecuadamente descrito el primer canal de ionización simple,

debido a que serían necesarios elementos de base con mayor rapidez de oscilación hacia los valores máximos de r_2 o r_3 (ver sección 1.4). Esto se corregiría incorporando más elementos de base atractivos, si bien sería una manera ineficiente de hacerlo, ya que los mismos presentan oscilaciones muy rápidas cerca del origen, donde ya se ha logrado una buena expansión de la función de onda de dispersión.

Es un objetivo a futuro aplicar el mismo tipo de análisis de la preponderancia de los elementos de base en resoluciones completas del problema de $(e, 3e)$. Debido a la mayor cantidad de ondas parciales, los recursos computacionales requeridos son significativamente más importantes, y existe menor margen para la inclusión de elementos de base de escaso aporte a la solución.

4.5. Caso particular : $E = 0$

Tanto para verificar que la metodología permite considerar el caso umbral como para estudiar en este régimen, se calculó la función de onda de $(e, 3e)$ considerando la energía total igual a cero. Una interpretación clásica implicaría que los electrones eyectados son capaces de distanciarse indefinidamente del núcleo, pero con una velocidad tendiente a cero.

Peterkop determinó [107], dentro el marco semiclásico de la aproximación WKB [62, 108], el comportamiento asintótico de la función de onda para valores grandes de ambos radios. Por otra parte, dentro del formalismo cuántico, Klar y Schlecht [109] formularon también este comportamiento. La función de onda en la región de doble continuo debe verificar:

$$\Phi_{sc}^+(\mathbf{q}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \rightarrow \frac{1}{\rho^{\frac{3}{2}}} e^{A(\alpha, \theta)\sqrt{\rho}} \quad (4.10)$$

donde la función $A(\alpha, \theta)$ depende del ángulo hiperesférico α y de $\theta = \cos^{-1}(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_3)$. A pesar del decrecimiento de la amplitud, más lento con ρ que en el caso de energía positiva, debido a la presencia de la raíz cuadrada en la exponencial oscilatoria, la corriente de probabilidad decrece con $\frac{1}{\rho^{\frac{3}{2}}}$ a grandes distancias. Este valor es correcto, ya que preserva invariante el flujo de probabilidad a través de superficies de ρ constante [103]. Este caso plantea un desafío mayor a la base Sturmiana, debido a que la función esperada presentará frentes hiperesféricos de longitud de onda dependiente de la coordenada ρ . En otras palabras, la energía más apropiada para minimizar los *rebotes* es ahora dependiente del tamaño de la caja. El cálculo de la figura 4.19 se realizó en un

dominio de 170 u.a., empleándose una base de 200 funciones por coordenada con una energía de 0.04 u.a.. Esta energía se determinó de un cálculo preliminar en una caja más reducida, de 100 u.a., con menos elementos de base (120). Gráficamente se estimó, de este preliminar, la longitud de onda de los frentes hipersféricos en proximidad del extremo de la caja. Con esta información, y asumiendo de acuerdo a (4.10) un comportamiento recíproco con ρ para la energía local de los frentes, se estimó la energía que portarían éstos cerca de las 170 u.a. de hiperradio.

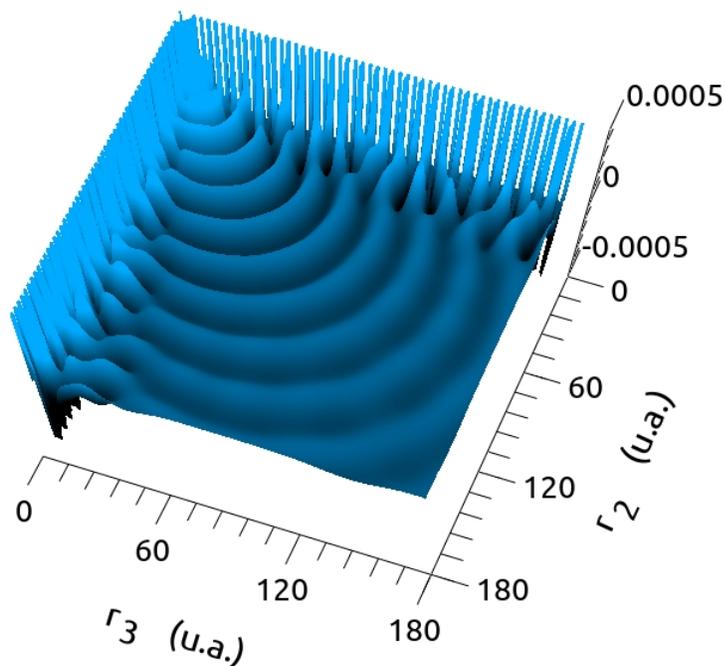


Figura 4.19: Función de dispersión correspondiente a una energía total de cero. Se observa una extensión gradual de las longitudes de onda, así como la pequeña amplitud de la componente de doble ionización respecto de las de simple ionización presentes en los bordes (truncadas al acercar la escala a la magnitud del frente hipersférico).

Con la finalidad de verificar el decrecimiento del momento con la raíz cuadrada del valor de la coordenada hipersférica ρ , y a modo de estudio exploratorio se realizó un ajuste con el siguiente modelo:

$$f_{Fit}(\rho) = \frac{A}{\rho^p} \cos(\kappa\sqrt{\rho} + \phi_0) \quad (4.11)$$

El ajuste presente en la figura 4.20, realizado entre $\rho = 25$ u.a. y $\rho = 240$ u.a., se alcanza con los siguientes valores de los parámetros:

	A	p	κ	c_0
Valor	0.0048	0.981	5.877	-2.64
Error	0.0001	0.005	0.001	0.01

Tabla 4.4: Parámetros del ajuste de la función de onda de energía cero.

En la figura 4.20 podemos observar el ajuste aplicado sobre los resultados. Podemos afirmar que el resultado del cálculo con GSF reconstruye el hecho de que el argumento de la función oscilatoria depende de la raíz de ρ . Menos satisfactorio resulta el valor que marca la tasa de decrecimiento de la amplitud. Teniendo en cuenta este valor a la vez que los argumentos considerados hacia el final de la sección 4.1, es plausible suponer que a pesar de haber empleado una caja de 170 u.a. por coordenada, aún así el rango asintótico de la función se halla a distancias mayores. Las pruebas sugieren que nuestra metodología es capaz de resolver adecuadamente el problema, pero que se debe trabajar con dominios considerablemente más extensos.

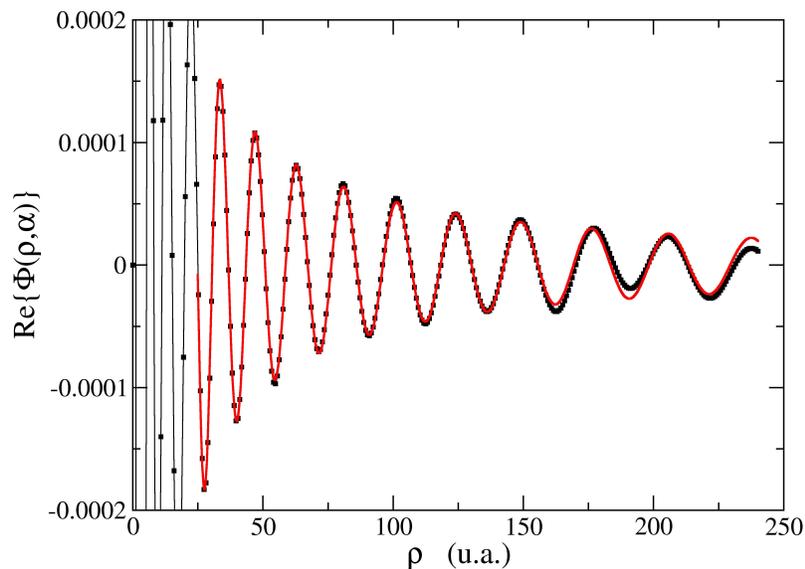


Figura 4.20: Ajuste de un corte radial de la función de tres cuerpos con energía cero. El modelo de ajuste impone el decrecimiento de la longitud de onda previsto por Peterkop. La función de onda (parte real) se grafica en trazo negro continuo con cuadrados, mientras que con un trazo continuo rojo se presenta el resultado del ajuste.

Cerca del borde de la caja encontramos que el acuerdo entre la energía impuesta a la base y la que localmente tendría la solución buscada no es completamente acertado.

Como hemos mencionado, en este régimen no se conoce de antemano la energía conveniente para la base. Un estudio de la dinámica de Wannier [110] implicaría trabajar con momentos angulares distintos de cero, a fin de evaluar secciones eficaces completamente diferenciales. La emisión de ambos electrones en direcciones opuestas, con el núcleo yaciendo de por medio de acuerdo a la configuración de Wannier, resulta en contraposición directa con el problema de $(e, 3e)$ en el régimen de pequeña transferencia de momento, ya que esta forma allí ha de observarse un mínimo en la sección eficaz completamente diferencial [47]. Se menciona en la Ref. [46], que tal supresión se observa, pero deja de hacerse presente si el momento transferido crece. Desde un punto de vista formal, el comportamiento asintótico dado por la ecuación (3.18) no sería el apropiado para esta cinemática particular, con lo que debería replantearse la expresión (3.21) para el cálculo de secciones eficaces en este régimen. No obstante, debido a que los trabajos experimentales [111, 112] deben realizarse con algún valor finito de energía, en principio es posible utilizar el formalismo teórico presentado sin modificaciones. Podemos concluir que la base Sturmiana presenta buenas posibilidades para tratar la física de dos electrones distanciándose del núcleo con energías muy bajas.

4.6. Energías Negativas

Si la energía disponible para los electrones se encuentra por debajo del umbral de doble ionización, la función de dispersión no presentará frentes hiperesféricos. Solamente permanecerán abiertos aquellos canales de simple ionización cuya energía de eyección sea mayor que cero. Para resolver problemas donde exclusivamente intervienen los canales de simple ionización se requiere que la base Sturmiana sea capaz de, simultáneamente, replicar la condición asintótica de cada uno de ellos. En el dominio de las energías negativas esto supone una menor idoneidad para la metodología, a causa de que las energías de eyección serán proporcionalmente muy diferentes.

Existe, no obstante, una alternativa para obtener una función de energía negativa correcta. Se requiere resolver un problema por cada canal que se desee obtener adecuadamente. Esto no es computacionalmente costoso por las dos siguientes razones. Los estados de simple ionización se vuelven asintóticos a distancias comparativamente cortas, del orden de 50 u.a.. Para una caja de este tamaño se requieren aproximadamente 60 funciones de base por coordenada, resultando en una resolución poco costosa. Debe

realizarse una por cada canal permitido. Si existen canales de energías similares, es posible abarcarlos a ambos con una misma resolución. Cada función de onda de tres cuerpos tendrá un canal bien descrito, que deberá ser aislado como se enunció en la sección 4.3. Se deberá a continuación sumar de cada resolución su canal correctamente caracterizado.

Es posible utilizar en estos problemas de tres cuerpos las estrategias discutidas en las secciones 2.2 y 2.3. En particular la primera es un objetivo en el corto plazo. Cualquiera de ambas presenta buenas potencialidades para que en un solo cálculo de la función de tres cuerpos se obtengan todos los canales de ionización simple adecuadamente descritos.

Se presenta en la figura 4.22 un ejemplo de solución de 4.1 con energía negativa E_a con una base del continuo en r_2 y r_3 . Es notable cómo la misma consigue representar un cero numérico en la región donde de ser positiva la energía E_a existiría el doble continuo, mientras que se aprecia además la construcción de la ionización simple.

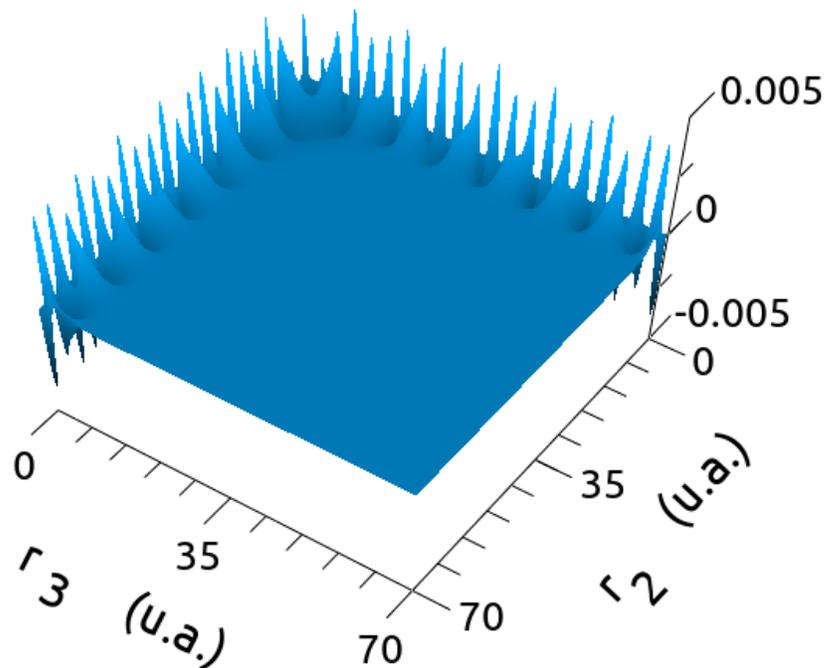


Figura 4.21: Función de dispersión obtenida para un problema con energía total por debajo del umbral de doble ionización. Resolución obtenida con bases del continuo para ambos electrones.

Se evaluó la posibilidad de utilizar estados ligados como base para estos procesos, pero la idea se descartó, puesto que los estados ligados lograban pobremente describir las oscilaciones correspondientes al electrón eyectado. En el ejemplo numérico de la figura 4.22 se utilizó una base del continuo para uno de los electrones a la par que una de energía negativa para el otro. Si bien el resultado no satisfizo las expectativas, se presenta porque ilustra la superioridad de las bases con energía positiva frente a las de ligados para describir estados de simple continuo.

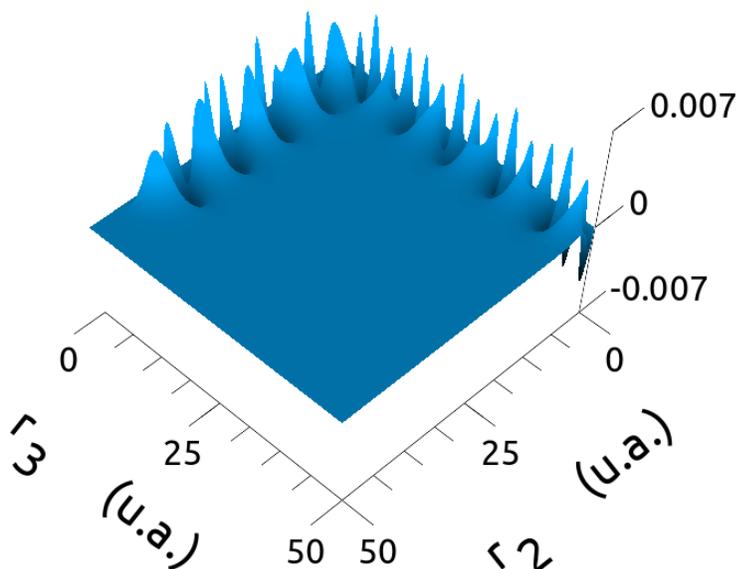


Figura 4.22: Función de dispersión obtenida para un problema con energía total por debajo del umbral de doble ionización. Resolución obtenida con una base del continuo en r_3 y una de ligados en r_2 .

Se puede apreciar en la figura 4.22 que las frecuencias de oscilación no están propiamente caracterizadas en ninguna región del lado derecho de la figura, como lo están en el lado izquierdo. En cambio, sí es notable cómo la base del continuo puede describir correctamente el decrecimiento de las funciones en la dirección r_3 aún cuando no sea así para las oscilaciones en r_2 .

Capítulo 5

Doble ionización de Helio, solución completa

El paso de un modelo de onda S a uno que incluya diferentes valores de momento angular total conlleva tomar en cuenta nuevas variables. Específicamente, la cantidad de ondas parciales de dicho momento angular L' que se incluyen en el cálculo, y para cada una de ellas, las ondas parciales de los momentos angulares de cada electrón, caracterizadas por pares $\{l'_a, l'_b\}$. Cada una de las ondas parciales de L' además incorpora las $2L' + 1$ proyecciones del momento angular en el eje de cuantización, z . Es decir, los números cuánticos $M' = -L', \dots, L'$. En las primeras secciones del presente capítulo mostraremos estudios efectuados considerando varias ondas parciales para la función de scattering, pero un modelo Temkin–Poet para el blanco de Helio. Luego de ello pasaremos a mostrar el problema en toda su dimensión, considerando de forma completa el átomo de Helio. Dichos resultados constituyen la principal contribución de la presente tesis.

Para el cálculo de cada onda parcial L' se necesita incorporar los pares de momentos $\{l'_a, l'_b\}$ y sus permutados, $\{l'_b, l'_a\}$. Este hecho se hace evidente para los valores pares de L' . En estos casos es de esperar que una correspondiente onda parcial con ambos momentos iguales, $\{l'_a, l'_a\}$, sea simétrica ante el intercambio de r_2 por r_3 . Sin embargo, esto no sucede si a la hora de efectuar la resolución no se tienen en cuenta las ondas con los momentos permutados. Un ejemplo concreto terminará por clarificar este punto: sea $L' = 2$, y los pares $\{l'_a, l'_b\}$ dados por $\{\{0, 2\}, \{1, 1\}, \{2, 2\}\}$. Las funciones de onda radiales asociadas a las ondas parciales $\{1, 1\}$ y $\{2, 2\}$ no serán simétricas, aún cuando físicamente deban serlo. Para obtener un resultado físicamente aceptable se debe realizar el cálculo considerando $\{\{0, 2\}, \{2, 0\}, \{1, 1\}, \{2, 2\}\}$.

En particular, la contribución de la onda parcial $L' = 1$ es considerablemente más significativa que aquellas de $L' = 0$ y $L' = 2$. Si se observa el lado derecho de la ecuación (3.10), y se tiene en cuenta que bajo las condiciones cinemáticas del experimento de Orsay de 1998 [1, 2], que $q \approx 0.24$, resulta evidente que estaremos dentro de lo que se denomina régimen de *cuasi-fotón* (*quasi-photon* en [47]). Si se expresan las exponenciales oscilatorias de (3.10) en series de potencias vemos que el término de la potencia unitaria en las coordenadas radiales es el más relevante, puesto que existe cancelación del término constante.

Un mayor momento transferido en principio implicaría una mayor similitud entre las magnitudes de las distintas ondas parciales, hecho que a su vez conllevaría a requerir varias de ellas para alcanzar la convergencia de los resultados. Sería de esperar un apartamiento importante el régimen de *cuasi-fotón*.

5.1. Blanco de Helio Temkin–Poet

5.1.1. Estudio de la magnitud del término inhomogéneo de la ecuación (3,10)

Este análisis tiene por objeto determinar en qué medida resulta significativo el aporte de cada onda parcial L' en la resolución del problema de $(e, 3e)$. Es información necesaria para determinar la cantidad de ondas parciales a incorporar en la solución. Para ello se realizan resoluciones con diferentes valores de L' y se evalúa el módulo de cada elemento del vector φ de (3.39). En estas pruebas se emplea un dominio de 70 u.a., con las configuraciones angulares para cada valor del momento angular L' total desplegadas en la tabla 5.1.

0	1	2	3	4
{0, 0}	{0, 1}	{0, 2}	{0, 3}	{0, 4}
{1, 1}	{1, 2}	{1, 1}	{1, 2}	{2, 2}
{2, 2}	{2, 3}	{2, 2}	{2, 3}	{3, 3}
{3, 3}	{3, 4}	{1, 3}	{1, 4}	{1, 5}
{4, 4}	{4, 5}	{2, 4}	{3, 4}	{2, 6}

Tabla 5.1: Ondas parciales utilizadas para evaluar el máximo y la media de los valores absolutos de los coeficientes

Se observa de la tabla 5.1 que se emplean cinco configuraciones angulares por cada L' , con 84 GSF por coordenada y onda parcial. El vector φ por cada L' posee 35280 (es

decir, 84x84x5) elementos. De ellos se toma el máximo y el promedio para establecer qué cantidad de ondas L' son suficientes para que la función de onda total contenga satisfactoriamente la física de la colisión que deseamos modelar. Se listan estos valores en la tabla 5.2.

L'	0	1	2	3	4
Máximo	2.341e-02	1.315e-01	6.238e-03	8.766e-05	6.409e-05
Media	4.117e-05	2.680e-4	1.799e-05	2.250e-07	1.354e-07

Tabla 5.2: Mayor valor absoluto y promedio de los elementos del vector φ por cada onda parcial L' . Esto implica que las ondas parciales con momento angular total $L' > 2$ serán de magnitud muy inferior respecto de los casos $L' = 0, 1, 2$.

Se hace evidente que la onda $L' = 1$ es la de mayor peso, como es de esperar en el régimen *cuasifotónico* del experimento de Orsay [2]. Le siguen en importancia las ondas 0 y 2, ya uno y dos órdenes de magnitud por debajo si observamos los máximos. Otros órdenes de magnitud por debajo se hacen presentes las ondas 3 y 4. De acuerdo a los resultados de la tabla 5.2 podemos concluir que considerar ondas por encima de $L' = 2$ es un refinamiento prescindible.

De acuerdo a las expresiones (G.8) y (G.9), presentes en el apéndice G, la parte dependiente de (r_2, r_3) del lado derecho de la ecuación (3.10) para cada onda parcial L' del continuo viene dada por:

$$\tilde{\mathcal{F}}_{L'}(r_2, r_3) = [-Z \delta_{L',0} + j_{L'}(qr_2) + j_{L'}(qr_3)] \Phi_{TP}^{(0)}(r_2, r_3) \quad (5.1)$$

Dejamos aparte en la expresión (5.1) los factores que proceden de las integraciones angulares. Mostramos en la figura 5.1 las funciones puramente radiales $\tilde{\mathcal{F}}_{L'}(r_2, r_3)$:

La figura 5.1 evidencia una disminución importante de las contribuciones de momento angular a partir de dos. El máximo de amplitud de $\tilde{\mathcal{F}}_3(r_2, r_3)$ es aproximadamente 220 veces menor que el de $\tilde{\mathcal{F}}_1(r_2, r_3)$. Por lo tanto, las diferencias que observamos en la tabla 5.2 tienen su origen no solamente en los coeficientes que resultan de las integraciones angulares, sino que parte importante procede de la estructura funcional de las partes radiales $\tilde{\mathcal{F}}_{L'}(r_2, r_3)$. Se concluyen estos estudios con la certeza de que, para el régimen de momento transferido de ≈ 0.24 , es suficiente considerar momentos angulares totales de no más de dos.

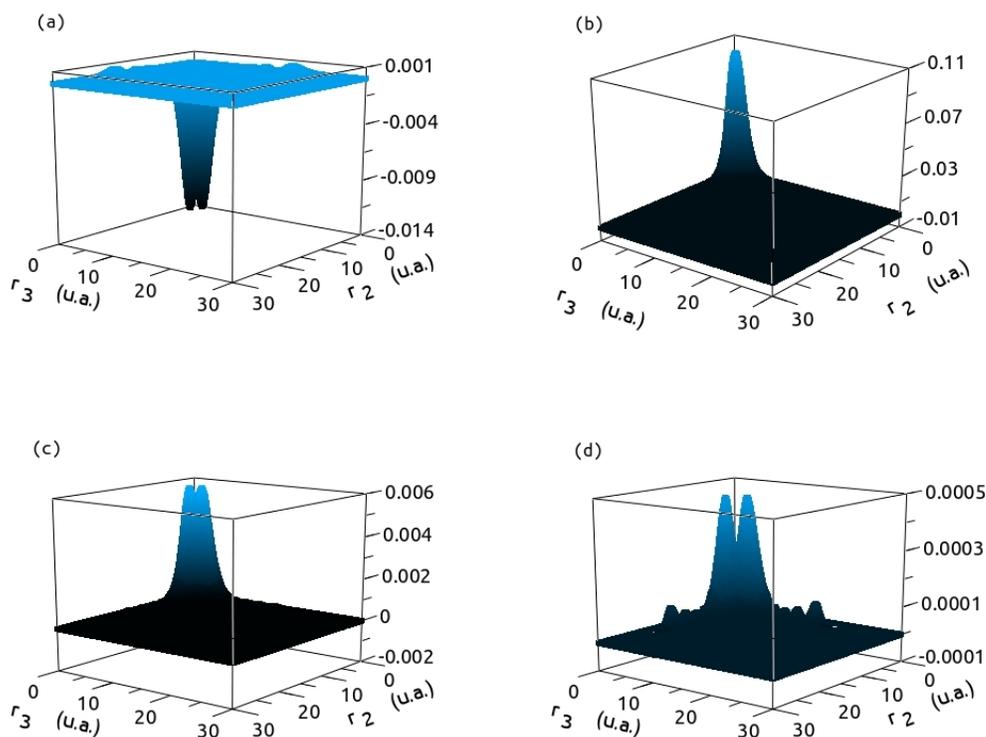


Figura 5.1: Gráficos de las primeras cuatro funciones radiales $\tilde{\mathcal{F}}_{L'}(r_2, r_3)$, con $L' = 0, 1, 2, 3$; (a), (b), (c), (d) respectivamente. Se hace manifiesto que la función $\tilde{\mathcal{F}}_1(r_2, r_3)$ destaca en magnitud por sobre las demás.

5.1.2. Secciones eficaces totalmente diferenciales

Se muestran las secciones eficaces que se obtienen realizando los cálculos con un modelo de Helio con todos los momentos angulares iguales a cero. Los paneles de la figura 5.2 no han requerido de renormalización alguna, y los mismos alcanzan cierto grado de acuerdo con los experimentos. Se muestran solamente seis configuraciones angulares debido a que este acuerdo es de tipo fortuito, como se hará evidente al presentarse los cálculos efectuados con un modelo más completo del blanco.

No es este el primer caso donde un modelo teórico simplificado del problema físico alcanza una descripción aceptable. Jones y Madison [3] obtuvieron, empleando estados inicial y final con un mismo grado de aproximación, un acuerdo aceptable tanto en forma como en magnitud respecto a los datos experimentales de [2]. Estas funciones resuelven de manera aproximada los hamiltonianos asintóticos del problema de tres cuerpos para el estado ligado, la función de Pluvillage, como para el continuo, con

la función denominada C3 [113]. No obstante, este hecho es catalogado de fortuito en [114], donde se muestra que el mismo análisis llevado a la cinemática de 4 eV no proporciona una correcta magnitud de la sección eficaz.

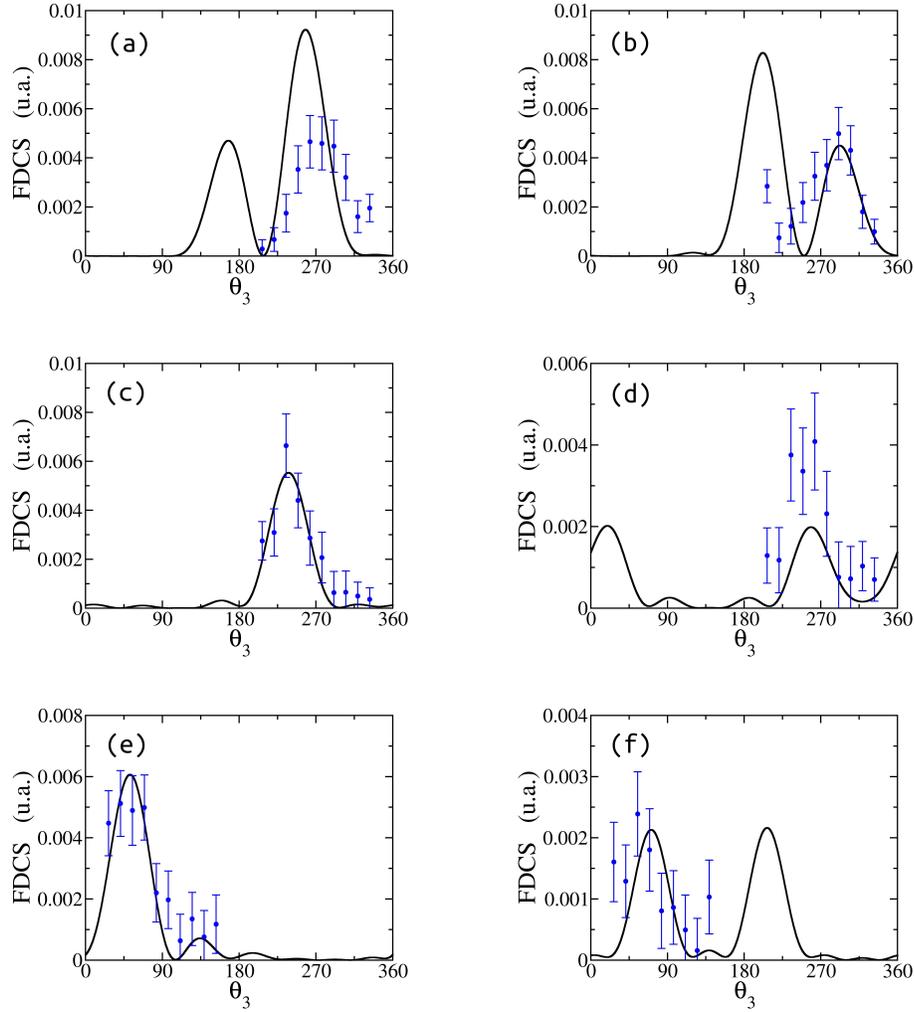


Figura 5.2: FDCS para las configuraciones angulares $\theta_2 = 27^\circ$ (a), 69° (b), 111° (c), 139° (d), 291° (e) y 319° (f). El estado ligado de Helio se modeló en onda S, mientras que para la función de dispersión sí se consideraron momentos angulares generales. El acuerdo en magnitud que se aprecia es fortuito, como quedará claro en la sección siguiente.

Otro argumento en contra del éxito aparente del modelo Pluvinaige–C3 consiste en que si se emplea un estado ligado de mayor calidad, el grado de acuerdo se deteriora en lugar de mejorar [114]. Más aún, la función de Pluvinaige no constituye el análogo ligado de la función C3 [115], como aseguran los autores de [3]. Es notable entonces la sensibilidad que presentan las secciones eficaces con la calidad de la descripción

del blanco. Esto ha sido discutido por Jones y Madison [3] y Ancarani y Dal Capello [94], donde discuten las variaciones de las secciones eficaces según qué función se emplee para caracterizar el estado ligado de Helio, según su correlación interelectrónica. Terminará de ser evidente que el acuerdo logrado aquí es de tipo fortuito cuando analicemos las secciones de inmediato siguientes, donde se trabajó con más ondas parciales en la expansión del blanco de Helio.

5.2. Blanco de Helio completo

5.2.1. Función de onda de dispersión

Mostramos en las figuras 5.3, 5.4 y 5.5 las ondas parciales que constituyen la solución del problema (3.10) con toda generalidad. Es decir, considerando una descripción aceptable del estado fundamental del átomo de Helio así como varias ondas parciales en la solución de dispersión.

De las propias escalas de las funciones se consigue apreciar que las correspondientes a la onda $L' = 1$ son las de magnitud más apreciable, y por lo tanto son fundamentales para la correcta caracterización del proceso físico. Es notable la importancia relativa que presentan los canales de ionización simple en las ondas parciales en las cuales al menos uno de sus dos momentos angulares l'_a, l'_b equivale cero o uno. La magnitud relativa de los canales de simple ionización se eclipsa conforme observamos ondas parciales con valores más grandes de dichos índices.

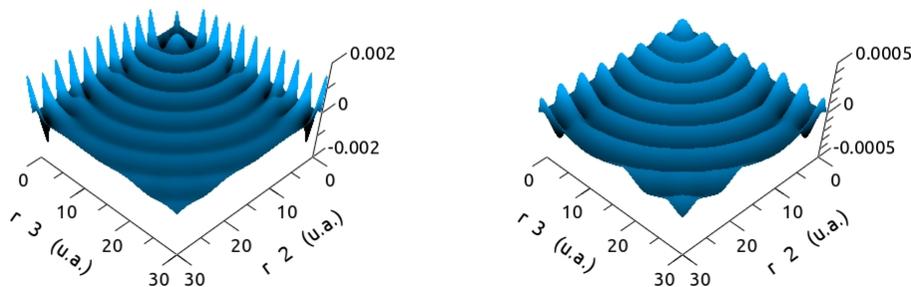


Figura 5.3: Ondas parciales de la función de dispersión, onda $L' = 0$. Izquierda: $\{0, 0\}$. Derecha: $\{1, 1\}$

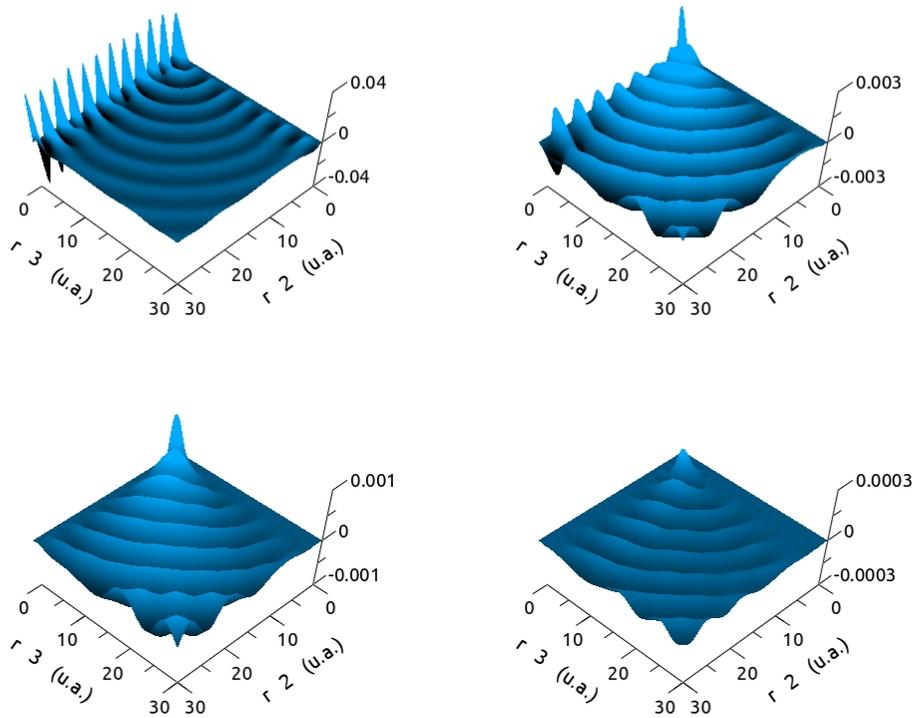


Figura 5.4: Ondas parciales de la función de dispersión, onda $L' = 1$. De izquierda a derecha y arriba abajo: $\{0, 1\}$, $\{1, 2\}$, $\{2, 3\}$, $\{3, 4\}$.

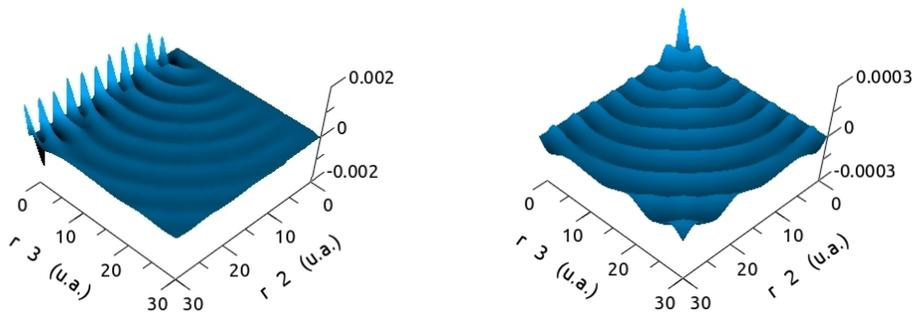


Figura 5.5: Ondas parciales de la función de dispersión, onda $L' = 0$. Izquierda: $\{0, 2\}$. Derecha: $\{1, 1\}$

Dado que el interés principal es obtener información física del proceso de doble ionización, proporcionamos en la figura 5.6 cortes hiperradiales en $\alpha = 45^\circ$ de las distintas funciones de onda mostradas en las figuras 5.3, 5.4 y 5.5. Esto arroja una idea de la incidencia de cada onda parcial en la sección eficaz totalmente diferencial. Es

decir, las ondas que presenten magnitudes más apreciables en estos cortes serán las que más contribuyan en la constitución de la sección eficaz, debido a que la expresión (3.41) trabaja con el cuadrado del módulo de la función completa. Los términos cuadráticos en las primeras ondas de $L' = 1$ determinarán las formas generales de las FDCS. En la figura (5.6) se ilustraron tres ondas parciales de $L' = 1$: $\{0, 1\}$, $\{1, 2\}$ y $\{3, 4\}$. Esta última ya pertenece al orden de magnitud de las primeras ondas parciales de momento angular total $L' = 0$ y $L' = 2$. Hemos omitido, para no sobrecargar la figura, el corte hiperradial de la onda $\{2, 3\}$ de $L' = 1$. Su magnitud se encuentra en un punto medio entre las dos principales y las tres ondas de menor peso.

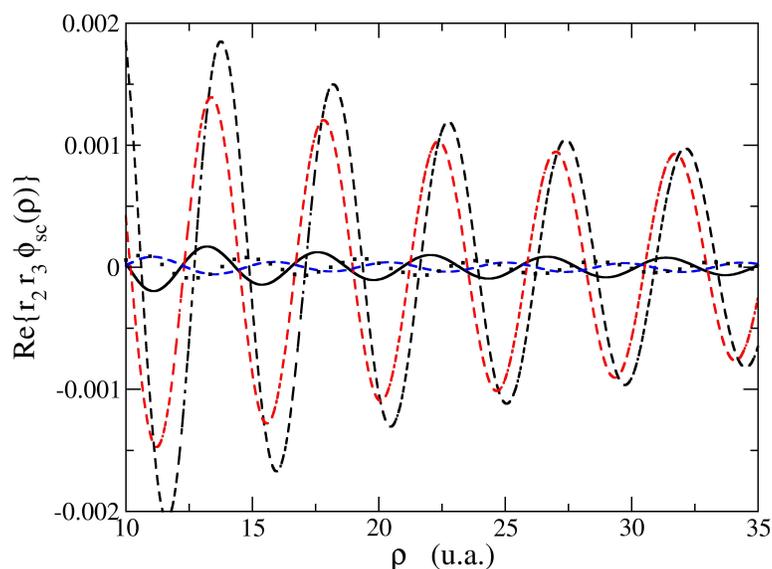


Figura 5.6: Comparativa de cortes hiperradiales de distintas ondas parciales correspondientes a $L' = 0, 1, 2$. Se muestran, de $L' = 1$ las ondas $\{0, 1\}$ (trazo a rayas negro), $\{1, 2\}$ (trazo a rayas rojo) y $\{3, 4\}$ (trazo a rayas azul). De $L' = 0$, $\{0, 0\}$ (trazo continuo negro) y de $L' = 2$, $\{0, 2\}$ (trazo punteado negro). A todas luces las primeras ondas parciales de $L' = 1$ determinan los aspectos más fundamentales del proceso físico en cuestión. La participación de $L' = 0, 2$ se limita introducir modificaciones menores, puesto que en la expresión (3.41) interviene el cuadrado de la función completa y las diferencias en escala se acentúan. En todos los casos se graficó la parte real de la función.

Presentamos el detalle de las dos primeras funciones de onda de momento angular total $L' = 1$, fundamentales para construir la FDCS al menos en el régimen de *cuasi-fotón*.

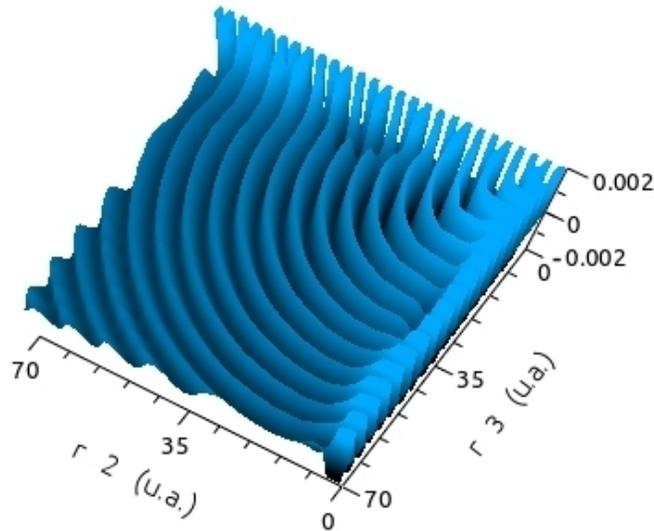


Figura 5.7: Onda parcial $L' = 1: \{0, 1\}$. La escala se definió para enfocar apropiadamente la región de doble continuo; los primeros canales de simple ionización se aprecian truncados.

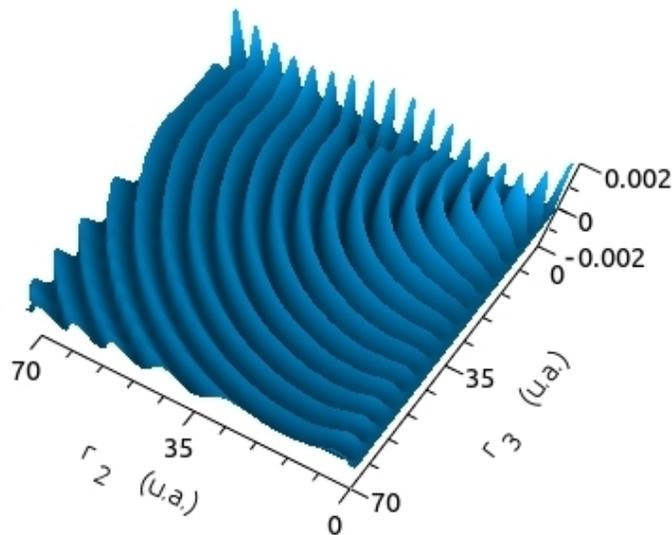


Figura 5.8: Onda parcial $L' = 1: \{1, 2\}$.

5.2.2. Estudios de convergencia

Una parte importante de la validación de los resultados obtenidos es compuesta por los controles de convergencia de la función de dispersión así como la sección eficaz al incrementar la precisión del cálculo a través de los varios parámetros involucrados.

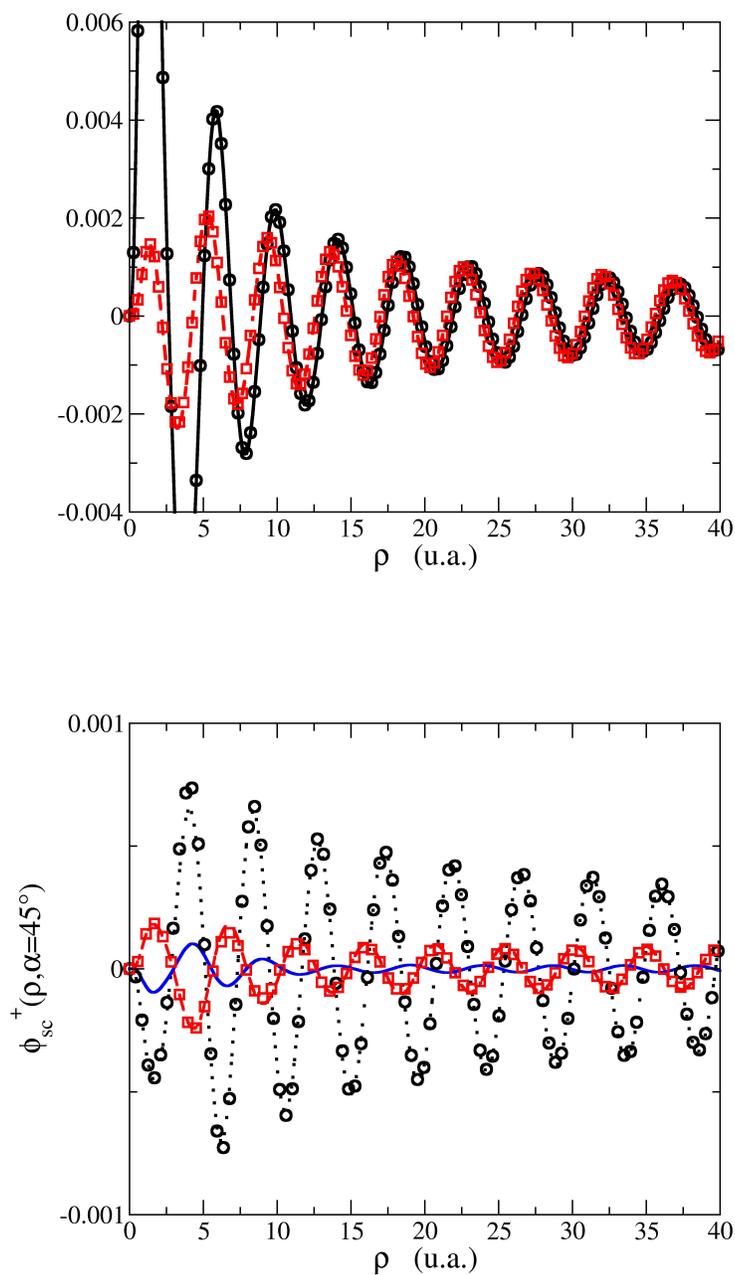


Figura 5.9: Estudio de convergencia de las ondas parciales de $L' = 1$. En el panel superior, las ondas $\{0, 1\}$ (trazo negro, continuo, y círculos negros) y $\{1, 2\}$ (trazo rojo, segmentado, y cuadrados rojos). En el panel inferior observamos las ondas parciales $\{2, 3\}$ (trazo punteado negro y círculos negros) y $\{3, 4\}$ (segmentos rojos y cuadrados rojos) de ambas resoluciones, mientras que se añade la contribución $\{4, 5\}$ (trazo azul continuo) existente solo en la más completa. En ambos paneles se emplearon los símbolos para graficar los resultados correspondientes al cálculo de menos ondas parciales y las líneas (continuas, segmentadas o punteadas) para la versión más completa.

Ya se ha mostrado claramente en la sección 5.1.1 que la importancia relativa de las ondas parciales más allá de $L' = 2$ es escasa en lo que a la magnitud de las funciones de dispersión respecta. En este apartado se analiza el grado de variación de las funciones de onda por la inclusión de más ondas parciales en el estado ligado, así como en cada contribución L' del continuo. En particular, y siendo que la onda $L' = 1$ resulta ser la de mayor preponderancia, sobre ella se enfocaron los estudios. Se observó escasa diferencia entre las funciones de onda del continuo cuando el estado ligado del Helio pasaba de contener las ondas $\{\{0, 0\}, \{1, 1\}, \{2, 2\}\}$ a añadir el par $\{3, 3\}$. En el caso del continuo se pasó de tomar $\{\{0, 1\}, \{1, 2\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}\}$ a $\{\{0, 1\}, \{1, 2\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}, \{4, 5\}\}$, en ambos ejemplos considerando los correspondientes pares intercambiados (ej. $\{3, 4\}$ y $\{4, 3\}$). En la figura 5.9 podemos apreciar que las funciones no se modifican sensiblemente al añadir una onda parcial en el estado ligado y dos (y sus intercambiadas) a la expansión de la función de dispersión.

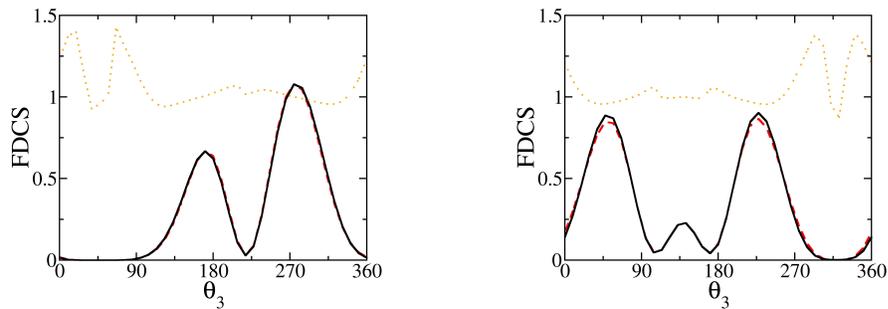


Figura 5.10: FDCS para las geometrías $\theta_2 = 41^\circ$ (izquierda) y $\theta_2 = 319^\circ$ (derecha) en unidades arbitrarias, a fin, de en la misma gráfica, mostrar el cociente entre ellas. En los sectores donde las FDCS son apreciables el cociente ronda la unidad. El cálculo más completo, es decir con más ondas parciales se presenta en trazo continuo negro; el más simple en trazo segmentado rojo. El cociente se delinea en puntos anaranjados.

Habiendo establecido la convergencia en cuanto a la componente principal de la función de onda, $L' = 1$, mostramos en qué medida se modifican las secciones eficaces debido a las adiciones ya especificadas para el estado ligado como para el continuo. Se muestra en la figura 5.10 cómo varían las FDCS de dos geometrías particulares, $\theta_2 = 41^\circ$ y $\theta_2 = 319^\circ$, y se grafica su cociente. Se emplean unidades arbitrarias para, en la misma gráfica, mostrar el cociente de las FDCS. Podemos observar que en las regiones donde las FDCS son apreciablemente distintas de cero, dicho cociente ronda la unidad, dejando claro que no existe un cambio radical entre una resolución y la otra,

más aún si se consideran las barras de error presentes en los datos experimentales con los que compararemos nuestros cálculos.

Hemos observado una cierta dependencia de las secciones eficaces con las dimensiones del recinto de la resolución. Los cálculos finales se efectuaron en dominios radiales de 50 u.a. y 70 u.a., y se realizaron cálculos preliminares en dominios de 30 u.a.. Se ilustra en la figura 5.11 el grado máximo de incertidumbre que puede afectar a los resultados.

La fórmula (3.41) requiere, en principio, ser evaluada en un hiperradio ρ tendiente a infinito, hecho que no se puede llevar a la práctica de manera numérica directamente. Podemos observar en la figura 5.11, no obstante, que el valor se estabiliza apreciablemente al pasar de 30 u.a. a 50 y finalmente a 70 u.a..

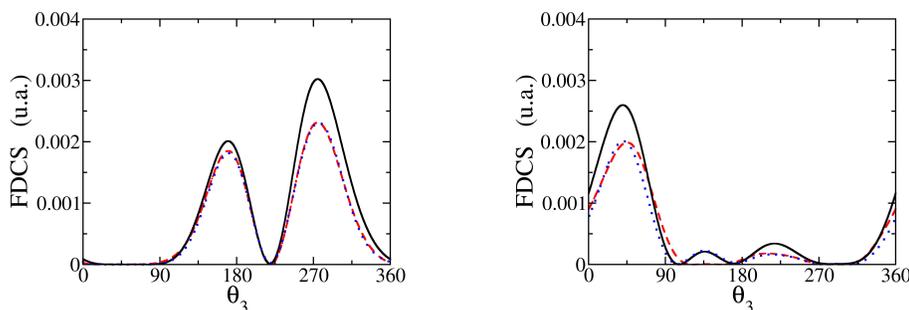


Figura 5.11: Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). Izquierda $\theta_2 = 41^\circ$, derecha $\theta_2 = 291^\circ$. Cálculos en dominios de 30 u.a. (trazo continuo negro), 50 u.a. (trazo rayado rojo) y 70 u.a. (trazo punteado azul). Las secciones eficaces se evaluaron en radios 28.5, 47 y 66 respectivamente con la expresión (3.41).

Está previsto implementar el cálculo de las matrices de transición con las fórmulas propuestas por Kadyrov [105], estudiada y aplicada por Palacios *et al* [116], Horner *et al* [32] y McCurdy *et al* [117].

5.2.3. FDCS: resultados finales

En esta sección analizaremos las FDCS calculadas en el presente trabajo en comparación con los datos experimentales y otras dos teorías: CCC [88] (en las geometrías disponibles) y J-Matrix [14]. Se fija en aquellas un ángulo de eyección para uno de los electrones (θ_2) y se grafica la FDCS en términos del ángulo del restante (θ_3), colocándose también los valores experimentales con sus barras de error. Los juegos de

FDCS experimentales de la Ref. [2] son veinte, con ángulos θ_2 comenzando en 27° y hasta 333° . Los primeros diez se hallan equiespaciados en 14° , luego hay un paso de 54° , para volver al equiespaciamiento de 14° . Se debe destacar que el grado de acuerdo teoría-experimento a la hora de caracterizar la forma de las FDCS en el problema de $(e, 3e)$ aquí estudiado palidece ante el grado de acuerdo que se registra para la ionización de Hidrógeno [118]. El error relativo es significativamente mayor en el caso de los datos $(e, 3e)$, debido a que este proceso es dos órdenes de magnitud más infrecuente que la simple ionización del propio Helio. Esto implica procesos de medición de semanas a fin de garantizar suficientes conteos del proceso y geometría que se desea medir [119]. Así también sucede si la comparación de los datos experimentales de doble ionización se comparan en cantidad de puntos y tamaño de las barras de error respecto a sus contrapartes de simple ionización; la referencia [120] contiene ejemplos de ionización simple de Helio. En particular, los autores de [121] mostraron para la simple ionización del Helio un remarcable acuerdo de sus cálculos por la metodología CCC y los experimentos analizando la emisión hacia afuera del plano de la colisión.

Adicionalmente, presentamos las FDCS evaluadas en este trabajo en comparación con las de la metodología CCC como funciones de ámbos ángulos de eyección: (θ_2, θ_3) . Estos resultados permiten destacar aún más los requerimientos físicos que verifican ambas predicciones teóricas, reafirmando su validez.

Presentamos en las figuras 5.12, 5.13, 5.14, 5.15 y 5.16 las secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). Estas constituyen el objetivo final de la presente tesis. Para cada configuración angular θ_2 Para ciertas configuraciones angulares se disponía de los cálculos proporcionados por A. S. Kheifets (publicados en las referencias [122, 88]). Se consiguió mostrar un acuerdo tanto en forma como en magnitud respecto de los resultados del CCC.

Es notable la concordancia tanto en forma como en magnitud de nuestros resultados con aquellos de la metodología CCC, apreciable en todos los paneles de las figuras 5.12, 5.13, 5.14, 5.15, 5.16.

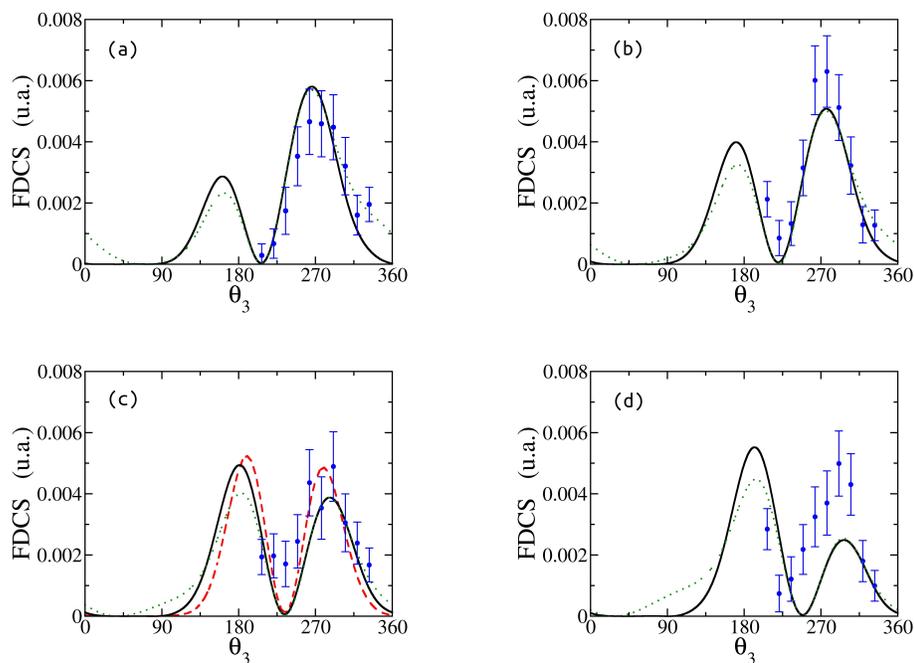


Figura 5.12: Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (a) $\theta_2 = 27^\circ$, (b) $\theta_2 = 41^\circ$, (c) $\theta_2 = 55^\circ$, (d) $\theta_2 = 69^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix.

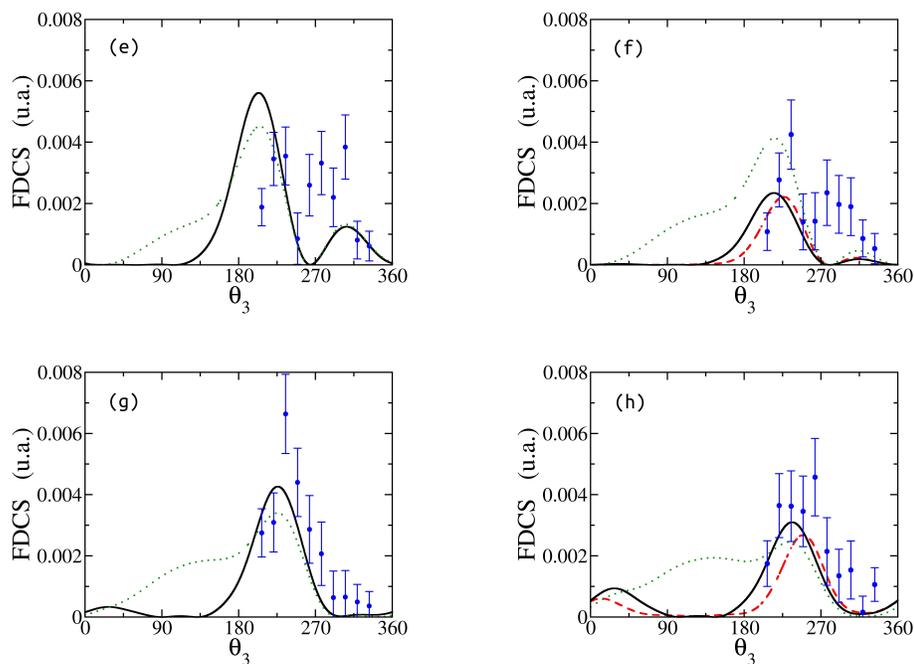


Figura 5.13: Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (e) $\theta_2 = 83^\circ$, (f) $\theta_2 = 97^\circ$, (g) $\theta_2 = 111^\circ$, (h) $\theta_2 = 125^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix.

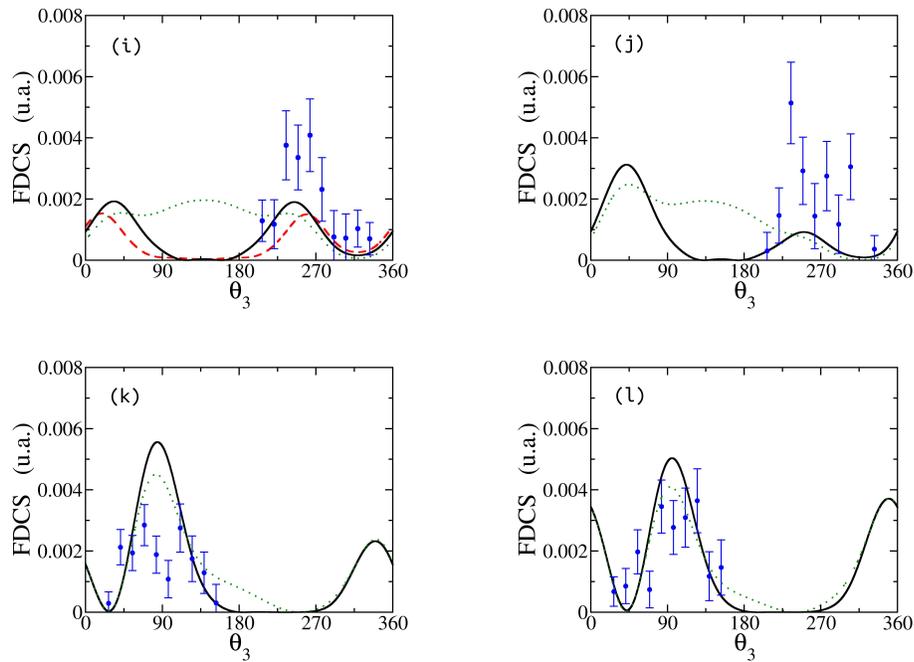


Figura 5.14: Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (i) $\theta_2 = 139^\circ$, (j) $\theta_2 = 153^\circ$, (k) $\theta_2 = 207^\circ$, (l) $\theta_2 = 221^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix.

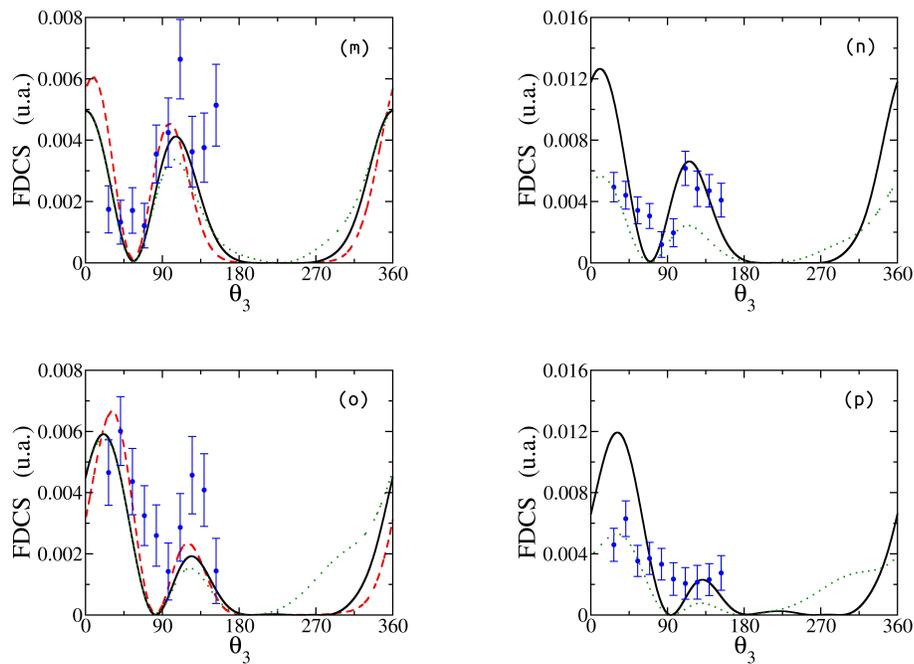


Figura 5.15: Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (m) $\theta_2 = 235^\circ$, (n) $\theta_2 = 249^\circ$, (o) $\theta_2 = 263^\circ$, (p) $\theta_2 = 277^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix.

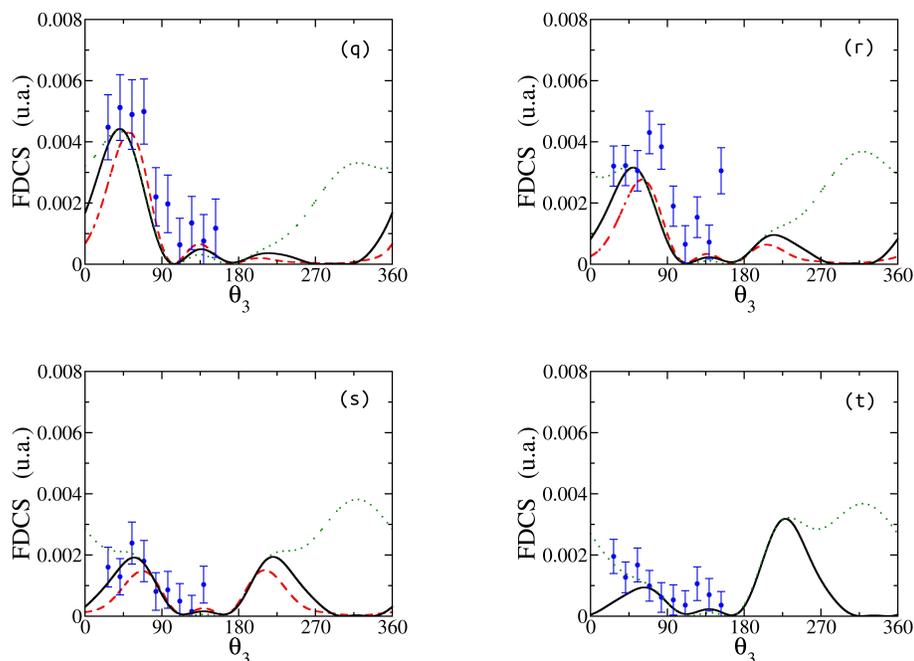


Figura 5.16: Secciones eficaces completamente diferenciales (FDCS). (q) $\theta_2 = 291^\circ$, (r) $\theta_2 = 305^\circ$, (s) $\theta_2 = 319^\circ$, (t) $\theta_2 = 333^\circ$. En trazo negro continuo: GSF; en trazo rojo a rayas: CCC; en trazo punteado: J-Matrix.

De particular interés para resaltar la validez de nuestros cálculos resultan los paneles (i) (Fig 5.14) y (s) (Fig 5.16). En estos casos el electrón 2 es emitido en la dirección de $-\mathbf{q}$ y \mathbf{q} respectivamente, y la distribución del electrón 3 en (i) y (s) debe poseer una simetría respecto de cualquiera de estas dos direcciones ($\theta_3 = 139^\circ$ y $\theta_3 = 319^\circ$). Los tres resultados teóricos presentados en dichos paneles verifican tal simetría, si bien los del J-Matrix en particular no respetan la estructura de nodos que se discutirá a continuación. De hecho, estos últimos implican una emisión, muy pronunciada, con ambos electrones saliendo en una misma dirección, hacia $-\mathbf{q}$ o \mathbf{q} . Este punto cuestiona el rigor con que el J-Matrix implementado sobre las ecuaciones de Fadeev-Merkuriev contempla la repulsión interelectrónica en el canal final.

Seguiremos una nomenclatura similar a la del la Ref. [47] para nombrar los mínimos que, de acuerdo a la similitud que en el régimen de bajo momento transferido existe con la fotoionización dipolar, tienen lugar en las secciones eficaces:

- (A) Emisión en direcciones opuestas: $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_3$. Esto cancela el término dipolar
- (B) Emisión de ambos electrones en direcciones ortogonales al momento transfe-

rido: $\mathbf{k}_2 \perp \mathbf{q}$ y $\mathbf{k}_3 \perp \mathbf{q}$.

- (C) Emisión en direcciones idénticas: $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3$.
- (D) Emisión en direcciones tales que la suma de los momentos sea ortogonal al momento transferido: $\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 \perp \mathbf{q}$,

aún cuando nuestro formalismo no calcula la matriz de transición a la manera En la tabla siguiente se detalla sobre qué valores de θ_3 se deben hacer presentes los mínimos de las FDCS según con el régimen dipolar.

θ_2	(A)	(B)	(C)	(D)	θ_2	(A)	(B)	(C)	(D)
27	207	–	27	71	207	27	–	207	251
41	221	–	41	57	221	41	–	221	237
55	235	–	55	43	235	55	–	235	223
69	249	–	69	29	249	69	–	249	209
83	263	–	83	15	263	83	–	263	195
97	277	–	97	1	277	97	–	277	181
111	291	–	111	347	291	111	–	291	167
125	305	–	125	333	305	125	–	305	153
139	319	–	139	319	319	139	–	319	139
153	333	–	153	305	333	153	–	333	125

Tabla 5.3: Posiciones de los mínimos en θ_3 correspondientes a los fenómenos (A), (B), (C) y (D) para cada configuración θ_2 . En las veinte configuraciones θ_2 en que se dispone de datos experimentales no se verifica la ortogonalidad simultánea de \mathbf{k}_2 y \mathbf{k}_3 con \mathbf{q} .

Haremos un análisis de los aspectos físicos apreciables en la sección eficaz totalmente diferencial como función de ambos ángulos. Nos servimos, en la figura 5.17, de una escala con una saturación a partir de 0.0003. El propósito es evidenciar ciertos detalles quedan subsumidos por las estructuras más apreciables, específicamente, los picos binario y de retroceso. En esta figura se incluyen también los mínimos correspondientes a nodos estrictos en el régimen dipolar [122]:

$$(A) : \theta_3 = \pm 180 - \theta_2 \quad (5.2a)$$

$$(C) : \theta_3 = \theta_2 \quad (5.2b)$$

$$(D) : \theta_3 = \pm 180 - 2\theta_q - \theta_2, \quad (5.2c)$$

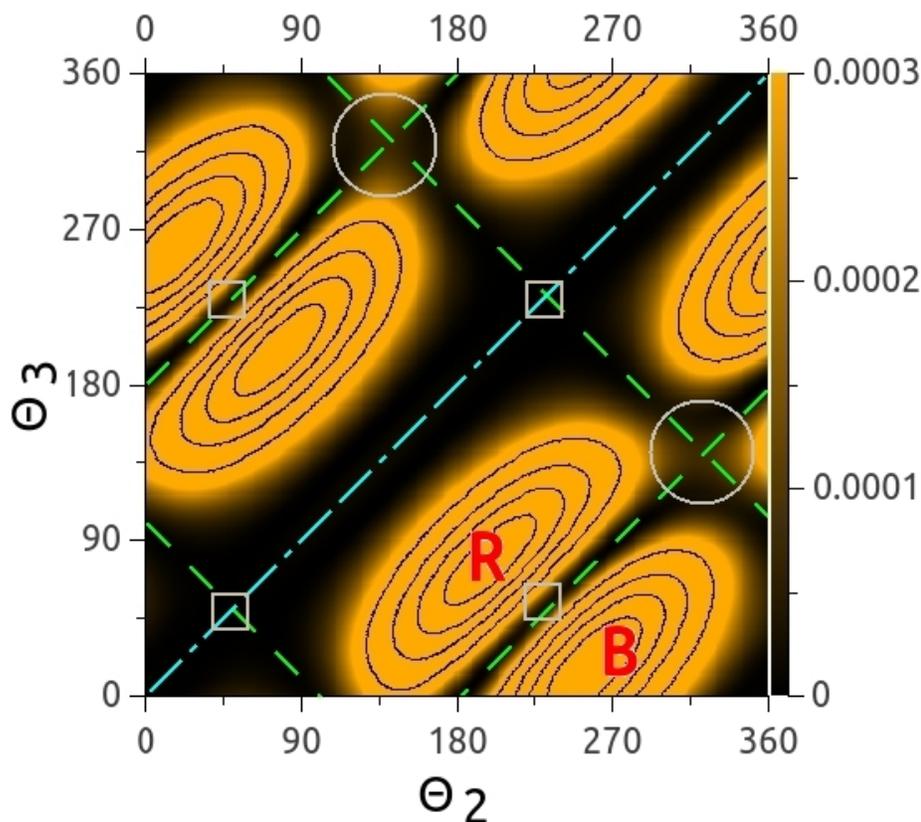


Figura 5.17: Análisis de las estructuras presentes en la sección eficaz totalmente diferencial. Se destacaron en trazo segmentado las curvas nodales correspondientes a los fenómenos (A) y (D). El trazo *doble línea - punto* corresponde a la emisión en una misma dirección para ambos electrones. Los cuadrados señalan los ceros del caso (B), mientras que las circunferencias marcan las zonas donde existen los máximos locales visibles en panel (s) (Figura 5.15)

Por otra parte, se señaló con un cuadrado la situación particular (B), donde ambos electrones son eyectados en direcciones perpendiculares al momento transferido. La misma se solapa en la geometría *in-plane* con las otras geometrías (A),(C) y (D).

En la Ref. [47] se hace mención a un máximo local que se aprecia en el panel (s) (Fig. 5.15) en la zona de $\theta_3 = 139^\circ$. En la figura 5.17 hemos destacado esta región (y su simétrica) en una circunferencia. Dicho máximo tiene lugar contraviniendo la presencia de ceros en el límite dipolar. No obstante, allí mismo los autores explican que se debe a un máximo de momento transferido a los electrones, es decir, un mínimo transferido al núcleo. La condición de transferencia de momento mínima hacia el núcleo se denomina esfera de Bethe [123, 119]. Los autores de [119] señalan que, dentro del régimen dipolar

las reglas (A) y (D) toman mayor preponderancia y eclipsan la condición de Bethe; esta supresión deja de observarse fuera del régimen dipolar. Los mínimos denominados (B) se aprecian poco en la geometría en la que estamos estudiando el problema: dentro del plano de la colisión existen solamente dos direcciones ortogonales a \mathbf{q} y yacen en direcciones opuestas. Por lo tanto, dos electrones emitidos en direcciones perpendiculares a \mathbf{q} estarían siendo despedidos con direcciones paralelas o antiparalelas entre sí, hecho que se superpone con los mínimos de tipo (C) y (A) respectivamente. Un estudio de la geometría *out-of-plane* podría hacer evidente esta estructura. No obstante, y dado el grado de incertidumbre presente hasta la fecha entre teorías y experimentos aún en la configuración *in-plane*, parece fútil incrementar la complejidad del estudio. Hemos denominado los picos binario B y de retroceso R o *recoil*. El primero corresponde a una emisión tal que la suma de los momentos de los electrones se orienta hacia el momento transferido \mathbf{q} . El otro pico implica una suma de momentos de eyección orientada en la dirección $-\mathbf{q}$.

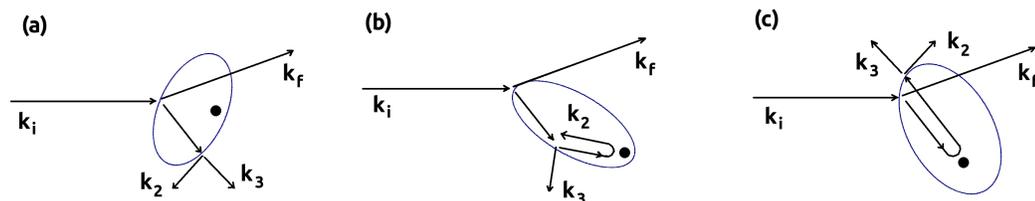


Figura 5.18: Representación esquemática de los procesos de primer orden dominantes en el modelo de proyectil rápido. El caso (a) es conocido como *Two-Step-1*. Los procesos (b) y (c) involucran una interacción adicional, la colisión con el núcleo.

En la referencia [91] se presenta una formulación del problema de cuatro cuerpos desglosado en un esquema de colisiones múltiples. Este planteo permite distinguir los distintos procesos de colisión que intervienen en la dinámica de los cuatro cuerpos. Hemos mencionado que en la presente tesis se trabajó en un modelo de proyectil rápido, considerando una colisión única con del mismo con los componentes del blanco. Luego el blanco puede redistribuir la energía y el momento en sucesivos procesos de cualquier orden. Los dos picos presentes en la figura 5.17 corresponden a emisiones con los electrones emergiendo en direcciones separadas por $\approx 90^\circ$. Esto remite a la colisión clásica de dos partículas, una de ellas con velocidad inicial sensiblemente menor. Destacamos esquemáticamente en la figura 5.18 los procesos de colisión que contribuyen

principalmente con la FDCS encontrada. El panel (a) de dicha figura constituye el proceso comúnmente denominado *Two-Step-1*. Los otros dos, (b) y (c), implican una colisión extra con el núcleo, constituyendo entonces procesos de un orden adicional de interacción entre los componentes del blanco.

Se hace evidente de las figuras 5.12 a la 5.15 el grado de acuerdo que presentan las teorías CCC y GSF entre sí para las geometrías presentes en el experimento de Orsay. Ambas juegos de FDCS fueron multiplicados por factor 2.2 para ser comparados con los datos experimentales. Ahora estableceremos una comparativa más profunda entre las metodologías teóricas en todo el rango de θ_2 y θ_3 . La misma se presenta en la figura 5.19.

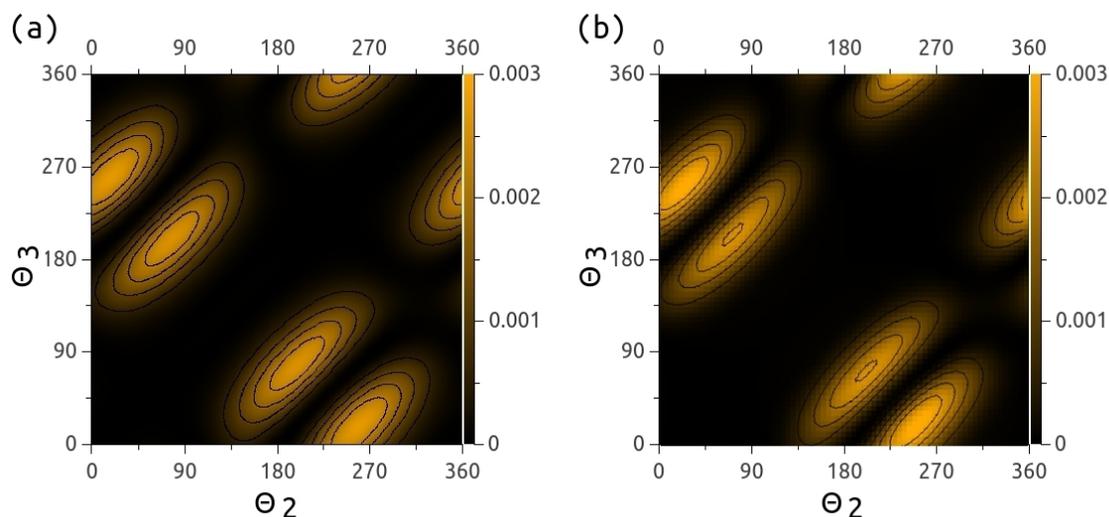


Figura 5.19: Sección eficaz totalmente diferencial, graficada en función del ángulo de eyección de cada electrón. Se hace evidente la concordancia de forma y de magnitud de los cálculos de esta tesis (a) con los de la metodología CCC (b).

Según se observa en la figura, la única diferencia que puede señalarse es que las estructuras visibles son más estrechas en los cálculos del CCC. Aún así, ambas soluciones señalan los mismos fenómenos físicos, ya señalados en el análisis de la figura 5.17. Se puede, a la luz de los resultados mostrados en esta sección, apreciar el grado de acuerdo entre las secciones eficaces generadas en el trabajo presente y la metodología CCC. Es, al día de la fecha, la primera vez que para la problemática de $(e, 3e)$ en el régimen de proyectil rápido se encuentran dos implementaciones teóricas concordantes.

Los resultados publicados por Silenou Mengoue [15, 16] guardan cierta similitud con los presentados por Zaytsev y colaboradores [14], si bien sus predicciones no son com-

pletamente idénticas. En ambas formulaciones se resuelven las ecuaciones de Fadeev–Merkuriev por el método J–Matrix. Según se puede apreciar en las figuras 5.12 a 5.16 los resultados de la metodología J–Matrix parecen predecir estructuras de mayor anchura, e incluso emisión significativa en direcciones donde deberían existir mínimos. Éstos, en cambio, sí son verificados por las versiones del CCC y GSF.

5.3. Conclusiones y perspectivas del problema de tres cuerpos

En el rango de proyectiles rápidos se resolvió de manera completa la formulación dada en [42], es decir, más allá de un modelo en onda S tanto en la caracterización del estado inicial, ligado, como en el estado final, perteneciente al continuo. Asimismo se implementó, en su forma general, la sección eficaz basada en el comportamiento de la función de onda a grandes distancias, discutida en la referencia [42] y presentada originalmente en [89, 105]. Ambas permitieron estudiar la física del proceso adecuadamente, arrojando resultados que satisfacen los requerimientos físicos esperables de una sección eficaz para este proceso [47, 123]. En estos cálculos se empleó la metodología GSF tanto para expandir el estado ligado de Helio como la función de dispersión. Este hecho remarca la polivalencia de las bases Sturmianas.

Esta tesis constituye un hito dentro de la trayectoria del grupo de investigación, pues es la primera tesis que en la que se presentan resultados teóricos en comparación con su contraparte experimental. Las tesis previas, de los ahora Dres. Randazzo y Frapiccini contrastaron sus resultados del continuo contra *benchmarks* teóricos también en onda S . El objeto de esta mención no es establecer una comparación con aquellos autores, sino evidenciar el crecimiento que se ha alcanzado como grupo de investigación.

El siguiente objetivo a corto plazo es la realización de cálculos a una energía de 4 eV de salida para ambos electrones emitidos. Aquí la metodología CCC reporta un peor acuerdo que para la cinemática de 10 eV [2]. Los autores sugieren la posibilidad de efectos más allá del primer orden de Born para este caso con electrones más lentos, hecho objetable, ya que la aproximación de Born claramente se asocia con el electrón proyectil/deflectado. No obstante, si nuestras predicciones teóricas para aquella energía de eyección llegaran a concordar con las de Kheifets [2], estaríamos, de manera definitiva, ante un hecho sin precedentes para el proceso de $(e, 3e)$ en este régimen de

bajo momento transferido: dos teorías señalarían la misma física. Si este fuera el caso, valdría preguntarse entonces a qué se debe la discrepancia con los experimentos. Si por imprecisiones en las resoluciones de energía, y momento de los fragmentos de la colisión u otro factor procedimental no contemplado. Por otra parte, el problema podría estar del lado de las formulaciones teóricas, y podría ser necesario reconsiderar la interacción del blanco con el proyectil. De interés también resulta la mayor cercanía de la energía de emisión, 4 eV, al umbral de ionización doble.

Un objetivo posterior es resolver con nuestra metodología la situación cinemática del experimento de Dorn [45], si bien aquí la transferencia de momento es mayor que en el experimento reportado en [1, 2] y la energía del electrón incidente/deflectado es más baja. Un mayor momento transferido modificaría la importancia relativa de las ondas parciales del momento angular total. Por otro lado, la energía incidente de 1 keV sigue perteneciendo ciertamente a rango de alta energía, pero en menor medida que los 5.6 keV del experimento tratado en esta tesis. El estado de cuatro cuerpos no perturbado así como la solución propuesta para el primer orden asumen que el electrón proyectil puede modelarse adecuadamente con ondas planas sin distorsión. Esta suposición sigue siendo válida para ambos valores de energía, pero con seguridad lo será más para el caso de 5.6 keV. Si nuevamente se obtuvieran FDCS concordantes con la metodología CCC, dicho acuerdo reforzaría aún más a ambas teorías. Las series experimentales del grupo de Freiburg si bien muestran mayor acuerdo en forma con la teoría [45], estas secciones eficaces no disponen de una escala absoluta. Su aporte principal es el de controlar que la forma que entreguen las secciones eficaces teóricas se condiga con ellas, pero no contienen la posibilidad de definir las incertidumbres planteadas en cuanto a la magnitud de las mismas.

El siguiente paso en la progresión es trabajar con diferentes especies atómicas. Entraría en juego una variable adicional, consistente en modelar los electrones no activos y su apantallamiento. De particular interés son los átomos de dos electrones en su último nivel, como el Magnesio, ya que las implementaciones posibles en su estado actual son capaces de caracterizar de manera exacta problemas de tres cuerpos. Por ello, y debido a que los electrones internos estarán más fuertemente ligados, serán menos susceptibles a ser perturbados por un proyectil.

Se mostró, dentro de un modelo en onda S , que con la base GSF es posible atacar

un problema con energía total muy próxima al umbral de doble ionización, es decir, dentro del régimen de Wannier. La obtención de la función de onda de un problema completo puede llevarse a cabo sin más modificaciones de los códigos, si bien sería necesario trabajar en dominios espaciales de extensiones considerables.

También en el marco de onda S se estudió la importancia de los elementos de base GSF en la expansión de la solución del continuo de tres cuerpos, de acuerdo a la parte real de su autovalor. Se hizo evidente que ciertos elementos de base son escasamente necesarios, con lo que un proceso de selección podría descartarlos y redundar en un ahorro de recursos computacionales. Además, se estableció cuáles productos de GSF sí resultan importantes y deben ser tenidos en cuenta en los cálculos.

En cuanto a adaptaciones y mejoras de la metodología es un objetivo a corto plazo es trabajar con bases de tipo Woods–Saxon, dado que estas prometerían una mejora en cuanto a la capacidad de la base de caracterizar oscilaciones con una energía distinta de la propia. Esto favorece la buena expansión del frente hiperesférico de doble continuo así como de los canales de ionización simple. Beneficios similares comportaría la reestructuración de los códigos tomados para tres cuerpos para trabajar sobre contornos complejos de la coordenada radial, a la par que realizar estudios relacionados al formalismo ECS en sí.

En cuanto a los canales de simple ionización, hemos observado en un modelo de onda S que se puede extraer sus amplitudes fácilmente si se trabaja con una base GSF generada con un potencial rectangular. El estudio de la simple ionización es otro aspecto en el que se profundizará en tiempos venideros, puesto que se requiere un número moderado de modificaciones para considerar las amplitudes presentes en las diferentes ondas parciales.

Conclusiones y perspectivas

El objetivo central de esta tesis fue la resolución del problema de doble ionización de Helio por impacto electrónico, que en el régimen de proyectil rápido y electrones emitidos lentos no ha encontrado acuerdo entre teorías y experimentos. Más aún, difieren entre sí las predicciones teóricas de distintos grupos, incluso aquellas derivadas de primeros principios. La tarea principal consistió en plantear la resolución de aquel problema explotando las capacidades de la metodología GSF.

Se desarrolló una metodología numérica capaz de generar GSF con potenciales arbitrarios y de efectuar la resolución aplicando la técnica de ECS. Es la primera implementación que consigue de una manera sistemática y general plantear la obtención de una base con rotación compleja de la coordenada radial. Asimismo, y más allá de este último avance, la metodología puede conseguir grandes niveles de precisión, de acuerdo a los ejemplos numéricos mostrados en la secciones 1.5 y 1.5.1. Por otra parte, contempla la posibilidad de incorporar potenciales de tipo no local tanto al potencial auxiliar como al generador. En síntesis, añade dimensiones adicionales a las herramientas generadoras de Bases Sturmianas que el grupo de investigación dispone.

Debido a que la herramienta primordial de trabajo esta constituida por las GSF, se desarrolló un código capaz de descomponer a cada elemento de base en términos de autoestados de la energía Coulombianos. En problemas de dos cuerpos resulta apreciable cómo puede, según la elección de los parámetros de la base, variar la velocidad de convergencia. Tanto mayor resulta este impacto sobre problemas de tres cuerpos, por ser los últimos considerablemente más costosos en recursos computacionales. Es, entonces, fundamental conocer las capacidades de expansión de un conjunto de funciones de base sobre cada sector de su coordenada radial. Con este objeto se desarrolló un código capaz de expandir cada función Sturmiana en autoestados Coulombianos de energía, realizando dicha expansión por sectores. Combinando las descomposiciones de cada Sturmian se ideó la forma de considerar las capacidades de todo un juego de base GSF.

Continuando con el estudio y las propiedades de las GSF, se establecieron tres *arquetipos* para dichas bases, de acuerdo al tipo de potencial generador: si el mismo es concentrado en una región cercana al origen, disperso en todo el intervalo o cualquier término medio entre estos extremos. Se establecieron las propiedades de cada clase, dejando claro para qué problemas de dispersión resulta más eficiente cada uno. Se

analizó un tipo de elemento de base que ocurre cuando el potencial generador posee cierta extensión espacial y el auxiliar es de tipo atractivo. Se denominó a estos elementos como *pseudoligados*, y los mismos mostraron luego ser relevantes en la extracción de las amplitudes de ionización simple en problemas de tres cuerpos.

Con la base GSF se realizaron experimentos numéricos sobre problemas de dispersión de dos cuerpos, dirigidos a obtener información sobre la forma más eficiente de emplearla. El objetivo tras varios de ellos fue realizar prospecciones sobre el impacto que tendrían las optimizaciones cuando fueran aplicadas a problemas de tres cuerpos. Esto se puede hacer exigiendo que la base resuelva una ecuación de dispersión con una energía diferente a la de la propia base. En particular, dos maneras de implementar bases GSF presentaron buenas posibilidades de mejorar las capacidades actuales de que se dispone para atacar problemas de tres cuerpos. Una de ellas consiste en el empleo de potenciales similares al de Woods–Saxon, con un radio de acción tal que se cubra la mayor parte del dominio radial, pero *sin alcanzar* apreciablemente la frontera del mismo. El otro esquema consiste en la aplicación de la técnica ECS a la base Sturmiana. Ambas propuestas conducen a rendimientos similares al caracterizar ondas de energía notoriamente distinta a la de la base, requisito que pesa sobre la misma en cualquier problema de tres cuerpos.

Ya en el marco de los estudios de tres cuerpos, se comenzó con el tratamiento de modelos de onda S . Se realizó el estudio de un modelo de onda S del proceso de $(e,3e)$ con el objetivo de comprender profundamente el contenido físico de cada una de las funciones de ondas de tres cuerpos obtenidas. Con dicho estudio En cuanto al problema de tres cuerpos, se estudió dentro del marco de un modelo en onda S , la física subyacente en la función de onda. Con la misma se mostró que es posible extraer las amplitudes de ionización simple así como de doble *de la propia función de onda*. Se analizaron los casos de energía total positiva, negativa, y, como un desafío adicional para la base, la situación específica de energía cero.

Otro estudio de optimización se realizó bajo el modelo de onda S . Se graficaron los coeficientes de la expansión de la función del continuo contra la parte real del autovalor de cada elemento de base. El resultado fue instructivo sobre todo para el tipo de base de Yukawa, para el que se estableció la clara necesidad de incorporar unos pocos elementos de base de autovalor repulsivo ($Re\{\beta_{l,n}\} > 0$), ya que la magnitud de

los coeficientes descendía diez órdenes de magnitud abruptamente más allá de cierto valor. Sobre los generadores de tipo rectangular se pudo establecer que los elementos *pseudoligados* resultan fundamentales y deben ser incorporados en las expansiones. En una base de tres cuerpos, los elementos que involucran dos autovalores atractivos de forma tal que la energía que caractericen sea mayor que la disponible para el canal de simple ionización sin excitación pierden rápidamente preponderancia.

Ascendiendo en complejidad en cuanto a la representación del problema físico, se realizaron estudios liberando la restricción de onda S sobre la función de dispersión, si bien manteniendo el modelo en onda S para el blanco. Se mostró por medio de un estudio del lado derecho de la ecuación de dispersión que en el régimen considerado de momento transferido la contribución de las ondas parciales L' en adelante podía considerarse despreciable. Curiosamente, manteniendo el modelo Temkin–Poet para el blanco, las secciones eficaces totalmente diferenciales (FDCS) se hallaban en el orden de magnitud de los experimentos. Este hecho, no obstante, resulta ser fortuito, puesto que al modelar en forma completa al átomo de Helio el acuerdo en magnitud con los datos experimentales desapareció. Se presentaron finalmente los resultados fundamentales de esta tesis: el resultado correspondiente al tratamiento completo del blanco en el estado inicial y el tratamiento completo y exacto del sistema en su estado final, donde los dos electrones del blanco son emitidos. Aquí se observó que si bien los resultados no coincidían en magnitud con los datos experimentales absolutos, sí lo hacían respecto de los cálculos de la metodología Convergent Close–Coupling (CCC). Se observó que los resultados difieren solo marginalmente en la magnitud, mostrando acuerdo casi completo en forma y por lo tanto prediciendo la misma física de la colisión. Más aún, los resultados del método GSF resultaban en sintonía con las restricciones teóricas, principalmente una estructura de mínimos, estudiada previamente por Lahmam–Bennani y colaboradores [47]. También se realizó la comparación de las FDCS de este trabajo con las proporcionadas por S. Zaytsev, evaluadas en el marco del método J–Matrix. Las mismas ya se encontraban renormalizadas para aproximarse a los experimentos. No obstante, estos cálculos dejaban sin verificar completamente la estructura de mínimos que debía presentar la FDCS por trabajarse en el régimen *cuasifotónico*. obstante,

Hasta el momento, los resultados de esta tesis constituyen el único caso de acuerdo entre dos metodologías *ab-initio* en la problemática de $(e, 3e)$ para un proyectil rápido.

Existen dos aspectos que se validaron con los resultados hallados. Específicamente, la formulación perturbativa propuesta por el grupo en la ref. [42] y el hecho de extraer la sección eficaz de la propia función de onda. Esta tesis constituye un ejemplo de la labor grupal del equipo de trabajo, así como del progreso transcurrido por el mismo. Es la primera tesis de este grupo en la cual se resuelve en forma exacta un problema de tres cuerpos que permite describir un proceso de colisión y realizar la comparación con datos experimentales y otras teorías. Es un hito que se ha alcanzado a nivel de grupo de investigación y cuyo progreso se seguirá observando en los trabajos doctorales de los próximos becarios.

Podemos señalar una amplia variedad de proyecciones a futuro. En primera instancia, seguirá realizar cálculos de doble ionización de Helio por impacto de electrones para las restantes configuraciones cinemáticas disponibles experimentalmente. Es posible incorporar sobre los códigos de tres cuerpos las modificaciones estudiadas en las secciones dedicadas a problemas de dos cuerpos con la finalidad de beneficiar tanto la descripción del doble continuo como de los canales de simple ionización. Existe también la posibilidad de explotar el cálculo de las amplitudes de dispersión de ionización simple, que se mostró exclusivamente para el modelo en onda S . Su generalización al resto de las ondas parciales constituye un objetivo de corto plazo que podría producir resultados de interés, contrastables con datos experimentales.

Un objetivo posterior consiste en generalizar los estudios de doble ionización por impacto de electrones a otros blancos atómicos. El desafío principal que se añade consiste en modelar efectivamente la presencia de los electrones no activos a través de potenciales de apantallamiento así como interacciones de intercambio. Por otra parte, ya no será suficiente caracterizar el estado inicial como de un único momento angular total fijo, sino que intervendrán orbitales atómicos involucrando varias ondas parciales del momento angular total.

Apéndices

Apéndice A

Convenciones generales y siglas

I. Unidades atómicas

unidad de longitud	$0.529 \times 10^{-10} m$
unidad de velocidad	$2.188 \times 10^6 m/s$
unidad de tiempo	$2.42 \times 10^{-17} s$
unidad de energía	$27.2116 eV$
constante de Plank	$\hbar = 1 u.a.$

Tabla A.1: Unidades Atómicas

II. Siglas

Se utilizaron en este trabajo las siglas correspondientes a los nombres originales en inglés de las metodologías y ciertas variables físicas. De esta manera se proporciona al lector un pasaje más fluido entre la presente tesis y la bibliografía específica, fundamentalmente en lengua inglesa. Las siglas se listan por orden alfabético.

- CCC : Convergent Close Coupling
- ECS : Exterior Complex Scaling
- FDCS : Fully Differential Cross Section, sección eficaz totalmente diferencial
- GSF : Generalized Sturmian Functions
- SDCS : Single Differential Cross Section, sección eficaz simple diferencial
- u.a. : unidades atómicas

Apéndice B

Estados *pseudoligados*

Partimos de la ecuación básica que verifican las funciones de base Sturmianas (1.2). Consideraremos en esta discusión el caso particular $\mathcal{U}(r) = \frac{Z_{coul}}{r}$, con $Z_{coul} < 0$ y $E_s > 0$. Es decir, el potencial coulombiano auxiliar será atractivo, y la energía de los Sturmians, positiva, ya que justamente que esta última condición haría inesperado hallar funciones semejantes a estados ligados. La ecuación (1.2) adopta entonces la forma:

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{Z_{coul}}{r} - E_s \right) S_{l,n}(r) = -\beta_{l,n} \mathcal{V}(r) S_{l,n}(r) . \quad (\text{B.1})$$

Haremos una particularización adicional:

$$\mathcal{V}(r) = \mathcal{V}_0 + \frac{Z_{gen}}{r} , \quad (\text{B.2})$$

debido a que así podremos abarcar con nuestro argumento potenciales generadores de tipo mixto (sección 1.2.3). Esta restricción, por lo tanto, contiene un mayor grado de generalidad que si nos limitáramos a potenciales puramente dispersos. La ecuación (B.1) se convierte en:

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{Z_{coul} + \beta_{l,n} Z_{gen}}{r} - (E_s - \mathcal{V}_0 \beta_{l,n}) \right) S_{l,n}(r) = 0. \quad (\text{B.3})$$

Introducimos ahora las definiciones $\tilde{E} = E_s - \mathcal{V}_0 \beta_{l,n}$ y $\tilde{Z} = Z_{coul} + \beta_{l,n} Z_{gen}$ y reescribimos (B.1). Debe verificarse $\tilde{E} < 0$ y $\tilde{Z} < 0$.

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{\tilde{Z}}{r} - \tilde{E} \right) S_{l,n}(r) = 0. \quad (\text{B.4})$$

Recordaremos que para el potencial Coulombiano tenemos

$$\tilde{E}_{n'} = -\frac{\tilde{Z}^2}{2n'^2}. \quad (\text{B.5})$$

Colocando entonces las variables a \mathcal{V}_0 y Z_{gen} en (B.5) obtenemos para β la ecuación:

$$\beta^2 Z_{gen}^2 + \beta (2Z_{coul}Z_{gen} - 2n'^2\mathcal{V}_0) + Z_{coul}^2 + 2n'^2 E_s = 0. \quad (\text{B.6})$$

cuyas soluciones son:

$$\beta = -\frac{Z_{coul}Z_{gen} - n'^2\mathcal{V}_0}{Z_{gen}^2} \pm \frac{1}{Z_{gen}^2} \sqrt{n'^4\mathcal{V}_0 - 2n'^2Z_{gen}(\mathcal{V}_0Z_{coul} + Z_{gen}E_s)} \quad (\text{B.7a})$$

$$\beta = \frac{1}{\mathcal{V}_0} \left[E_s + \frac{Z_{coul}^2}{2n'^2} \right], \text{ si } Z_{gen} = 0. \quad (\text{B.7b})$$

Debe verificarse, para que un elemento de base se corresponda con un estado *pseudoligado*, que su amplitud haya decrecido hasta un cero numérico en la región donde comienza a valer el régimen asintótico. Es decir, donde el potencial generador pasa a ser de magnitud despreciable, R_{gen} . Los *pseudoligados* satisfacen la condición asintótica impuesta (por ejemplo, onda saliente), pero en una región donde su amplitud ya es numéricamente inapreciable. Otra manera de expresar la condición es:

$$abs(S_{l,n}(R_{gen})) \ll \max\{abs(S_{l,n}(R_M))\}, \quad (\text{B.8})$$

donde R_M corresponde con el máximo de $S_{l,n}(r)$ más alejado del origen. De otra manera, los elementos de base comenzarán a mimetizarse con el continuo (saliente o entrante) y la parte imaginaria de β dejará de ser despreciable respecto de la real. A modo de ilustración se presentan en la tabla B.1 los autovalores de los Sturmians *pseudoligados* seleccionados de entre los obtenidos para una resolución con: $\mathcal{V}_0 = 0.78$, $Z_{coul} = -2$, $Z_{gen} = 0.55$ y $E_s = 0.75$. Se presentan valores analíticos de acuerdo a (B.7a), así como sus contrapartes numéricas generadas con el código de diferencias finitas discutido la sección 1.5.

El grado de coincidencia reportado en la tabla B.1 comienza siendo sumamente significativo, pero se deteriora conforme n crece. Los últimos estados de la tabla poseían extensiones espaciales tales que ya apreciaban la finitud del dominio radial considerado, de 100.0 u.a., dejando de cumplirse la condición (B.8) para ellos. Es claramente apreciable que la parte imaginaria de los autovalores resultantes es del orden de un cero

numérico para los primeros cinco estados. En los siguientes la parte imaginaria comienza a crecer, indicando que los efectos del borde y la condición asintótica allí impuesta se torna numéricamente relevante para su extensión espacial.

n	$\beta_{0,n}$ analíticos	$\beta_{0,n}$ numéricos
1	1.6934972694	1.6934972689 + 2.3E-012
2	1.2399380100	1.2399380998 + 2.6E-013 i
3	1.1001300206	1.1001300205 - 4.3E-013 i
4	1.0430450196	1.0430450195 + 6.5E-014 i
5	1.0148433711	1.0148433711 - 5.1E-013 i
6	0.9990044204	0.9990044165 + 1.1E-009 i
7	0.9892680827	0.9892638222 + 8.2E-007 i
8	0.9828716789	0.9825998840 + 3.1E-005 i
9	0.9784505527	0.9761322668 + 1.5E-004 i
10	0.9752700593	0.9680180283 + 3.2E-004 i

Tabla B.1: Pseudoligados analíticos vs numéricos. Comienzan a apartarse cuando las autofunciones se extienden hasta el alcance del potencial generador (en este caso, un pozo rectangular). La resolución numérica se efectuó en una caja de 100.0 u.a..

Para los parámetros empleados aquí las soluciones β_n con signo positivo en (B.7a) arrojaron valores que se corresponderían con energías más profundas que la fundamental de (B.5). Por tanto, carecían de significado físico y se hicieron a un lado en este estudio. Además, siendo sus valores analíticos significativamente mayores y rápidamente crecientes, ninguno de ellos cayó dentro de la lista de autovalores numéricos, ya que los mismos son ordenados y seleccionados por módulo creciente en el código. Es una continuación factible un análisis más detallado, analítico y numérico, de estos estados empleando diferentes combinaciones de \mathcal{V}_0 y Z_{gen} .

En conclusión, se ha presentado un breve estudio analítico y numérico acerca de un suceso común y hasta intrigante en el cálculo de bases GSF: la aparición de ciertos elementos de base que adoptan la apariencia de estados ligados aún cuando la energía es positiva y el comportamiento asintótico impuesto es de tipo saliente. Con los argumentos delineados aquí consideramos haber establecido de una manera general las condiciones bajo las cuales es de esperar su presencia entre los elementos de una base.

Apéndice C

Potenciales no locales en el cálculo de Funciones Sturmianas

La metodología para producir bases GSF de manera numérica puede incorporar en su formulación potenciales de tipo no local. Lo anterior se aplica tanto para el potencial auxiliar $\mathcal{U}(r)$ como el generador $\mathcal{V}(r)$. La ecuación (1.2) con potenciales no locales adicionados es:

$$\begin{aligned} & [\mathcal{T}_l + \mathcal{U}(r) - E_s] S_{l,n}(r) + \int_0^{R_{max}} \mathcal{U}_{NL}(r, r') S_{l,n}(r') dr' = \\ & -\beta_{l,n} \left[\mathcal{V}(r) S_{l,n}(r) + \int_0^{R_{max}} \mathcal{V}_{NL}(r, r') S_{l,n}(r') dr' \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

La dificultad en este tipo de problema radica en que, dentro de la integral, interviene la propia función incógnita $S_{l,n}(r')$. Esto puede escribirse en términos de la misma función evaluada a lo largo de puntos a lo largo de todo el intervalo. A modo de ejemplo se explicita a continuación cómo se incorpora un potencial no local $\Upsilon(r, r')$ en un grillado de tipo uniforme utilizando integración por trapezoides. La contribución no local en un punto r_ν de la grilla es dada por:

$$\begin{aligned} & \int_0^{R_{max}} \Upsilon_{NL}(r_\nu, r') S_{l,n}(r') dr' = \\ & \frac{R}{2(n_{max} + 1)} \left[\Upsilon_{NL}(r_\nu, r_0) S_{l,n}(r_0) + 2\Upsilon_{NL}(r_\nu, r_1) S_{l,n}(r_1) + 2\Upsilon_{NL}(r_\nu, r_2) S_{l,n}(r_2) + \right. \\ & \left. \cdots + 2\Upsilon_{NL}(r_\nu, r_{n_{max}-1}) S_{l,n}(r_{n_{max}-1}) + \Upsilon_{NL}(r_\nu, r_{n_{max}}) S_{l,n}(r_{n_{max}}) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Las evaluaciones del potencial no local en principio se extienden a lo largo de todo el dominio de la grilla radial. La presente es una ejemplificación sencilla, que puede generalizar en dos sentidos: extendiendo la ley de cuadraturas a grillados no uniformes y

a utilizando una regla de integración de mayor orden, como la de Simpson. La extensión de las reglas de integración de Simpson y por trapezoides a grillados variables se detalla en el apéndice D.

Apéndice D

Cuadraturas para grillados variables

Las integraciones realizadas en los problemas de dos cuerpos se efectuaron por cuadraturas trapezoidales y de Simpson. Estas rutinas debían ser suficientemente generales como para trabajar con funciones de base GSF que pudieran estar evaluados en grillas no uniformes.

Sea x la variable independiente e y la dependiente. Los valores discretos de cada par (x_i, y_i) se hallan almacenados en los vectores \mathbf{x} e \mathbf{y} . Asimismo, definimos el vector de cuadraturas \mathbf{q} . Consideramos que los tres vectores tienen elementos indexables por $i = 1, \dots, N$.

El procedimiento consistía en, dados los valores de la variable independiente \mathbf{x} , elaborar un vector de cuadraturas \mathbf{q} aplicando sucesivamente la regla trapezoidal o la de Simpson. Luego, una integración numérica se reducirá simplemente a un producto escalar del vector de cuadraturas por \mathbf{y} .

$$I = \int_{x_1}^{x_N} y(x) dx \approx \mathbf{q} \cdot \mathbf{y} \quad (\text{D.1})$$

Los métodos empleados diferían únicamente la construcción de \mathbf{q} .

I. Trapezoides

La regla de integración por trapezoides asume que el integrando será bien aproximado por rectas sucesivas. Esta regla entrega un orden más que la de los rectángulos, siendo escasamente más compleja de implementar.

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y(x) dx \approx \frac{(x_{i+1} - x_i)}{2} (y(x_i) + y(x_{i+1})) \quad (\text{D.2})$$

Aproximaremos ahora la integral completa:

$$\int_{x_1}^{x_N} y(x) dx \approx \frac{(x_2 - x_1)}{2} (y(x_1) + y(x_2)) + \frac{(x_3 - x_2)}{2} (y(x_3) + y(x_2)) + \dots + \frac{(x_N - x_{N-1})}{2} (y(x_N) + y(x_{N-1})). \quad (\text{D.3})$$

Reagrupamos los términos de modo tal que quede en forma de productos $y_i q_i$:

$$\int_{x_1}^{x_N} y(x) dx \approx \frac{(x_2 - x_1)}{2} y(x_1) + y(x_2) \left[\frac{(x_2 - x_1)}{2} + \frac{(x_3 - x_2)}{2} \right] + \dots + y(x_{N-1}) \left[\frac{(x_{N-1} - x_{N-2})}{2} + \frac{(x_N - x_{N-1})}{2} \right] + y(x_N) \left[\frac{(x_N - x_{N-1})}{2} \right]. \quad (\text{D.4})$$

Finalmente, obtendremos para los coeficientes q_i

$$\begin{aligned} q_1 &= \frac{(x_2 - x_1)}{2} \\ q_i &= \frac{(x_{i+1} - x_{i-1})}{2}, \quad i = 2, \dots, N-1 \\ q_N &= \frac{(x_N - x_{N-1})}{2} \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Es inmediato corroborar que con un paso h uniforme se reduce (D.5) a las expresiones más familiares

$$\begin{aligned} q_1 &= \frac{h}{2} \\ q_i &= h, \quad i = 2, \dots, N-1 \\ q_N &= \frac{h}{2}. \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

II. Simpson

Para derivar una ley de cuadraturas de Simpson definimos primeramente un polinomio de Lagrange interpolante de tres puntos de una sucesión de pares $\{x_i, y_i\}$.

$$P_3(x) = y_i \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} \frac{x - x_{i+2}}{x_i - x_{i+2}} + y_{i+1} \frac{x - x_{i+2}}{x_{i+1} - x_{i+2}} \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} + y_{i+2} \frac{x - x_i}{x_{i+2} - x_i} \frac{x - x_{i+1}}{x_{i+2} - x_{i+1}} \quad (\text{D.7})$$

Resolveremos la integración del polinomio anterior desde $x = x_i$ hasta $x = x_{i+2}$.

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} P_3(x) dx = y_i \left[\frac{x_{i+2} - x_i}{2} - \frac{(x_{i+2} - x_i)^2}{6(x_{i+1} - x_i)} \right] + y_{i+1} \left[\frac{(x_i - x_{i+2})^3}{6(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})} \right] + y_{i+2} \left[\frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{2} - \frac{(x_{i+2} - x_{i+1})^2}{6(x_{i+2} - x_i)} - \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{6(x_{i+2} - x_i)(x_{i+2} - x_{i+1})} \right] \quad (\text{D.8})$$

Si la cantidad de puntos donde disponemos de las evaluaciones de la función a integrar resulta par, debemos añadir la última sección. Esta cuadratura se puede obtener de tomar un interpolante cuadrático entre los puntos x_i y x_{i+2} , pero integrándolo desde x_{i+1} hasta x_{i+2} .

$$\int_{x_{i+1}}^{x_{i+2}} P_3(x) dx = y_i \left[-\frac{(x_{i+2} - x_{i+1})^3}{6(x_{i+1} - x_i)(x_{i+2} - x_i)} \right] + y_{i+1} \left[\frac{(x_{i+2} - x_{i+1})^2}{6(x_{i+1} - x_i)} + \frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{2} \right] + y_{i+2} \left[\frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{2} - \frac{(x_{i+2} - x_{i+1})^2}{6(x_{i+2} - x_i)} \right] \quad (\text{D.9})$$

El armado del vector de cuadraturas es aquí evidentemente más complicado que en el caso trapezoidal. Definiremos, en base a (D.8) los coeficientes $\alpha_i^{(j)}$

$$\alpha_i^{(1)} = \left[\frac{x_{i+2} - x_i}{2} - \frac{(x_{i+2} - x_i)^2}{6(x_{i+1} - x_i)} \right] \quad (\text{D.10})$$

$$\alpha_i^{(2)} = \left[\frac{(x_i - x_{i+2})^3}{6(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})} \right] \quad (\text{D.11})$$

$$\alpha_i^{(3)} = \left[\frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{2} - \frac{(x_{i+2} - x_{i+1})^2}{6(x_{i+2} - x_i)} - \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{6(x_{i+2} - x_i)(x_{i+2} - x_{i+1})} \right] \quad (\text{D.12})$$

Entonces, los elementos q_i serán:

$$q_1 = \alpha_1^{(1)} \tag{D.13}$$

$$q_{2i} = \alpha_{2i-1}^{(2)} \quad i = 1, \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor - 1 \tag{D.14}$$

$$q_{2i+1} = \alpha_{2i-1}^{(3)} + \alpha_{2i+1}^{(1)}, \quad i = 1, \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor - 1 \tag{D.15}$$

Se ilustra la construcción de \mathbf{q} con los coeficientes $\alpha_i^{(j)}$ en la figura D.1.

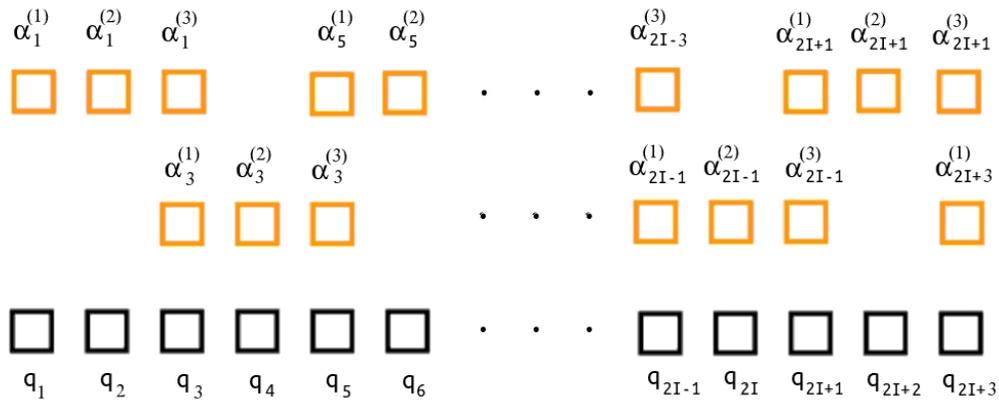


Figura D.1: Construcción del vector \mathbf{q} de cuadratura de Simpson por medio de los coeficientes $\alpha_i^{(j)}$

Para los elementos finales de \mathbf{q} debemos considerar separadamente N par o impar. Trataremos primero el caso impar, más simple, en el cual cabe una cantidad entera de polinomios interpolantes de tres puntos.

$$q_{N-1} = \alpha_{N-2}^{(2)} \tag{D.16}$$

$$q_N = \alpha_{N-2}^{(3)}. \tag{D.17}$$

En particular, el último elemento de \mathbf{q} se diferencia del resto de los impares porque aquí no existe ningún coeficiente $\alpha_N^{(1)}$. Vemos en la figura D.2 la construcción resultante.

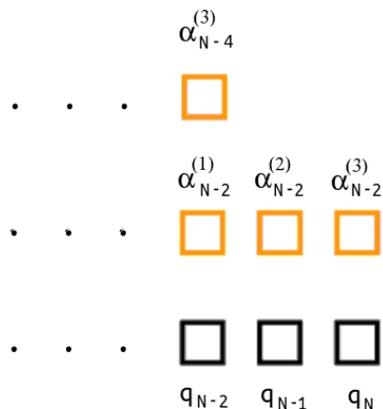


Figura D.2: Construcción de la cuadratura de Simpson para intervalo variable

Consideración especial merece el caso de N par. En esta situación hemos de definir los coeficientes $\gamma_i^{(j)}$ en base a (D.9) aplicada sobre los puntos x_{N-2}, x_{N-1} y x_N . Recordaremos que aquí el interpolante polinomial se construye con los mencionados puntos pero su integración se efectúa desde x_{N-1} hasta x_N .

$$\begin{aligned}
 \gamma_i^{(1)} &= \left[-\frac{(x_{i+2} - x_{i+1})^3}{6(x_{i+1} - x_i)(x_{i+2} - x_i)} \right] \\
 \gamma_i^{(2)} &= \left[\frac{(x_{i+2} - x_{i+1})^2}{6(x_{i+1} - x_i)} + \frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{2} \right] \\
 \gamma_i^{(3)} &= \left[\frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{2} - \frac{(x_{i+2} - x_{i+1})^2}{6(x_{i+2} - x_i)} \right].
 \end{aligned} \tag{D.18}$$

La construcción de los últimos tres elementos del vector de cuadraturas se ve modificada a:

$$q_{N-2} = \alpha_{N-3}^{(2)} + \gamma_{N-2}^{(1)} \tag{D.19}$$

$$q_{N-1} = \alpha_{N-3}^{(3)} + \gamma_{N-2}^{(2)} \tag{D.20}$$

$$q_N = \gamma_{N-2}^{(3)}. \tag{D.21}$$

En la figura (D.3) se describe la adición de la integral de x_{N-1} a x_N a través de los coeficientes $\gamma_i^{(j)}$.

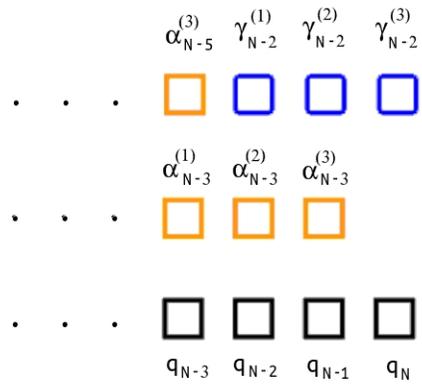


Figura D.3: Construcción de la cuadratura de Simpson para intervalo variable

Apéndice E

Resolución directa de la ecuación de dispersión de dos cuerpos

En base al esquema de diferenciación descrito en la sección 1.5 se desarrolló un código capaz de resolver de manera directa, por diferencias finitas de orden arbitrario, el problema dado por la ecuación de dispersión generalizada:

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + V_L(r) - E \right] \psi_{sc,l}^+(r) = -V_R(r) \varphi_0(r). \quad (\text{E.1})$$

La ecuación (E.1) se diferencia de (1.2) en que no existe la figura del autovalor y que la función incógnita de (E.1) aparece solamente en el lado izquierdo. Las condiciones asintóticas se imponen de igual manera que en la sección 1.5.

Se procede a discretizar la coordenada radial, y expresar la derivada segunda por medio de los coeficientes $c_{i,p}^{(2)}$ ya introducidos en la sección 1.5. El resultado de la discretización es un conjunto de ecuaciones lineales acopladas, mientras que al discretizar (1.2) se obtiene un problema de autovalores y autovectores. La resolución de un sistema lineal es, desde un punto de vista de recursos computacionales, considerablemente más económica que la de un problema de autovalores. Por este motivo se puede trabajar con discretizaciones de r más densas sin que esto conlleve un crecimiento desmedido de los tiempos de cálculo. En los ejemplos de la sección 1.5 se trabaja con resoluciones de no más de 1200 puntos, ya que con dicho valor se obtiene la alta precisión que allí se presenta mientras que la resolución demora alrededor de 90 segundos en un solo procesador de 3.2 GHz. En cambio, la resolución de (E.1) con una discretización de 6000 puntos requiere de 6.5 segundos con el mismo procesador; el tiempo asciende a solamente 12.5 segundos si la discretización emplea 10000 puntos.

Se define el parámetro n_s análogamente a la sección 1.5. Es decir, indica qué can-

tidad de puntos se toman para establecer el aproximante de la derivada segunda. Para un grillado de diferenciación genérico se emplea la rutina ZGESV. Sin embargo, el caso más básico $n_s = 3$ merece una consideración especial. El mismo implica una matriz Hamiltoniana tridiagonal, y en el contexto de los sistemas lineales sí existe, en la librería LAPACK [75], una rutina específica capaz de resolverlos eficientemente: ZGTSV. Si se decide utilizar una diferenciación con tres puntos, y por ende una grilla más densa para compensar la baja precisión de dicha aproximación, es apropiado trabajar con la rutina ZGTSV puesto que la misma solamente almacena los elementos diagonales y subdiagonales de la matriz del sistema lineal. No obstante, se hallaron evidencias de que una evaluación en diferencias finitas con un orden elevado permite alcanzar la convergencia de la solución con un número comparativamente reducido de puntos. En la figura E.1 se ilustra la convergencia de las resoluciones con $n_s = 25$ en comparación con $n_s = 3$ y más puntos de grilla.

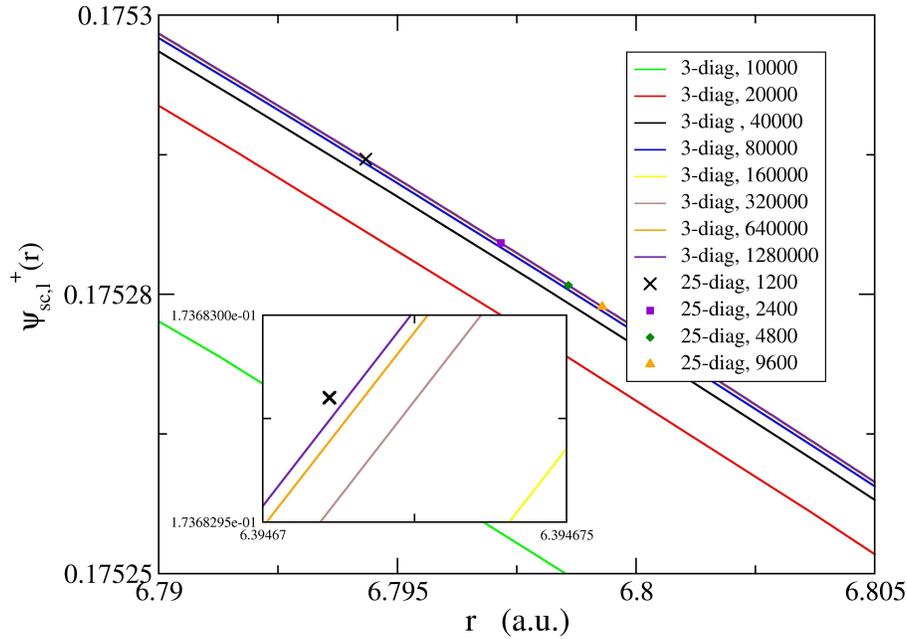


Figura E.1: Detalle de una función $\psi_{sc,l}^+(r)$ resuelta con distintas discretizaciones del intervalo radial y orden de diferenciación. Se puede observar que las resoluciones con $n_s = 25$ presentan una convergencia significativamente más rápida que las de $n_s = 3$.

Se puede observar claramente que los puntos del esquema de $n_s = 25$ muestran tendencia a agruparse próximos a los resultados de $n_s = 3$ con 64000 y 128000

puntos. Es decir, registran variaciones notoriamente menores que los resultados del esquema tridiagonal, que requiere una cantidad considerable de puntos hasta hallar convergencia.

La implementación aquí descrita se utilizó en el marco del trabajo [124] para obtener un tipo de funciones de base denominados Quasi–Sturmians, que son solución de una ecuación con la misma estructura de (E.1). En aquella contribución se introducen los aspectos matemáticos y formales, así como se discuten dos casos particulares analíticos de bases Quasi–Sturmianas. También se describe de manera breve la implementación general en un esquema de diferencias finitas de orden arbitrario y se efectúa la resolución de un problema de dispersión a modo de ilustrar las capacidades de la base. Está prevista la escritura de otro artículo orientado más fuertemente sobre los aspectos numéricos y de aplicación de las bases Quasi–Sturmianas.

Apéndice F

Continuación hasta el infinito de las integrales en (r_2, r_3)

El tipo de integrales involucradas al calcular la matriz de repulsión es el siguiente [44]:

$$\int_0^\infty dr S_{l_1, n_1}^{(1)}(r) S_{l_2, n_2}^{(2)}(r) r^l \int_r^\infty dr' S_{l_3, n_3}^{(3)}(r') S_{l_4, n_4}^{(4)}(r') \frac{1}{r'^{l+1}} =$$

$$\int_0^R dr S_{l_1, n_1}^{(1)}(r) S_{l_2, n_2}^{(2)}(r) r^l \int_r^\infty dr' S_{l_3, n_3}^{(3)}(r') S_{l_4, n_4}^{(4)}(r') \frac{1}{r'^{l+1}} + \quad (\text{F.1})$$

$$\int_R^\infty dr S_{l_1, n_1}^{(1)}(r) S_{l_2, n_2}^{(2)}(r) r^l \int_r^\infty dr' S_{l_3, n_3}^{(3)}(r') S_{l_4, n_4}^{(4)}(r') \frac{1}{r'^{l+1}}$$

(F.2)

Definimos

$$A_{12}^{s_1, s_2}(p, \lambda, k_1, k_2, \gamma_1, \gamma_2, R) = \int_R^\infty N_1 e^{is_1(k_1 r - \gamma_1 \log(2k_1 r))} N_2 e^{is_2(k_2 r - \gamma_2 \log(2k_2 r))} r^p e^{-\lambda r} dr \quad (\text{F.3})$$

$$= N_1 N_2 (2k_1)^{-is_1 \gamma_1} (2k_2)^{-is_2 \gamma_2} R^{1-\nu} E_\nu(R\tilde{z}), \quad (\text{F.4})$$

donde hemos introducido $\nu = is_1 \gamma_1 + is_2 \gamma_2 - p$ y $\tilde{z} = -(is_1 k_1 + is_2 k_2 - \lambda)$. Analicemos separadamente los términos de (F.1):

$$\int_0^R dr S_{l_1, n_1}^{(1)}(r) S_{l_2, n_2}^{(2)}(r) r^l \int_r^\infty dr' S_{l_3, n_3}^{(3)}(r') S_{l_4, n_4}^{(4)}(r') \frac{1}{r'^{l+1}} = \quad (\text{F.5})$$

$$\int_0^R dr S_{l_1, n_1}^{(1)}(r) S_{l_2, n_2}^{(2)}(r) r^l \left[\int_r^R dr' S_{l_3, n_3}^{(3)}(r') S_{l_4, n_4}^{(4)}(r') \frac{1}{r'^{l+1}} + A_{34}^{s_3, s_4}(p, \lambda, k_3, k_4, \gamma_3, \gamma_4, R) \right],$$

y

$$\int_R^\infty dr S_{l_1, n_1}^{(1)}(r) S_{l_2, n_2}^{(2)}(r) r^l \int_r^\infty dr' S_{l_3, n_3}^{(3)}(r') S_{l_4, n_4}^{(4)}(r') \frac{1}{r^{l+1}} = \quad (\text{F.6})$$

$$\int_R^\infty dr S_{l_1, n_1}^{(1)}(r) S_{l_2, n_2}^{(2)}(r) r^l A_{34}^{s_3, s_4}(p, \lambda, k_3, k_4, \gamma_3, \gamma_4, r).$$

Notamos en (F.6) que aparece una función $A_{34}^{s_3, s_4}(p, \lambda, k_3, k_4, \gamma_3, \gamma_4, r)$ dentro de una integración. Evitaremos resolver dicha integral directamente, y nos valdremos de la aproximación asintótica de $A_{34}^{s_3, s_4}(p, \lambda, k_3, k_4, \gamma_3, \gamma_4, r)$ para argumentos grandes. La misma resulta apropiada si tenemos en cuenta los parámetros que intervienen en la evaluación de (F.5) y (F.6).

La expansión asintótica de utilidad aquí es:

$$E_\nu(z) = \frac{e^{-z}}{z} {}_2F_0\left(1; \nu; -\frac{1}{z}\right) = \frac{e^{-z}}{z} \left[1 - \frac{\nu}{z} + \frac{\nu(\nu+1)}{z^2} - \frac{\nu(\nu+1)(\nu+2)}{z^3} + \dots \right]. \quad (\text{F.7})$$

Como ejemplo de la validez de la aproximación en el rango de parámetros propios de un problema de colisiones, mostramos una evaluación de (F.7) con cinco términos así como de la Integral Exponencial exacta. Tomando $Z = 2.0$, una energía $E = 0.884$ y un radio $R = 90.0$ llegamos a los siguientes valores:

Exacta	$-2.24093037646 \times 10^{-3} + i 3.43442469498 \times 10^{-3}$
Asintótica (5 términos)	$-2.24093037656 \times 10^{-3} + i 3.43442469546 \times 10^{-3}$

Tabla F.1: Evaluación exacta y asintótica de $E_\nu(R\tilde{z})$

Queda evidenciado que con seguridad se puede emplear (F.7), para aproximar $E_\nu(R\tilde{z})$ en (F.6) por unos pocos términos de su serie asintótica. Con esta aproximación, el conjunto de integraciones que es necesario efectuar pertenece a la clase que puede ser resuelta con la expresión (2.15).

Apéndice G

Cálculo del vector φ

Detallaremos en este apéndice el cálculo del vector φ . Mostraremos primeramente cómo se procede para calcular las interacciones que involucran a uno de los términos exponenciales, $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2}$ y $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_3}$.

$$\int \Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2} \Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \quad (\text{G.1})$$

Reemplazamos las exponenciales por su expansión de una onda plana en ondas parciales (3.37):

$$\begin{aligned} & \int \Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2} \Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\ & \sum_{l,m} 4\pi i^l Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{q}}) \sum_{\nu} \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) j_l(qr_2) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}_2) \varphi_{\nu}^{(b,b)} \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \quad (\text{G.2}) \\ & \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^{(b,b)} \sum_{l=|l''_a-l_a|}^{l''_a+l_a} Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{q}}) J_{l;n'_a n_a}^{(c,b)l''_a l_a}(q) O_{n'_b n_a}^{(c,b)l'_b l_a} C_{L,M}^{L'',M''}[l''_a, l''_b; l; l_a, l_b], \end{aligned}$$

donde hemos introducido las siguientes notaciones:

$$J_{l;n'_a n_a}^{(c,b)l''_a l_a}(q) = \int_0^{\infty} dr_2 S_{l''_a n'_a}^{(2,c)}(r_2) j_l(qr) S_{l_a n_a}^{(2,b)}(r_2), \quad (\text{G.3})$$

$$O_{n'_a n_a}^{(c,b)l''_a l_a}(q) = \int_0^{\infty} dr_2 S_{l''_a n'_a}^{(2,c)}(r_2) j_l(qr) S_{l_a n_a}^{(2,b)}(r_2), \quad (\text{G.4})$$

$$C_{L,M}^{L'',M''}[l''_a, l''_b; l; l_a, l_b] = \sum_m 4\pi i^l B_{L,M}^{L'',M''}[l''_a, l''_b; l, m; l_a, l_b]. \quad (\text{G.5})$$

La definición de los coeficientes angulares $B_{L,M}^{L'',M''}[l''_a, l''_b; l, m; l_a, l_b]$ se encuentra en el apéndice H

El elemento de volumen en coordenadas esféricas posee un factor $d\mathbf{r}_i = r_i^2 d\Omega dr_i$ que elimina los factores $\frac{1}{r_i}$ presentes en las funciones $\Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ y $\Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$. Por

tanto, las expresiones $O_{n_a''n_a}^{(c,b)l_a''l_a}(q)$ y $J_{l;n_a''n_a}^{(c,b)l_a''l_a}(q)$ presentan solamente como integrandos a las funciones Sturmianas sin los factores $\frac{1}{r_i}$.

Para el término con la exponencial oscilatoria en \mathbf{r}_3 tendremos, análogamente,

$$\begin{aligned} & \int \Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_3} \Phi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\ & \sum_{l,m} 4\pi i^l Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{q}}) \sum_{\nu} \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) j_l(qr_3) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}_3) \varphi_{\nu}^{(b,b)} \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \quad (\text{G.6}) \\ & \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^{(b,b)} \sum_{l=|l_b''-l_b|}^{l_b''+l_b} Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{q}}) J_{l;n_b''n_b}^{(c,b)l_b''l_b}(q) O_{n_a''n_a}^{(c,b)l_a''l_a}(-1)^{l_a''+l_b''+l_a+l_b-L''-L} C_{L,M}^{L'',M''}[l_b'', l_a''; l; l_b, l_a]. \end{aligned}$$

La integral de seis dimensiones que interviene en el término que media la interacción de proyectil con carga nuclear es simplemente:

$$\sum_{\nu} \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \varphi_{\nu}^{(b,b)} \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \delta_{L'',L} \delta_{M'',M} \delta_{l_a'',l_a} \delta_{l_b'',l_b} \sum_{\nu} O_{n_a''n_a}^{(c,b)l_a''l_a} O_{n_b''n_b}^{(c,b)l_b''l_b}. \quad (\text{G.7})$$

Existe otra manera analítica de formular las expresiones, que es válida para el caso específico en el cual el blanco de Helio se halla inicialmente en un estado de momento angular total nulo: $L = 0 = M$.

$$\begin{aligned} & \sum_{l,m} 4\pi i^l Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{q}}) \sum_{\nu} \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) j_l(qr_2) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}_2) \varphi_{\nu}^{(b,b)} \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\ & Y_{L''}^{M''}(\hat{\mathbf{q}}) \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^{(b,b)} J_{\nu;n_a''n_a}^{(c,b)l_a''l_a}(q) O_{n_b''n_a}^{(c,b)l_b''l_a} D_{l_a''l_a}^{(2)L''M''}, \quad (\text{G.8}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{l,m} 4\pi i^l Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{q}}) \sum_{\nu} \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \Xi_{\nu''}^{(c,c)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) j_l(qr_3) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}_3) \varphi_{\nu}^{(b,b)} \Xi_{\nu}^{(b,b)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\ & Y_{L''}^{M''}(\hat{\mathbf{q}}) \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^{(b,b)} J_{L'';n_b''n_b}^{(c,b)l_b''l_b}(q) O_{n_a''n_a}^{(c,b)l_a''l_a} D_{l_b''l_b}^{(3)L''M''}, \quad (\text{G.9}) \end{aligned}$$

donde hemos utilizado los coeficientes que definiremos a continuación:

$$D_{l_a''l_a}^{(2)L''M''} = \delta_{l_a l_b} \sqrt{4\pi i^{L''}} \left[\delta_{l_b''l_b} \sqrt{2l_a''+1} (-1)^{l_a''} \begin{pmatrix} l_a'' & L'' & l_a \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (\text{G.10})$$

$$D_{l_b''l_b}^{(3)L''M''} = \delta_{l_a l_b} \sqrt{4\pi i^{L''}} \left[\delta_{l_a''l_a} \sqrt{2l_b''+1} (-1)^{l_b''} \begin{pmatrix} l_b'' & L'' & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]. \quad (\text{G.11})$$

Los arreglos entre paréntesis son denominados Símbolos 6-j [125]. El término nuclear

es idéntico en ambas formulaciones; vale (G.7). En (G.8) y (G.9) se hace evidente que, para el caso de interés de esta tesis, que es utilizar el estado fundamental del Helio, sobrevive únicamente un término del desarrollo de la exponencial oscilatoria en ondas parciales. Más aún, para un mismo valor de L' , y dos dados valores M' permitidos, sean ellos M_α y M_γ , las solución correspondiente a $M' = M_\alpha$ será coincidente con la de $M' = M_\gamma$ a menos del factor $\frac{Y_{L'}^{M_\alpha}(\mathbf{q})}{Y_{L'}^{M_\gamma}(\mathbf{q})}$. Por lo tanto, es suficiente con realizar una sola resolución del sistema (3.39), con algún M' válido para cada valor L' .

Apéndice H

Integrales de armónicos esféricos y biesféricos

Para realizar las integrales de solapamiento entre dos elementos de las bases de tres cuerpos no correlacionada, es precisa la siguiente integral angular:

$$\int \mathcal{Y}_{l'_a l'_b}^{L' M'^*}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3) \mathcal{Y}_{l_a l_b}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3) d\Omega_2 d\Omega_3 = \delta_{L', L} \delta_{M', M} \delta_{l'_a, l_a} \delta_{l'_b, l_b}. \quad (\text{H.1})$$

La expresión $B_{L, M}^{L', M'} [l'_a, l'_b; l, m; l_a, l_b]$ que se menciona en el apéndice G consiste en la integral de dos armónicos biesféricos y un armónico esférico en los ángulos $d\Omega_2$ y $d\Omega_3$:

$$\begin{aligned} B_{L, M}^{L', M'} [l'_a, l'_b; l, m; l_a, l_b] &\equiv \int \mathcal{Y}_{l'_a l'_b}^{L' M'^*}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3) (Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}_2)) \mathcal{Y}_{l_a l_b}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3) d\Omega_2 d\Omega_3 = \\ &\sqrt{\frac{(2l+1)(2l'_a+1)}{4\pi(2l_a+1)}} \sum_{m'_a m_a m'_b m_b} \delta_{l'_b, l_b} \delta_{m'_b, m_b} \langle l_a l_b m_a m_b | LM \rangle \\ &\langle l'_a l'_b m'_a m'_b | L' M' \rangle \langle l l'_a 0 0 | l_a 0 \rangle \langle l l'_a m - m'_a | l_a - m_a \rangle (-1)^{m'_a + m_a}. \end{aligned} \quad (\text{H.2})$$

Las identidades de los coeficientes de Clebsch–Gordan permiten establecer las siguientes relaciones entre los índices:

$$m'_b = m_b \quad (\text{H.3})$$

$$m_a + m_b = M \quad (\text{H.4})$$

$$m'_a + m'_b = M' \quad (\text{H.5})$$

$$m - m'_a = -m_a, \quad (\text{H.6})$$

y con ellas es posible determinar qué valores de éstos no implican términos nulos en

las sumatorias:

$$m'_b = m_b \quad (\text{H.7})$$

$$m = M' - M \quad (\text{H.8})$$

$$m'_a = m_a + m \quad (\text{H.9})$$

$$m_b = M - m_a. \quad (\text{H.10})$$

Por lo tanto, M' y M fijan el valor de m , que a su vez selecciona un valor m'_a por cada m_a . Este último índice es el único en el que se realiza una sumatoria.

Referencias

- [1] Taouil, I., Lahmam-Bennani, A., Duguet, A., and Avaldi, L., *Physical Review Letters* **81** (1998) 4600.
- [2] Kheifets, A., Bray, I., Lahmamm-Bennani, Duguet, A., and Taouil, I., *Physical Review A* **5047** (1999).
- [3] Jones, S. and Madison, D. H., *Physical Review Letters* **91** (2003) 073201.
- [4] Götz, J. R., Walter, M., and Briggs, J., *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **36** (2003) L77–L83.
- [5] Götz, J. R., Walter, M., and Briggs, J., *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **38** (2005) 1569–1579.
- [6] Alhaidari, A. D., Heller, E. J., Yamani, H. A., and Abdelmonem, M. S., *The J-matrix Method: Developments and Applications*, Springer, 1 st edition, 2008.
- [7] Broad, J. T. and Reinhardt, W. P., *Journal of Physics B* **9** (1976) 1491.
- [8] Konovalov, D. A. and McCarthy, I. E., *Journal of Physics B* **27** (1994).
- [9] Yamani, H. A. and Fishman, L., *Journal of Mathematical Physics* **16** (1976) 410.
- [10] Heller, E. J. and Yamani, H. A., *Physical Review A* **9** (1974) 1201.
- [11] Konovalov, D. A., *Physical Review A* **052704** (2012) 1.
- [12] Ngoko Djiokap, J. M., Fomouo, E., Kwato Njock, M. G., Urbain, X., and Piraux, B., *Physical Review A* **81** (2010) 042712.
- [13] Knyr, V. A., Nasyrov, V. V., and Popov, Y. V., *AIP Conference Proceedings* **697** (2003).

- [14] Zaytsev, S., Knyr, V., and Popov, Y. V., *Physics of Atomic Nuclei* **70** (2007) 676.
- [15] Silenou Mengoue, M., Njock, M. G. K., Piraux, B., Popov, Y. V., and Zaytsev, S. A., *Physical Review A* **83** (2011) 052708.
- [16] Silenou Mengoue, M., *Physical Review A* **87** (2013) 022701.
- [17] Bray, I., *Computer Physics Communications* **85** (1995) 1.
- [18] Bray, I. and Stelbovics, A. T., *Physical Review A* **46** (1992) 6995.
- [19] McCurdy, C. W., Baertschy, M., and Rescigno, T. N., *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **37** (2004) R137.
- [20] Rescigno, T. N., Baertschy, M., Isaacs, W. A., and McCurdy, C. W., *Science* **286** (1999) 2474.
- [21] Bartlett, P. L. and Stelbovics, A. T., *Physical Review A* **81** (2010) 022716.
- [22] Bartlett, P. L. and Stelbovics, A. T., *Physical Review A* **81** (2010) 022715.
- [23] Bartlett, P. L., *Complete numerical solution of electron-hydrogen collisions*, PhD thesis, Murdoch University, Perth, Western Australia, 2005.
- [24] Pindzola, M. S., Mitnik, D., and Robicheaux, F., *Phys. Rev. A* **59** (1999) 4390.
- [25] Pindzola, M. S. and Robicheaux, F. J., *Physical Review A* **61** (2000) 052707.
- [26] Pindzola, M. S. and Robicheaux, F., *Physical Review A* **57** (1998) 318.
- [27] Pindzola, M. S., Abdel-Naby, S. A., Colgan, J., and Dorn, A., *Journal of Physics B* **45** (2012) 215208.
- [28] Serov, V., Derbov, V., Joulakian, B., and Vinitzky, S., *Physical Review A* **75** (2007) 012715.
- [29] McCurdy, C. W., Horner, D., and Rescigno, T. N., *Physical Review A* **65** (2002) 042714.
- [30] Horner, D., Rescigno, T., and McCurdy, C., *Physical Review A* **65** (2002) 042714.

- [31] Horner, D. A., McCurdy, C. W., and Rescigno, T. N., *Physical Review A* **71** (2005) 012701.
- [32] Horner, D., McCurdy, C., and Rescigno, T., *Physical Review A* **78** (2008) 043416.
- [33] McCurdy, C. W., Baertschy, M., and Rescigno, T. N., *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **37** (2004) R137.
- [34] Frapiccini, A. L., Gonzalez, V. Y., Randazzo, J. M., Colavecchia, F. D., and Gasaneo, G., *International Journal of Quantum Chemistry* **107** (2007) 832.
- [35] Frapiccini, A. L., Randazzo, J. M., Gasaneo, G., and Colavecchia, F. D., *Physical Review A* **82** (2010) 042503.
- [36] Ambrosio, M. J., Del Punta, J. A., Rodriguez, K. V., Gasaneo, G., and Ancarani, L. U., *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **45** (2012) 015201.
- [37] Randazzo, J. M., Frapiccini, A. L., Colavecchia, F. D., and Gasaneo, G., **109** (2009) 125.
- [38] Randazzo, J. M., Ancarani, L. U., Gasaneo, G., Frapiccini, A. L., and Colavecchia, F. D., *Physical Review A* **81** (2010) 042520.
- [39] Mitnik, D. M., Randazzo, J., and Gasaneo, G., *Physical Review A* **78** (2008) 062501.
- [40] Randazzo, J. M., Buezas, F., Frapiccini, A. L., Colavecchia, F. D., and Gasaneo, G., *Physical Review A* **84** (2011) 052715.
- [41] Frapiccini, A. L., Randazzo, J. M., Gasaneo, G., and Colavecchia, F. D., *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **43** (2010) 101001.
- [42] Gasaneo, G., Mitnik, D. M., Randazzo, J. M., Ancarani, L. U., and Colavecchia, F. D., *Physical Review A* **87** (2013) 042707.
- [43] Ambrosio, M. J., Gasaneo, G., and Colavecchia, F. D., *Physical Review A* **89** (2014) 012713.
- [44] Gasaneo, G. et al., *Proceedings of MEST 2012: Exponential Type Orbitals for Molecular Electronic Structure Theory* **67** (2013) 153.

- [45] Dorn, A. et al., Physical Review Letters **86** (2001) 3755.
- [46] Dorn, A. et al., Physical Review Letters **65** (2002) 032709.
- [47] Lahmam-Bennani, A. et al., Physical Review A **59** (1999) 3548.
- [48] Randazzo, J. M., *Métodos ab-initio para el problema de tres cuerpos con interacciones Coulombianas*, PhD thesis, Instituto Balseiro. Universidad Nacional de Cuyo – División de Colisiones Atómicas (CAB), 2009.
- [49] Lützen, J., Archive for History of Exact Sciences **29** (1984) 309.
- [50] Shull, H. and Löwdin, P. O., The Journal of Chemical Physics **30** (1959) 617.
- [51] Holoien, E., Physical Review **104** (1956) 1301.
- [52] Rotenberg, M., Annals of Physics **19** (1962) 262.
- [53] Glöckle, W., Hüfner, and Weidenmuller, H. A., Nuclear Physics A **90** (1967) 481.
- [54] Goscinski, O., Preliminary research report, Uppsala University (1968) 1.
- [55] Avery, J. and Avery, J., *Generalized Strumians and Atomic Spectra*, Word Scientific, Denmark, 2006.
- [56] Bromley, M. W. J. and Mitroy, J., Int. J. Quant. Chem **107** (2007) 1150.
- [57] Rawitscher, G., Physical Review C **25** (1982) 2196.
- [58] Szmytkowski, R., Journal of Physics A **31** (1998) 4936.
- [59] Frapiccini, A. L., Gasaneo, G., Colavecchia, F., and Mitnik, D., Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **161** (2007) 199.
- [60] Mitnik, D. M., Colavecchia, F. D., Gasaneo, G., and Randazzo, J. M., Computer Physics Communications **182** (2011) 1145.
- [61] Bransden, B. H. and Joachain, C. J., *Physics of atoms and molecules*, Englewood Cliffs, NJ, Prentice–Hall, 2003.
- [62] Bethe, H. A. and E., S. E., *Quantum Mechanics - Concepts and Applications*, Wiley and Sons, Chichester, 2001.

- [63] Spherical harmonic – from wolfram mathworld,
<http://mathworld.wolfram.com/SphericalHarmonic.html>.
- [64] Randazzo, J., Frapiccini, A. L., Colavecchia, F., and Gasaneo, G., *Physical Review A* **79** (2009) 022507.
- [65] Fomouou, E., Lagmago Kamta, G., Edah, G., and Piraux, B., *Physical Review A* **74** (2006) 063409.
- [66] Shull, H. and Löwdin, P. O., *J. Chem. Phys.* **30** (1959) 617.
- [67] Rawitscher, G., *Physical Review E* **85** (2012) 026701.
- [68] Bray, I., *Physical Review Letters* **78** (1997) 4721.
- [69] Galindo, A. and Pascual, P., *Mecánica Cuántica*, Ed. Alhambra, Madrid, España, 1978.
- [70] Newton, R. G., *Scattering Theory of Waves and Particles: Second Edition*, Dover Publications, 2002.
- [71] Avery, J., *Hyperspherical Harmonics and Generalized Sturmians*, Kluwer, Dordrecht, the Netherlands, 2000.
- [72] Morse, P. M. and Feshbach, H., *Methods of theoretical physics*, McGraw-Hill, NY, 1953.
- [73] Gauss hypergeometric function ${}_2F_1$ – from wolfram mathworld,
<http://functions.wolfram.com/HypergeometricFunctions/Hypergeometric2F1/>.
- [74] Gómez, A. I., Tesis de licenciatura, *Estudio de Bases Sturmianas en Problemas Atómicos*, 2012.
- [75] Lapack – linear algebra package, <http://www.netlib.org/lapack/>.
- [76] Lopez, X., Ugalde, J., Echevarría, L., and Ludeña, E., *Physical Review A* **74** (2006) 042504.
- [77] Loos, P. F., *Physical Review A* **81** (2010) 032510.
- [78] Luk, F. T. and Qiao, S., *Linear Algebra and its Applications* **316** (2000) 171.

- [79] Frapiccini, A. L., Randazzo, J. M., Colavecchia, F. D., and Gasaneo, G., *Journal of Physics: Conference Series* **388** (2012) 042052.
- [80] Stoer, J. and Bulirsch, R., *Introduction to Numerical Analysis*, Springer Science+Business Media, 1993.
- [81] Johnson, W. R., *Atomic Structure Theory: Lectures on Atomic Physics*, Springer-Verlag, 2007.
- [82] Gasaneo, G. and Ancarani, L. U., *Journal of Physics A* **45** (2012) 045304.
- [83] Gasaneo, G., Ancarani, L. U., and Mitnik, D. M., *The European Physical Journal D* **66** (2012) 91.
- [84] Karlsson, H. O., *J. Chem. Phys.* **109** (1998) 9366.
- [85] Karlsson, H. O., *J. Chem. Phys.* **108** (1998) 3849.
- [86] Gradshteyn, I. S. and Ryzhik, I. M., *Table of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, 1994.
- [87] Exponential integral e – from wolfram mathworld,
<http://mathworld.wolfram.com/En-Function.html>.
- [88] Kheifets, A. S. and Bray, I., *Physical Review A* **69** (2004) 050701.
- [89] Kadyrov, A. S., Mukhamedzhanov, A. M., Stelbovics, A. T., Bray, I., and Pirlepsov, F., *Physical Review A* (2003) 022703.
- [90] Alt, E. O. and Mukhamedzhanov, A. M., *Physical Review A* **47** (1993) 2004.
- [91] Berakdar, J., Lahmam-Bennani, A., and Dal Cappello, C., *Physics Reports* **374** (2003) 91.
- [92] Byron, F. W. and Joachain, C. J., *Physical Review* **146** (1966) 1.
- [93] Bonham, R. A. and Kohl, D. A., *Journal of Chemical Physics* **45** (1966) 2471.
- [94] Ancarani, L. and Dal Cappello, C., *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **161** (2007) 22.

- [95] Le Sech, C., *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **30** (1997) L47.
- [96] Hylleraas, E. A., *Zeitschrift für Physik* **54** (1929) 347.
- [97] Rodriguez, K. V. and Gasaneo, G., *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **38** (2005) L259.
- [98] Cohen-Tannoudji, C., *Quantum mechanics*, volume 2, Wiley, 1977.
- [99] Frapiccini, A. L., *Descripción de la dinámica de electrones en interacción con átomos*, PhD thesis, Instituto Balseiro. Universidad Nacional de Cuyo – División de Colisiones Atómicas (CAB), 2009.
- [100] Goldman, S. P., *Physical Review Letters* **78** (1996) 2325.
- [101] Goldman, S. P., *Physical Review A* **55** (1998) R677.
- [102] Spherical bessel function of the first kind – from wolfram mathworld, <http://mathworld.wolfram.com/SphericalBesselFunctionoftheFirstKind.html>.
- [103] Peterkop, R. K., *Theory of ionization of atoms by electron impact*, Colorado Associated University Press, 1977.
- [104] Peterkop, R. and Rabik, L., *Journal of Physics B* **5** (1972) 1823.
- [105] Kadyrov, A. S., Mukhamedzhanov, A. M., Stelbovics, A. T., and Bray, I., *Physical Review A* **70** (2004) 062703.
- [106] Qtiplot, <http://soft.proindependent.com/qtiplot.html>.
- [107] Peterkop, R., *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **4** (1971) 513.
- [108] Bethe, H. A. and E., S. E., *Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms*, Dover Publications, 2008.
- [109] Klar, H. and Schlecht, W., *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **9** (1976) 1699.
- [110] Wannier, G. H., *Physical Review* **90** (1953) 817.

- [111] Dürr, M. et al., Physical Review Letters **98** (2007) 193201.
- [112] Ren, X., Dorn, A., and Ullrich, J., Physical Review Letters **101** (2008) 093201.
- [113] M Brauner, J. S. B. and Klar, H., Journal of Physics B **22** (1989) 2265.
- [114] Ancarani, L. U., Cappello, C. D., and Gasaneo, G., Journal of Physics: Conference Series **212** (2010) 012025.
- [115] Ancarani, L. and Gasaneo, G., Physical Review A **75** (2007) 032706.
- [116] Palacios, A., McCurdy, C. W., and Rescigno, T. N., Physical Review A **76** (2007) 43420.
- [117] McCurdy, C. W., Horner, D. A., and Rescigno, T. N., Phys. Rev. A **63** (2001) 022711.
- [118] Bartlett, P. L., Stelbovics, A. T., and Bray, I., Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **37** (2004) L69.
- [119] Berakdar, J., Lahmam-Bennani, a., and Dal Cappello, C., Physics Reports **374** (2003) 91.
- [120] Bray, I. et al., Physics Reports **520** (2012) 135.
- [121] Ren, X. et al., Journal of Physics: Conference Series **388** (2012) 042043.
- [122] Kheifets, A. S., Bray, I., Berakdar, J., and Cappello, C. D., Journal of Physics B **35** (2002) L15.
- [123] Berakdar, J. and Klar, H., Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **72** (1994) 4219.
- [124] Del Punta, J., Ambrosio, M. J., Gasaneo, G., Zaytsev, S., and Ancarani, L. U., Journal of Mathematical Physics, aceptado sujeto a modificaciones (2014).
- [125] Wigner 6j-symbol – from wolfram mathworld,
<http://mathworld.wolfram.com/Wigner6j-Symbol.html>.

Publicaciones relacionadas con la presente tesis

Se listan a continuación los artículos que a la finalización de la escritura de esta tesis se encontraban publicados.

- Journal of Physics A, *Mathematical properties of generalized Sturmian functions*, **M. J. Ambrosio**, J. A. Del Punta, K. V. Rodriguez, G. Gasaneo and L. U. Ancarani. Referencia: J. Phys. A: Math. Theor. **45** 015201 (2012).
- Physical Review A, *Insights from the zero-angular-momentum wave in single and double ionization of He by fast electrons*, **M. J. Ambrosio**, G. Gasaneo, F. D. Colavecchia. Referencia: Phys. Rev. A **89**, 012713 (2014).
- Few Body Systems Proceedings. *A Generalized Sturmian Treatment of $(e,3e)$ Processes Described as a Three-Body Coulomb Problem*. **M. J. Ambrosio**, L. U. Ancarani, D. M. Mitnik, F. D. Colavecchia, G. Gasaneo. Referencia : Few-Body Systems, **601**, 831 (2014).

Se debe agregar otro trabajo que ha sido aceptado, pero no publicado aún:

- Proceedings of XXVIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (Lanzhou, China, 2013). *Collision Problems Treated with Generalized Hyperspherical Sturmian Method*. D. M. Mitnik, G. Gasaneo, L. U. Ancarani, **M. J. Ambrosio**.

A lo anterior añadimos otro artículo aceptado, sujeto a modificaciones:

- *Non-homogeneous solutions of a Coulomb Schrödinger equation as basis set for scattering problems*. J. A. Del Punta, **M. J. Ambrosio**, G. Gasaneo, S. A. Zaytsev and L.U. Ancarani. Enviado al Journal of Mathematical Physics el día 11 de febrero de 2014; aceptado el día 3 de marzo sujeto a modificaciones.

Mathematical properties of generalized Sturmian functions

M J Ambrosio¹, J A Del Punta¹, K V Rodriguez¹, G Gasaneo¹
and L U Ancarani²

¹ Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur and Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, 8000 Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina

² Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions, Université Paul Verlaine-Metz, 57078 Metz, France

E-mail: mja1984@gmail.com

Received 18 July 2011, in final form 4 October 2011

Published 1 December 2011

Online at stacks.iop.org/JPhysA/45/015201

Abstract

We study some mathematical properties of generalized Sturmian functions which are solutions of a Schrödinger-like equation supplemented by two boundary conditions. These generalized functions, for any value of the energy, are defined in terms of the magnitude of the potential. One of the boundary conditions is imposed at the origin of the coordinate, where regularity is required. The second point is at large distances. For negative energies, bound-like conditions are imposed. For positive or complex energies, incoming or outgoing boundary conditions are imposed to deal with scattering problems; in this case, since scattering conditions are complex, the Sturmian functions themselves are complex. Since all of the functions solve a Sturm–Liouville problem, they allow us to construct a Sturmian basis set which must be orthogonal and complete: this is the case even when they are complex. Here we study some properties of generalized Sturmian functions associated with the Hulthén potential, in particular, the spatial organization of their nodes, and demonstrate explicitly their orthogonality. We also show that the overlap matrix elements, which are generally required in scattering or bound state calculations, are well defined. Many of these mathematical properties are expressed in terms of uncommon multivariable hypergeometric functions. Finally, applications to the scattering of a particle by a Yukawa and by a Hulthén potential serve as illustrations of the efficiency of the complex Hulthén–Sturmian basis.

PACS numbers: 31.15.-p, 34.10.+x

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

The applications in physics of Sturm–Liouville formulation appeared immediately after the principal theorems were demonstrated by Sturm and Liouville in 1836 and 1837. A large variety

PHYSICAL REVIEW A **89**, 012713 (2014)

Insights from the zero-angular-momentum wave in single and double ionization of He by fast electrons

M. J. Ambrosio,^{1,*} G. Gasaneo,¹ and F. D. Colavecchia²¹*Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur and Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, 8000 Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina*²*División Física Atómica, Molecular y Óptica, Centro Atómico Bariloche and Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, 8400 S. C. de Bariloche, Río Negro, Argentina*

(Received 17 October 2013; published 30 January 2014)

In a recent contribution our group proposed a perturbative approach to deal with the open problem of double ionization of helium by electron impact. The goal of this work is to delve into the physics of the scattering function, and provide evidence of the nature of the single-ionization channels present in the three-body wave function. We show that the fast oscillating parts of the wave function are indeed the single-ionization channels, which appear coupled with the double continuum ones. We found a particular type of basis set within the Generalized Sturmian method that is better suited to isolate single from double-ionization channels.

DOI: [10.1103/PhysRevA.89.012713](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.89.012713)

PACS number(s): 34.80.Bm, 34.50.Fa, 31.15.A-

I. INTRODUCTION

The double ionization of atoms by electron impact, even in the simplest case of helium targets, is still an open problem in atomic physics [1]. Even the most sophisticated *ab initio* theories are unable to describe absolute experimental data without the need for a rescaling. The differences are specially important in the high-energy regime, where experimental absolute fivefold differential cross sections are available; see for example, Lahmam-Bennani *et al.* and Taouil *et al.* [2,3].

In the past two decades computer performance has seen great progress, which enabled physicists to develop more and more sophisticated numerical approaches to solve problems with a greater degree of accuracy. Examples of these methods are the time-independent methods, such as the exterior complex scaling (ECS) [4], the convergent close coupling (CCC) [5,6], and J matrix [7–9], among others.

Part of the complexity of three-body Coulomb problems lies in the fact that asymptotic conditions are difficult to include in the models, and each method approaches this problem in a different way.

The ECS methodology takes advantage of a rotation of the radial coordinates to the complex plane. This allows us to include the correct asymptotic behavior without enforcing it formally.

The CCC scheme distinguishes each of the ejected electrons. One electron is represented in terms of basis states obtained from an \mathcal{L}^2 diagonalization of the target Hamiltonian, which includes pseudostates for the continuum part of the spectrum. The other one is described by continuum Coulomb wave functions. The three-body wave function is not computed explicitly, but the T -matrix elements are obtained instead. Three-body outgoing behavior is set by using the Green operator in a simplified Lippmann-Schwinger equation for the T matrix. Thus, the asymptotic behavior is explicitly enforced in this methodology.

The J -matrix model takes a similar path to CCC [8–10]. Outgoing-type behavior is explicitly enforced for one of the

electrons, while standing waves are selected for the other one. The method separates the three-body wave function solution in the internal and the external part. The internal wave function is expanded in terms of three-body Hamiltonian eigenfunctions obtained through a \mathcal{L}^2 diagonalization. The external one is represented in terms of Coulomb Sturmian functions with outgoing asymptotic behavior. The coefficients of these expansions are obtained by solving a linear system of equations. Thus, the explicit form of the asymptotic conditions is used.

Time-dependent models, such as the time-dependent close coupling [11,12], the time-dependent exterior complex scaling (TDECS) [13] or a wave-packet evolution [14], use completely different types of asymptotic conditions and avoid the difficulties of the time-independent methods.

One of the aims of this contribution is to show that the generalized Sturmian functions (GSFs) theory impose the desired asymptotic behavior, for any (single or double) ionization channel. This is done by imposing outgoing behavior on each of the radial coordinates of two sets of spherical coordinates, one for each ejected electron. Within the GSF method, outgoing asymptotic conditions are explicitly enforced on each coordinate, which in turn enforces the correct three-body behavior.

Let us now recall the history of the GSF method. The group began implementing GSF with the work of Frapiccini *et al.* [15], where the main aspects of the methodology were introduced. References [16,17] contain a good summary on the mathematical properties of Sturmian basis sets.

The group has also presented some applications to two- [16,18] and three-body bound-state problems [17,19,20]. Sturmian functions for bound states have been shown to be very efficient, and one can obtain highly accurate free [17,19,20] and confined [21] helium eigenvalues among many other systems [22].

Continuum GSFs have also been implemented to solve three-body scattering problems in Refs. [23,24]. In all these examples, the GSF method has proven to be efficient and accurate. For a complete review see Ref. [22].

The aim of the present contribution is to analyze the information contained in the wave function of an S -wave

*Corresponding author: marcelo.ambrosio@uns.edu.ar

Few-Body Syst
DOI 10.1007/s00601-014-0831-5

M. J. Ambrosio · L. U. Ancarani · D. M. Mitnik
F. D. Colavecchia · G. Gasaneo

A Generalized Sturmian Treatment of $(e, 3e)$ Processes Described as a Three-Body Coulomb Problem

Received: 1 November 2013 / Accepted: 15 January 2014
© Springer-Verlag Wien 2014

Abstract The double ionization of helium by high energy electron impact is investigated. The pure four-body Coulomb problem may be reduced to a three-body one in accordance with the use of the first Born approximation. Even within this frame, major unexplained discrepancies subsist between several theoretical descriptions, and with available absolute experimental data. In this contribution we discuss an alternative formulation which allows to tackle the problem with a different methodology, the generalized Sturmian approach. We discuss some issues associated to the convergence of the calculated cross sections.

1 Introduction

It has been stated that the three-body Coulomb problem has been solved numerically, the proof being given through calculations of the single ionization $[(e, 2e)$ process] of hydrogen by electron impact [1]. Several numerical recipes like the Convergent-Close-Coupling [2], the Exterior-Complex-Scaling [3], the J-matrix [4], among others, managed with great success to numerically approach the solution of the problem. A similar success is also obtained when the same methods are applied to the double ionization of helium by photon impact $[(\gamma, 2e)$ process]. Except in some minor details, it can be said that these methods agree remarkably well with each other, and with the experimental observations.

However, for the double ionization of helium by impact of high energy electrons, the $(e, 3e)$ process, the same is not observed. When dealing with high energy projectiles the four-body problem corresponding to the $(e, 3e)$ process can be reduced to a three-body one. This reduction can be related to the First Born Approximation, within which no method is able to satisfactorily reproduce the absolute experimental data of the Orsay group [5,6]. In addition, those numerical methods—which are in such beautiful agreement for $(e, 2e)$ and $(\gamma, 2e)$ processes—do not agree with each other when applied to the $(e, 3e)$ case [7]. In some sense, this brings some doubts on whether the three-body problem can be considered as solved in all cases.

L. U. Ancarani (✉)
Equipe TMS, UMR CNRS 7565, Université de Lorraine, 57078 Metz, France
E-mail: ancarani@univ-metz.fr

G. Gasaneo · M. J. Ambrosio
Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, 8000 Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina

D. M. Mitnik
Departamento de Física, FCEyN, Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE), C1428EGA,
Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

F. D. Colavecchia
División Colisiones Atómicas, Centro Atómico Bariloche, CONICET, Bariloche, Río Negro, Argentina

Published online: 12 February 2014