

Tesis de Posgrado

Captura electrónica en colisiones atómicas a energías altas e intermedias

Gravielle, María Silvia

1991

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

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

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

Cita tipo APA:

Gravielle, María Silvia. (1991). Captura electrónica en colisiones atómicas a energías altas e intermedias. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2460_Gravielle.pdf

Cita tipo Chicago:

Gravielle, María Silvia. "Captura electrónica en colisiones atómicas a energías altas e intermedias". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1991. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2460_Gravielle.pdf

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Tema de Tesis

**CAPTURA ELECTRONICA EN COLISIONES ATOMICAS
A ENERGIAS ALTAS E INTERMEDIAS**

Autor

María Silvia Gravielle

Director de Tesis

Dr. Jorge Esteban Miraglia

Lugar de trabajo
Grupo de Colisiones Atómicas.
Instituto de Astronomía y Física del Espacio.
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas.
Casilla de correo 67, Sucursal 28, 1428, Buenos Aires, Argentina.

Tesis presentada para optar al título de Doctor en Ciencias Físicas.
Diciembre 1991

Tesis.
2460
ej. 2.

Agradezco

al Dr. Jorge E. Miraglia, por el constante apoyo y estímulo brindado durante la dirección de esta tesis;

a mis compañeros del grupo de Colisiones Atómicas del Instituto de Astronomía y Física del Espacio, al Dr. Carlos Reinhold, al Dr. Vladimir Rodríguez, al Dr. Carlos Falcón, a la Dra. Liliana Opradolce, a la Dra. Susana Blanco, al Dr. Ignacio Casaubón, al Dr. Alejandro González, y en especial, al Dr. Manfred Pacher por su invaluable ayuda en la tarea computacional involucrada en esta tesis;

a los restantes miembros del Instituto de Astronomía y Física del Espacio, investigadores, técnicos, personal de apoyo, y becarios;

al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, y a la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, por el financiamiento de este trabajo.

INDICE

RESUMEN	iv
ABREVIATURAS	vii
INTRODUCCION	1
1 FUNDAMENTOS TEORICOS	5
1.1 Formulación del problema	5
1.2 Teoría formal de colisiones	6
1.3 Métodos aproximados	9
1.3.1 Series perturbativas	9
1.3.2 Principios variacionales	10
1.3.3 Métodos de onda distorsionada	12
1.4 La función de onda impulsiva y funciones relacionadas	14
1.5 El potencial coulombiano	16
2 MODELO UNIDIMENSIONAL DE COLISION	19
2.1 Cinemática y notación	21
2.2 Solución exacta	22
2.3 Métodos teóricos	23
2.3.1 Primera aproximación de Born	23
2.3.2 Segundas aproximaciones de Born	23

	<i>Indice</i>	ii
2.3.3 Principio variacional de Schwinger	25	
2.3.4 Métodos de onda distorsionada	25	
2.4 Resultados	26	
2.4.1 Caso simétrico	27	
2.4.2 Caso asimétrico	28	
2.5 Conclusiones	30	
3 SIMPLE CAPTURA ELECTRONICA	31	
3.1 Aproximación eikonal impulsiva	33	
3.2 El uso de la versión <i>prior</i>	37	
3.3 Resultados	38	
3.3.1 Captura asimétrica	39	
3.3.2 Captura levemente asimétrica	40	
3.3.3 Captura simétrica	42	
3.4 Conclusiones	44	
4 PROPAGADORES EN PROCESOS DE SIMPLE CAPTURA	45	
4.1 Propagador	46	
4.2 Series perturbativas de Born	47	
4.2.1 Primer orden	47	
4.2.2 Segundo orden con el operador de Green libre	47	
4.2.3 Segundo orden con el operador de Green del blanco	49	
4.3 Aproximaciones de onda distorsionada	51	

	<i>Indice</i>	iii
4.3.1 Aproximación impulsiva		51
4.3.2 Aproximación impulsiva generalizada		51
4.3.3 Aproximación eikonal impulsiva		52
4.4 Conclusiones		54
5 DOBLE CAPTURA ELECTRONICA		55
5.1 Teoría		57
5.2 La aproximación impulsiva		61
5.3 Secciones eficaces totales		66
5.3.1 Colisión simétrica resonante		66
5.3.2 Colisión simétrica no resonante		70
5.3.3 Colisiones asimétricas		71
5.4 Secciones eficaces diferenciales		71
5.5 Conclusiones		72
APENDICE A		73
APENDICE B		74
APENDICE C		75
REFERENCIAS		77
DESCRIPCION DE LAS FIGURAS		84
DESCRIPCION DE LA TABLA		90
TABLA		91
FIGURAS		92

RESUMEN

Se consideran en esta tesis los procesos de simple y doble captura electrónica, en colisiones atómicas a energías altas e intermedias.

En lo que respecta a la simple captura, la idea es encontrar un método teórico apropiado para describir las colisiones asimétricas, cuando la carga de uno de los núcleos es mucho mayor que la del otro. Para ello se examina un modelo unidimensional de colisión con tres pseudo-partículas, que simulan un núcleo proyectil, un núcleo blanco, y un electrón activo. En este modelo se analiza la probabilidad de captura en función de la velocidad del proyectil y de la fuerza del núcleo blanco.

Se evalúan diez aproximaciones teóricas: cuatro aproximaciones de Born de segundo orden basadas en diferentes funciones de Green, una expresión fraccional de Schwinger, y cinco métodos de onda distorsionada; y se comparan los resultados con los valores exactos. Para sistemas simétricos, la aproximación de onda distorsionada del continuo provee buenos resultados, mientras que para los casos asimétricos la aproximación impulsiva semigeneralizada presenta el mejor comportamiento cuando la fuerza del núcleo blanco aumenta.

Como una consecuencia del análisis de los métodos teóricos en el modelo unidimensional, se elige la aproximación eikonal impulsiva para calcular los procesos de simple captura electrónica en colisiones de protones sobre diferentes blancos. Se presentan secciones eficaces totales para una gran variedad de sistemas, que van desde el sistema asimétrico $p\text{-Ar}$ hasta el sistema simétrico $p\text{-H}$. Se evalúan también parámetros relacionados con la matriz densidad para las colisiones $p\text{-H}$ y $p\text{-He}$, y se comparan

los resultados con los experimentos y con otros valores teóricos. Se concluye que la aproximación eikonal impulsiva puede ser usada con confianza para tratar colisiones asimétricas en los regímenes de energías intermedias y altas, y colisiones simétricas a altas energías de impacto.

Se investigan también, en distintas aproximaciones aplicadas a procesos de simple captura, las contribuciones de las transformadas de Fourier de las correspondientes funciones de Green (llamadas *propagadores*), considerando en especial los términos *off-shell* y su continuidad alrededor del límite *on-shell*; y se encuentra que la aproximación eikonal impulsiva presenta una contribución lineal *off-shell*.

Para estudiar la doble captura electrónica por impacto de proyectiles pesados sobre átomos similares al helio, se presenta en esta tesis un modelo de dos electrones que considera el proceso como una colisión en dos pasos. En el marco del formalismo de onda distorsionada, este modelo de colisión está relacionado al segundo orden con un operador de Green que representa un electrón en cada centro, y después de ciertas aproximaciones adicionales conduce al modelo de electrón independiente. Se usa, en particular, la aproximación impulsiva para evaluar las matrices de transición de simple captura involucradas, y la repulsión electrónica se incluye como una perturbación dinámica en primer orden.

Se calcula con este modelo la transición $1s^2 \rightarrow 1s^2$ en la colisión $\text{He}^{++} - \text{He}$, utilizando una función de onda de interacción de configuraciones para describir el estado fundamental del helio. Las diferencias entre estos resultados y los obtenidos utilizando una función de onda de Hartree-Fock para representar el estado fundamental son despreciables, por lo cual, la captura a estados simplemente excitados para el mismo sistema se evalúa empleando funciones de onda de Hartree-Fock y variacionales. También

se estudia la doble captura electrónica en colisiones de iones múltiplemente cargados sobre helio, y se evalúan secciones eficaces diferenciales para el sistema $\text{He}^{++} - \text{He}$, siendo los resultados comparados con los datos experimentales disponibles. La teoría produce en todos los casos un muy buen acuerdo con los experimentos.

ABREVIATURAS

amu: Unidad de masa atómica (*Atomic mass unit*).

au: Unidades atómicas (*Atomic units*).

B1B: Primera aproximación de Born con condiciones de contorno (*First Born approximation with boundary conditions*).

B2Gk: Aproximación de Born de segundo orden con el operador de Green libre ($k=0$), el operador de Green del blanco ($k=T$), el operador de Green del proyectil ($k=P$), y el operador de Green de Faddeev ($k=F$) (*Second Born approximation*).

CDW: Aproximación de onda del continuo distorsionada (*Continuum-Distorted-Wave*).

DSPB: Aproximación de Born para Potenciales Fuertes Distorsionada (*Distorted Strong Potential Born*).

EI: Aproximación eikonal impulsiva (*Eikonal Impulse approximation*).

FGF: Forma fraccional de Schwinger asociada al segundo orden con el operador de Green de Faddeev.

GIA: Aproximación impulsiva generalizada (*Generalised impulse approximation*).

IA: Aproximación impulsiva (*Impulse approximation*).

IEM: Modelo de electrones independientes (*Independent Electron Model*).

PCI: Modelo de interacción post colisional (*Post Collision Interaction model*).

SPB: Aproximación de Born para Potenciales Fuertes (*Strong Potential Born*).

INTRODUCCION

En esta tesis estudiamos los procesos de reordenamiento o captura electrónica en colisiones de iones sobre átomos, por los cuales uno o más electrones que inicialmente se hallan ligados al átomo blanco, son transferidos al ión incidente como consecuencia de la colisión. El rango de energías analizado corresponde a las energías intermedias y altas, y está caracterizado por una velocidad de impacto del proyectil del orden o mayor que algún parámetro asociado a la velocidad orbital de los electrones capturados, antes o después de la colisión. En particular, tratamos los procesos de captura simple, en los que un único electrón es capturado, y los procesos de captura doble, en los que dos electrones son transferidos del blanco al proyectil. La teoría formal correspondiente a las colisiones con reordenamiento se sintetiza en el capítulo 1, junto con las principales aproximaciones que utilizamos a lo largo de esta tesis.

Los problemas de colisión que involucran procesos de simple captura electrónica en el rango de energías altas e intermedias se resuelven empleando diferentes aproximaciones, las cuales se basan fundamentalmente en tres grandes líneas: teoría de perturbaciones, principios variacionales y métodos de onda distorsionada. Nuestro objetivo es encontrar un método teórico apropiado para describir la simple captura electrónica en colisiones asimétricas (cuando la carga de uno de los núcleos es mucho mayor que la del otro). Este tipo de procesos son los estudiados en los aceleradores de iones pesados, tales como el acelerador TANDAR (Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina), por lo que su investigación es de particular importancia para la comprensión de los datos experimentales.

Para satisfacer este objetivo, en el capítulo 2 desarrollamos un *banco de prueba* consistente en un modelo unidimensional de tres partículas con interacciones tipo pozo cuadrado. El proyecto se realizó en colaboración con el Centro Atómico Bariloche, en donde se efectuaron los cálculos exactos (el *experimento*) con la técnica de diferencia finita. En este modelo simple, evaluamos distintos métodos teóricos: aproximaciones de Born de segundo orden, principios variacionales de Schwinger asociados con las series perturbativas, y métodos de onda distorsionada relacionados con la aproximación impulsiva. La comparación de los resultados con los datos exactos nos permitió descartar una serie de teorías cuyo comportamiento no fue satisfactorio.

Utilizando la experiencia capitalizada en el modelo lineal, en un trabajo previo (Ref. 1) aplicamos los mejores métodos, aquellos relacionados a la aproximación impulsiva, al cálculo de procesos de captura de capa interna por protones, considerando transiciones entre niveles fundamentales. De la comparación con los experimentos concluimos que la aproximación eikonal impulsiva (EI) es un buen método para tratar las colisiones asimétricas en el rango de energías intermedias y altas. Esta aproximación es una teoría de onda distorsionada basada en el uso de la función de onda impulsiva **exacta** en un canal y la función de onda eikonal en el otro. Ambas funciones tienen el correcto comportamiento asintótico y la apropiada normalización. En el capítulo 3 introducimos la aproximación EI, y la utilizamos para tratar procesos de captura al nivel fundamental, y a los niveles excitados $2s$, $2p_0$, $2p_1$ y $3s$, en colisiones de protones sobre átomos. Consideramos los sistemas asimétricos (p -Ar, p -Ne y p -C), y los sistemas cuasisimétrico (p -He) y simétrico (p -H), para los cuales hay una cantidad apreciable de datos experimentales. Evaluamos también magnitudes derivadas de la matriz densidad para el nivel $n = 2$, tales como el parámetro de alineamiento, y las componentes z del momento dipolar y de la velocidad del perihelio. La aproximación EI contiene además los procesos de doble dispersión, dando por lo tanto el correcto límite de altas

velocidades, e incluyendo la contribución del pico de Thomas en las secciones eficaces diferenciales, las que calculamos para la colisión p-II.

En el capítulo 4 analizamos la contribución de la transformada de Fourier de la función de Green (llamada *propagador*) en distintas aproximaciones, aplicadas a procesos de simple captura. Prestamos particular atención al papel desempeñado por los factores *off-shell* y su continuidad alrededor del límite *on-shell*. Encontramos que las aproximaciones relacionadas a la aproximación impulsiva que se estudian, cuando ambos canales satisfacen las correctas condiciones asintóticas, presentan factores *off-shell* similares a los de la aproximación de Born para Potenciales Fuertes Distorsionada (*Distorted Strong Potential Born*).

Cuando el sistema colisionante consta de más de un electrón, una forma de resolver el problema consiste en el uso del modelo de electrón independiente, el cual se basa en la suposición de que los electrones evolucionan independientemente uno de otro. Este modelo se emplea generalmente con éxito para tratar procesos simples, en los que sólo un electrón es excitado, capturado o ionizado, y se utiliza en la primera parte de esta tesis para estudiar la simple captura electrónica.

La dificultad surge cuando ocurren fenómenos dobles, en los que dos electrones están involucrados en la transición, como lo es el proceso de doble captura electrónica. En estos casos, el modelo de electrón independiente no es una alternativa confiable, y debemos trabajar con un modelo de dos electrones activos. La doble captura es un tema de gran interés, dado que el futuro es promisorio en lo que respecta a la espectroscopía Auger, de gran utilidad para investigar colisiones de iones sobre superficies, como así también en lo que concierne al estudio de la correlación electrónica durante la colisión (llamada correlación dinámica).

En el capítulo 5 estudiamos la doble captura con un modelo de dos electrones, basado en el segundo orden del formalismo de onda distorsionada. Este segundo orden

es evaluado usando una función de Green que representa un electrón en cada centro, lo que permite describir la colisión como dos procesos consecutivos de simple captura, involucrando cada uno de ellos ambos electrones, e incluyendo la repulsión electrónica como una perturbación dinámica en primer orden. Agregando ciertas aproximaciones adicionales, nuestro modelo tiende al modelo de electrón independiente.

Aplicamos este modelo a la colisión $\text{He}^{++} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{He}(1s^2) + \text{He}^{++}$, utilizando una función de onda de interacción de configuraciones (la cual contiene la correlación electrónica) para describir el estado fundamental del He. Las diferencias con los resultados obtenidos empleando un producto no correlacionado de funciones de Hartree-Fock para el estado fundamental son despreciables; por lo tanto, usamos funciones de onda electrónicas de Hartree-Fock y variacionales para calcular, para el mismo sistema, la doble captura a estados simple excitados y secciones eficaces diferenciales. Evaluamos también los procesos de doble captura en colisiones de iones multicargados sobre helio.

CAPITULO 1

FUNDAMENTOS TEORICOS

En este capítulo presentamos los conceptos básicos empleados para describir los procesos de captura electrónica en colisiones ión-átomo a energías altas e intermedias.

La formulación del problema que se estudia se expone en la sección 1.1. En la sección 1.2 se resumen los principales resultados de la teoría formal de colisiones, y en la sección 1.3 se describen en forma breve los métodos teóricos considerados². En particular, ponemos especial atención en las teorías de onda distorsionada que involucran la función de onda impulsiva y funciones de onda relacionadas, las cuales son analizadas en la sección 1.4.

Tanto la teoría formal como los métodos aproximados contenidos en las secciones anteriores corresponden a sistemas con potenciales de corto alcance, por lo que, en la sección 1.5 se muestra su extensión a problemas con interacciones coulombianas, las cuales son de largo alcance, y se presenta además el tratamiento eikonal del potencial internuclear³. Salvo donde se aclare explícitamente, se utilizará a lo largo de toda la tesis el sistema de unidades atómicas (ver apéndice A).

1.1 Formulación del problema

Consideramos en esta tesis la colisión de un núcleo proyectil P (de masa M_P y carga Z_P) con un blanco compuesto por un núcleo blanco T (de masa M_T y carga Z_T) y uno o dos electrones ligados inicialmente a él. Analizamos el proceso de captura

electrónica por el cual, como resultado de la colisión, uno (captura simple) o ambos electrones (captura doble) quedan en un estado ligado al proyectil.

El rango de velocidades de impacto estudiado corresponde al dominio de las energías altas ($v \gg v_e$) e intermedias ($v \sim v_e$), donde v es la velocidad relativa de los núcleos, y v_e es la velocidad orbital del electrón en el estado ligado inicial o final.

1.2 Teoría formal de colisiones

Antes y después de la colisión las partículas se agrupan formando agregados, y a estos agrupamientos se los denomina canal de entrada o inicial (i), y canal de salida o final (f). A cada canal α , siendo $\alpha = i, f$, le corresponde una dada fragmentación del Hamiltoniano H del sistema, considerado en el centro de masa:

$$H = H_\alpha + V_\alpha, \quad \alpha = i, f, \quad (1.1)$$

donde V_α es el potencial de interacción entre los agregados en el canal α , y H_α es denominado Hamiltoniano no perturbado asociado con dicho canal.

En el formalismo independiente del tiempo, el estado del sistema es descrito por un estado de colisión con condiciones de contorno saliente o entrante $|\Psi_\alpha^\pm\rangle$, el cual es autoestado de H :

$$H |\Psi_\alpha^\pm\rangle = E |\Psi_\alpha^\pm\rangle, \quad \alpha = i, f, \quad (1.2)$$

y se aproxima al estado no perturbado $|\Phi_\alpha\rangle$ cuando los agregados en el canal α están alejados entre si, siendo $|\Phi_\alpha\rangle$ autoestado de H_α con la misma autoenergía E (denominada energía total):

$$H_\alpha |\Phi_\alpha\rangle = E |\Phi_\alpha\rangle, \quad \alpha = i, f. \quad (1.3)$$

El estado de colisión $|\Psi_\alpha^\pm\rangle$ satisface la ecuación de Lippmann-Schwinger:

$$|\Psi_\alpha^\pm\rangle = |\Phi_\alpha\rangle + G^\pm(E)V_\alpha |\Phi_\alpha\rangle, \quad \alpha = i, f, \quad (1.4)$$

o bien la expresión equivalente:

$$|\Psi_\alpha^\pm\rangle = |\Phi_\alpha\rangle + G_\alpha^\pm(E)V_\alpha |\Psi_\alpha^\pm\rangle, \quad \alpha = i, f, \quad (1.5)$$

siendo $G^\pm(E)$ el operador de Green total:

$$G^\pm(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H \pm i\epsilon}, \quad (1.6)$$

y $G_\alpha^\pm(E)$ el operador de Green asociado al canal α :

$$G_\alpha^\pm(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_\alpha \pm i\epsilon}, \quad \alpha = i, f. \quad (1.7)$$

Para resolver el problema de colisión, la magnitud que se evalúa es la matriz de transición, definida como:

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \langle \Phi_f | V_f^\dagger | \Psi_i^+ \rangle && \text{post} \\ &= \langle \Psi_f^- | V_i | \Phi_i \rangle && \text{prior}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Las versiones *post* y *prior* son iguales si se usan estados de colisión $|\Psi_i^+\rangle$ y $|\Psi_f^-\rangle$ exactos, pero difieren generalmente entre sí cuando se emplean aproximaciones de dichos estados.

La sección eficaz diferencial se obtiene a partir de la matriz de transición como:

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\Omega} = (2\pi)^4 \nu_i \nu_f \frac{K_f}{K_i} |T_{fi}|^2, \quad (1.9)$$

donde \vec{K}_i y \vec{K}_f son los momentos asociados al movimiento relativo de los agregados en los canales inicial y final, respectivamente, y ν_i, ν_f son las correspondientes masas reducidas. Estos momentos satisfacen la conservación de la energía total:

$$E = \frac{K_i^2}{2\nu_i} + \epsilon_i = \frac{K_f^2}{2\nu_f} + \epsilon_f, \quad (1.10)$$

donde ϵ_i (ϵ_f) es la energía del estado electrónico ligado inicial (final). El ángulo sólido $\Omega = (\varphi, \theta)$ está determinado por \vec{K}_i y \vec{K}_f , siendo θ el ángulo formado entre ambos

momentos, y φ el ángulo azimutal. La sección eficaz total se obtiene integrando sobre todos los ángulos de dispersión:

$$\sigma_{fi} = \int d\Omega \frac{d\sigma_{fi}}{d\Omega} , \quad (1.11)$$

donde:

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi , \quad \varphi \in [0, 2\pi] , \quad \theta \in [0, \pi] . \quad (1.12)$$

Dado que en la mayoría de los experimentos el estado de colisión no es un estado puro sino una mezcla estadística de estados, se introduce el concepto de matriz densidad⁴, asociada a la transición desde un dado estado inicial i hasta el nivel n_f , como:

$$\rho_{n_f l_f m_f, n_f l'_f m'_f} = (2\pi)^4 \nu_i \nu_f \frac{K_f}{K_i} \int d\Omega T_{n_f l_f m_f, i} T_{n_f l'_f m'_f, i}^* , \quad (1.13)$$

donde $T_{nlm, i}$ es la matriz de transición correspondiente a la captura desde el estado inicial i hasta el estado final caracterizado por los números cuánticos nlm . Los elementos diagonales de la matriz densidad coinciden con las secciones eficaces totales.

En las colisiones ión-átomo las masas de los núcleos proyectil y blanco, M_P y M_T , respectivamente, son mucho mayores que la masa del electrón (en unidades atómicas $m_e = 1$, y la masa del protón es $1836m_e$). Por consiguiente, se puede suponer que las contribuciones importantes a la sección eficaz total provienen de ángulos de dispersión θ pequeños, y es posible considerar la velocidad relativa \vec{v} entre los agregados prácticamente constante:

$$\vec{v} = \frac{\vec{K}_i}{\nu_i} \simeq \frac{\vec{K}_f}{\nu_f} . \quad (1.14)$$

Esta aproximación se denomina límite de grandes masas, y será utilizada en todos los resultados de esta tesis.

1.3 Métodos aproximados

La ecuación de Lippmann-Schwinger (1.4) representa sólo una solución formal del problema pues implica conocer una base completa de autoestados de H , lo que en general no es posible. Existe una gran variedad de métodos aproximados que se emplean para calcular la matriz de transición, estando basados fundamentalmente en tres grandes líneas: series perturbativas, principios variacionales, y métodos de onda distorsionada. Siguiendo con esta clasificación, describimos brevemente en esta sección las aproximaciones que se utilizarán en los siguientes capítulos ².

1.3.1 Series perturbativas

Estos métodos, denominados también series de Born, se basan en la construcción de una serie perturbativa para el estado de colisión, y por lo tanto, para la matriz de transición, partiendo de la ecuación de Lippmann-Schwinger (1.4), y expandiendo el operador de Green total en potencias de un operador de Green aproximado².

El término de primer orden, común a las distintas series de Born, se obtiene reemplazando en la matriz de transición el estado de colisión dado por la ecuación (1.4) por el correspondiente estado no perturbado, y se conoce como primera aproximación de Born:

$$T_{fi}^{B1} = \langle \Phi_f | V_f^\dagger | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_f | V_i | \Phi_i \rangle . \quad (1.15)$$

La aproximación de Born de segundo orden resulta de reemplazar en la ecuación (1.4) el operador $G^\pm(E)$ por el operador aproximado $G^\pm(E)$, con lo cual la matriz de transición se expresa como:

$$T_{fi}^{B2G} = T_{fi}^{B1} + \langle \Phi_f | V_f^\dagger G^+(E) V_i | \Phi_i \rangle . \quad (1.16)$$

En particular, se consideran cuatro series de Born distintas, determinadas por los siguientes operadores $G^\pm(E)$:

i) el operador de Green libre, G_0^\pm , definido como:

$$G_0^\pm(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} , \quad (1.17)$$

donde H_0 es el operador de energía cinética del sistema;

ii) los operadores de Green inicial y final, G_i^\pm y G_f^\pm , respectivamente, definidos en la ecuación (1.7); y

iii) el operador de Green de Faddeev⁵, G_F^\pm , el cual se expresa en términos de los anteriores operadores de Green como:

$$G_F^\pm(E) = G_i^\pm(E) + G_f^\pm(E) - G_0^\pm(E) . \quad (1.18)$$

1.3.2 Principios variacionales

El principio variacional de Schwinger permite construir una funcional para la matriz de transición, asociada a la expansión de orden m correspondiente a una dada serie perturbativa^{6,7}, como:

$$J_{fi}^{(m)} = \langle \Phi_f | A^{(m)} | \xi_i^+ \rangle + \langle \xi_f^- | B^{(m)} | \Phi_i \rangle + \langle \xi_f^- | C^{(m)} | \xi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f | D^{(m)} | \Phi_i \rangle , \quad (1.19)$$

donde ξ_i^+ y ξ_f^- son las funciones de onda de prueba, y $A^{(m)}$, $B^{(m)}$, $C^{(m)}$, y $D^{(m)}$ son operadores determinados completamente por medio de las siguientes condiciones, que deben ser satisfechas por la funcional:

i) Si las funciones de prueba coinciden con los estados de colisión exactos, esto es, si

$\xi_i^+ = \Psi_i^+$ y $\xi_f^- = \Psi_f^-$, la funcional debe coincidir con la matriz de transición :

$$J_{fi}^{(m)} = T_{fi} . \quad (1.20)$$

ii) Si $\xi_i^+ = \Psi_i^+ + \delta\Psi_i^+$ y $\xi_f^- = \Psi_f^-$, la funcional debe ser estacionaria:

$$\frac{\delta J_{fi}^{(m)}}{\delta \Psi_i^+} = 0 . \quad (1.21)$$

iii) De manera análoga, si $\xi_i^+ = \Psi_i^+$ y $\xi_f^- = \Psi_f^- + \delta\Psi_f^-$, la funcional debe ser nuevamente estacionaria:

$$\frac{\delta J_{fi}^{(m)}}{\delta \Psi_f^-} = 0 . \quad (1.22)$$

iv) Si las funciones de prueba coinciden con las funciones de onda no perturbadas, esto es, si $\xi_i^+ = \Phi_i$ y $\xi_f^- = \Phi_f$, la funcional debe coincidir con la aproximación de orden m de la matriz de transición en la serie perturbativa considerada ($T_{fi}^{(m)}$):

$$J_{fi}^{(m)} = T_{fi}^{(m)} . \quad (1.23)$$

Es posible obtener a partir de esta funcional una forma fraccional, redefiniendo las funciones de prueba como:

$$\xi_i^+ = a \xi_i'^+ , \quad \xi_f^- = b \xi_f'^- , \quad (1.24)$$

y optimizando luego los parámetros a y b introducidos. La funcional fraccional se expresa entonces como:

$$J_{fi}^{F(m)} = \langle \Phi_f | D^{(m)} | \Phi_i \rangle - \frac{\langle \Phi_f | A^{(m)} | \xi_i'^+ \rangle \langle \xi_f'^- | B^{(m)} | \Phi_i \rangle}{\langle \xi_f'^- | C^{(m)} | \xi_i'^+ \rangle} . \quad (1.25)$$

Se analizan, en particular, las funcionales fraccionales asociadas al segundo orden de las series de Born descritas en la sección 1.3.1. Es posible probar que no existen las formas fraccionales de segundo orden correspondientes a las series de Born con G_0^+ , G_i^+ , y G_f^+ , y por consiguiente, sólo se define la funcional asociada al segundo orden de la serie de Born con el operador de Green de Faddeev⁷ :

$$J_{fi}^{F(m=2)} = \frac{\langle \Phi_f | V_f^\dagger | \xi_i'^+ \rangle \langle \xi_f'^- | V_i | \Phi_i \rangle}{\langle \xi_f'^- | [1 - V_f^\dagger G_F^+(E)] V_i | \xi_i'^+ \rangle} . \quad (1.26)$$

Reemplazando en esta expresión las funciones de prueba por las funciones de onda no perturbadas, Φ_i y Φ_f , se obtiene una aproximación variacional de la matriz de transición, la cual se puede expresar en función de los distintos términos de la correspondiente serie de Born:

$$T_{fi}^{FGF} = \frac{\left(T_{fi}^{B1}\right)^2}{2 T_{fi}^{B1} - T_{fi}^{B2GF}} . \quad (1.27)$$

1.3.3 Métodos de onda distorsionada

La idea de la formulación de onda distorsionada es construir un serie perturbativa cuyo primer orden tenga en cuenta en forma exacta la mayor parte del Hamiltoniano, de manera tal que la interacción residual sea pequeña, permitiendo una rápida convergencia de la serie^{2,8}. Para ello, se descompone H como:

$$H = H'_\alpha + W_\alpha , \quad \alpha = i, f , \quad (1.28)$$

con:

$$H'_\alpha = H_\alpha + U_\alpha , \quad (1.29)$$

$$W_\alpha = V_\alpha - U_\alpha , \quad \alpha = i, f ,$$

donde el potencial U_α es elegido de tal forma que se conocen exactamente los estados de colisión correspondientes al Hamiltoniano H'_α , y la perturbación W_α resultante es pequeña. El estado distorsionado $|\chi_\alpha^\pm\rangle$ se define como el autoestado de H'_α con autoenergía igual a la energía total E :

$$H'_\alpha |\chi_\alpha^\pm\rangle = E |\chi_\alpha^\pm\rangle , \quad \alpha = i, f , \quad (1.30)$$

que satisface la condición de contorno saliente o entrante, aproximándose al estado no perturbado $|\Phi_\alpha\rangle$ cuando los agregados en el canal α están alejados entre si.

La matriz de transición se puede expresar en forma exacta en función de los estados distorsionados inicial o final como:

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \langle \chi_f^- | W_f^\dagger | \Psi_i^+ \rangle && \textit{post} \\ &= \langle \Psi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle && \textit{prior} , \end{aligned} \quad (1.31)$$

donde se ha supuesto la anulación de los llamados términos de superficie, dada por:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \langle \chi_f^- | \Phi_i \rangle = 0 , \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \varepsilon \langle \Phi_f | \chi_i^+ \rangle = 0 , \quad (1.32)$$

para los casos *post* y *prior*, respectivamente. Reemplazando en la ecuación (1.31) los estados de colisión exactos, $|\Psi_i^+\rangle$ y $|\Psi_f^-\rangle$, por desarrollos en serie de Born tal como los considerados en la sección 1.3.1, se obtienen las series de Born distorsionadas en un único canal, cuyos primeros ordenes se expresan como:

$$\begin{aligned} T_{fi}^{dw(1)-} &= \langle \chi_f^- | W_f^\dagger | \Phi_i \rangle && \textit{prior} , \\ T_{fi}^{dw(1)+} &= \langle \Phi_f | W_i | \chi_i^+ \rangle && \textit{post} , \end{aligned} \quad (1.33)$$

donde por similitud con la ecuación (1.8) se ha intercambiado la notación *post* y *prior*.

También es posible construir una serie de Born distorsionada en ambos canales a partir de la expresión exacta, dada por:

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \langle \chi_f^- | W_f^\dagger + W_f^\dagger \mathbf{G}^+(E) W_i | \chi_i^+ \rangle \\ &= \langle \chi_f^- | W_i + W_f^\dagger \mathbf{G}^+(E) W_i | \chi_i^+ \rangle , \end{aligned} \quad (1.34)$$

donde nuevamente se ha supuesto que se cumplen las condiciones definidas en la ecuación (1.32). Introduciendo en (1.34) una expansión perturbativa del operador de Green total $\mathbf{G}^+(E)$ en potencias de un operador de Green aproximado $G^+(E)$, se obtienen las correspondientes aproximaciones de primer y segundo orden:

$$T_{fi}^{dw(1)} = \langle \chi_f^- | W_f^\dagger | \chi_i^+ \rangle = \langle \chi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle , \quad (1.35)$$

$$T_{fi}^{dw(2)} = T_{fi}^{dw(1)} + \langle \chi_f^- | W_f^\dagger G^+(E) W_i | \chi_i^+ \rangle . \quad (1.36)$$

La elección de diferentes estados distorsionados da lugar a la obtención de distintas teorías. Consideraremos, en particular, aquellas que involucran la función de onda impulsiva o funciones de onda relacionadas, por lo que estas funciones serán tratadas en la próxima sección.

1.4 La función de onda impulsiva y funciones relacionadas

La función de onda impulsiva fue introducida por Coleman^{9,10}, y en líneas generales, trata de expresar el estado de colisión correspondiente al sistema de varias partículas en función de estados de colisión asociados a sistemas más simples.

La ecuación (1.4) puede expresarse en función del operador de Møller Ω_α^\pm , definido como:

$$\Omega_\alpha^\pm = 1 + \mathbf{G}^\pm(E)V_\alpha, \quad \alpha = i, f, \quad (1.37)$$

de manera tal que el estado de colisión es:

$$|\Psi_\alpha^\pm\rangle = \Omega_\alpha^\pm |\Phi_\alpha\rangle, \quad \alpha = i, f. \quad (1.38)$$

Se desea expandir los operadores de Møller en términos de los operadores más sencillos ω_α^\pm , los cuales se definen por su acción sobre una base de autoestados del operador de energía cinética H_0 formada por ondas planas $\{|\varphi_m\rangle\}$, tal que:

$$H_0 |\varphi_m\rangle = E_m |\varphi_m\rangle, \quad (1.39)$$

donde el subíndice m identifica a los distintos elementos de la base. Los nuevos operadores ω_α^\pm se expresan como:

$$\omega_\alpha^\pm = \sum_m \omega_\alpha^\pm(m) |\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|, \quad \alpha = i, f, \quad (1.40)$$

donde

$$\omega_\alpha^\pm(m) |\varphi_m\rangle = \left[1 + \frac{1}{E_m - H_0 - V_\alpha \pm i\varepsilon} V_\alpha \right] |\varphi_m\rangle \equiv |\psi_\alpha^\pm(m)\rangle, \quad \alpha = i, f. \quad (1.41)$$

El estado $|\psi_\alpha^\pm(m)\rangle$ satisface la ecuación de Schrödinger:

$$(H_0 + V_\alpha) |\psi_\alpha^\pm(m)\rangle = E_m |\psi_\alpha^\pm(m)\rangle, \quad (1.42)$$

con condiciones asintóticas saliente o entrante.

Es posible probar la validez de la siguiente expresión para el estado de colisión:

$$|\Psi_\alpha^\pm\rangle = \omega_\alpha^\pm |\Phi_\alpha\rangle + \mathbf{G}^\pm(E) [H_\alpha - H_0, b_\alpha^\pm] |\Phi_\alpha\rangle, \quad \alpha = i, f, \quad (1.43)$$

donde los corchetes indican el conmutador, y los operadores b_α^\pm se definen como:

$$b_\alpha^\pm = \omega_\alpha^\pm - 1, \quad \alpha = i, f. \quad (1.44)$$

La hipótesis impulsiva sostiene que si la duración de la colisión es mucho menor que el tiempo característico del estado electrónico ligado en el canal α , las fuerzas de ligadura en dicho canal, determinadas por $(H_\alpha - H_0)$, no juegan un papel importante durante la colisión, y sólo determinan la distribución de momentos del estado ligado. Esta suposición permite despreciar el segundo término en la ecuación (1.43), con lo cual el estado de colisión en la aproximación impulsiva se define como:

$$|\chi_\alpha^\pm\rangle = \omega_\alpha^\pm |\Phi_\alpha\rangle = \sum_m |\psi_\alpha^\pm(m)\rangle \langle\varphi_m|\Phi_\alpha\rangle, \quad \alpha = i, f. \quad (1.45)$$

Por lo tanto, la función de onda impulsiva se obtiene reemplazando el operador de Møller exacto Ω_α^\pm por el operador aproximado ω_α^\pm , el cual distorsiona las ondas planas asociadas al movimiento electrónico con la interacción dada por el potencial perturbativo V_α , siendo $\alpha = i, f$. El factor de solapamiento $\langle\varphi_m|\Phi_\alpha\rangle$ conduce a la transformada de Fourier del correspondiente estado ligado, y la suma sobre m simboliza la integración sobre los momentos de las ondas planas consideradas.

A partir de la función de onda impulsiva se pueden definir otras funciones más simples, tales como la función de onda impulsiva de pico o la función de onda eikonal.

La primera de estas funciones se obtiene evaluando la distorsión contenida en el estado $|\psi_{\alpha}^{\pm}(m)\rangle$ en el punto máximo del factor $\langle\varphi_m|\Phi_{\alpha}\rangle$ (se denomina aproximación de pico)¹¹; mientras que la función de onda eikonal resulta de evaluar la función de onda impulsiva de pico en el límite de grandes distancias^{12,13}.

La función de onda impulsiva y las funciones relacionadas consideradas, si bien representan aproximaciones de la función de onda exacta, pueden ser también empleadas como funciones de onda en el formalismo de onda distorsionada, dando lugar a distintas aproximaciones que serán consideradas en esta tesis¹¹.

1.5 El potencial coulombiano

Todas las expresiones presentadas en las secciones precedentes son válidas cuando los potenciales perturbativos involucrados son de corto rango, esto es, decrecen más rápido que r^{-1} cuando la distancia r de la que dependen tiende a infinito. Esta condición no es satisfecha por el potencial coulombiano, el cual interviene en los problemas reales de colisión ión-átomo. Sin embargo, introduciendo fases asintóticas en los estados no perturbados, las cuales tienen en cuenta la contribución de largo alcance del potencial coulombiano, se obtienen potenciales perturbativos de corto rango, siendo de este modo apropiada la formulación presentada antes³. Las nuevas funciones de onda no perturbadas con condiciones de contorno saliente y entrante, Φ_i^+ y Φ_f^- , respectivamente, se expresan en términos de las anteriores funciones no perturbadas Φ_i y Φ_f , como:

$$\begin{aligned}\Phi_i^+ &= \Phi_i \exp \left[i\lambda_i \ln \left(K_i R_T - \vec{K}_i \cdot \vec{R}_T \right) \right] , \\ \Phi_f^- &= \Phi_f \exp \left[-i\lambda_f \ln \left(K_f R_P + \vec{K}_f \cdot \vec{R}_P \right) \right] ,\end{aligned}\tag{1.46}$$

donde \vec{R}_T y \vec{R}_P representan las coordenadas relativas entre los agregados en los canales inicial y final, respectivamente. Los parámetros coulombianos λ_i y λ_f se definen como:

$$\lambda_i = \frac{\nu_i Z_i}{K_i} , \quad \lambda_f = \frac{\nu_f Z_f}{K_f} ,\tag{1.47}$$

siendo Z_i (Z_f) el producto de las cargas coulombianas de los agregados en el canal inicial (final).

En el límite de grandes masas ($M_T, M_P \gg m_e$) es válida la hipótesis eikonal, la cual considera que $K_{i,f}$ es grande, y permite la linealización del operador de energía cinética asociado al movimiento relativo de los agregados³. Bajo esta suposición, y tomando como estados no perturbados los definidos en la ecuación (1.46), se puede determinar explícitamente la contribución a la matriz de transición del potencial internuclear $V_{TP} = Z_T Z_P / R$, siendo \vec{R} la coordenada del proyectil P con respecto al núcleo blanco T. La matriz de transición se puede aproximar como :

$$T'_{fi} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int d\vec{\rho} \rho^{i2\lambda} e^{-i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} a'_{fi}(\vec{\rho}) , \quad (1.48)$$

con

$$\lambda = \frac{Z_T Z_P}{v} , \quad (1.49)$$

siendo $\vec{\rho}$ el parámetro de impacto, definido a partir de la escritura de $\vec{R} = \vec{\rho} + z\hat{z}$, donde se ha elegido el versor \hat{z} coincidente en dirección y sentido con la velocidad \vec{v} . El vector $\vec{\eta}$ es el momento transferido transversal, y se define como la componente de \vec{K}_f perpendicular a \vec{K}_i :

$$\vec{\eta} = K_f \sin \theta (\cos \varphi, \sin \varphi, 0) . \quad (1.50)$$

El parámetro λ contiene toda la información del potencial internuclear a orden $1/M_{T,P}$; por lo tanto, la expresión (1.48) permite definir una nueva matriz de transición T''_{fi} , obtenida considerando $V_{TP} = 0$ desde el comienzo:

$$T''_{fi} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int d\vec{\rho} e^{-i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} a'_{fi}(\vec{\rho}) . \quad (1.51)$$

Las matrices T'_{fi} y T''_{fi} proveen la misma sección eficaz total, lo cual implica que si el potencial internuclear es tenido en cuenta exactamente a primer orden en $1/M_{T,P}$, la sección eficaz total es independiente de V_{TP} .

A su vez, es posible obtener la matriz T'_{fi} en función de T''_{fi} , con el objeto de calcular secciones eficaces diferenciales, introduciendo la transformada de Fourier:

$$a'_{fi}(\vec{\rho}) = \frac{2\pi}{v} \int d\vec{\eta} e^{i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} T''_{fi}, \quad (1.52)$$

e incorporando luego el factor de fase $\rho^{i2\lambda}$ a través de la ecuación (1.48). La función $a'_{fi}(\vec{\rho})$ coincide con la amplitud de transición en ausencia de potencial internuclear, definida usando el formalismo del parámetro de impacto², el cual provee una descripción equivalente de la contribución del potencial internuclear.

En los capítulos siguientes se evaluará la matriz de transición T''_{fi} (considerando $V_{TP} = 0$), y el factor de fase $\rho^{i2\lambda}$ se incorporará sólo para el cálculo de secciones eficaces diferenciales, teniendo en cuenta que las funciones de onda consideradas deben contener el correcto comportamiento asintótico.

CAPITULO 2

MODELO UNIDIMENSIONAL DE COLISION

Resulta en general problemático estudiar el rango de validez de un método teórico aplicándolo a un proceso real de colisión atómica. Por el lado experimental, uno de los obstáculos que surgen es la dificultad para obtener sistemas colisionantes con un dado parámetro muy grande, tal como velocidad de impacto o carga nuclear del proyectil o del blanco, lo que impide algunas veces que la teoría bajo consideración sea completamente probada. Otra fuente de incerteza está dada por el hecho de que la mayoría de los métodos teóricos tratan con sistemas de tres partículas, los que son complicados de manipular experimentalmente, existiendo por consiguiente pocos datos disponibles. Por otro lado, los métodos teóricos tales como los segundos ordenes de la series de Born o los métodos de onda distorsionada, son difíciles de calcular exactamente cuando se aplican a un problema real de colisión. Por lo tanto, suelen introducirse aproximaciones adicionales, las que conducen a dudosas conclusiones, ya que la discordancia, o aún la concordancia, con los datos experimentales puede deberse al método en si mismo o a las posteriores aproximaciones efectuadas.

Los modelos unidimensionales, en cambio, permiten evaluar los métodos teóricos sin aproximaciones ni demasiada tarea computacional, a la vez que posibilitan la obtención de la solución exacta del problema resolviendo la correspondiente ecuación de Schrödinger. Este tipo de modelos han sido utilizados por distintos autores para estudiar aproximaciones particulares^{14,15,16,17,18}.

En este capítulo utilizamos un modelo unidimensional de tres partículas con interacciones tipo pozo cuadrado como *banco de prueba*, con el objeto de encontrar un

método teórico apropiado para describir la simple captura electrónica en colisiones asimétricas, cuando la carga de uno de los núcleos es mayor que la del otro. Estudiamos con este modelo el proceso de captura, aplicando conocidos métodos teóricos tales como series perturbativas, principios variacionales y métodos de onda distorsionada, los cuales han sido descritos en la sección 1.3; y comparamos estos resultados con los valores exactos (el *experimento*), obtenidos en el Centro Atómico Bariloche con la técnica de diferencia finita^{19,20}.

Si bien, los potenciales coulombianos que intervienen en un proceso de colisión son de largo alcance y las interacciones consideradas en este modelo son de corto rango, los métodos teóricos que se estudian pueden ser reformulados para el problema real como se explica en la sección 1.5, introduciendo en los estados no perturbados las fases asintóticas dadas por la ecuación (1.46), de manera que los potenciales perturbativos involucrados sean de corto alcance.

Debido a la simplicidad de este modelo, el éxito de una dada teoría no necesariamente implica que dicha teoría sea igualmente válida en una colisión real; sin embargo, podrá ser considerada un buen *candidato*, aunque ese *candidato* puede fallar cuando se aplica al problema tridimensional. Por otra parte, si un método teórico no predice suficientemente bien los valores exactos en esta situación sencilla, será poco confiable en la descripción de una situación real más compleja.

En la sección 2.1 se describe el modelo de colisión y se introduce la notación, y en la sección 2.2 se comenta la técnica utilizada por V.H. Ponce (Centro Atómico Bariloche) para la obtención de los resultados exactos. Los diferentes métodos teóricos que evaluamos son presentados en la sección 2.3. Estudiamos cuatro aproximaciones de Born de segundo orden, una forma fraccional basada en el principio variacional de

Schwinger, y cinco métodos de onda distorsionada, comunmente empleados en colisiones atómicas. Los resultados son discutidos en la sección 2.4, y en la sección 2.5 se exponen las conclusiones.

2.1 Cinemática y notación

Consideramos el siguiente modelo de colisión:

- Un proceso unidimensional.
- Tres pseudo-partículas: un proyectil P (de masa M_P), un núcleo blanco T (de masa M_T), y un electrón e (de masa $m_e = 1$), que inicialmente se halla ligado al núcleo blanco.
- Las interacciones P-e y T-e, V_P y V_T respectivamente, son consideradas como pozos cuadrados, y la interacción internuclear P-T es omitida de acuerdo con lo expuesto en la sección 1.5 .

Los potenciales pozo cuadrado V_C , con $C=T,P$, están caracterizados por los parámetros a_C y V_{C0} , que representan el semiancho y la profundidad del pozo respectivamente. Se consideran núcleos pesados, $M_T, M_P \gg m_e$, y se emplean unidades atómicas unidimensionales. En la Figura 1 se muestra una representación esquemática de la colisión junto con los sistemas de coordenadas utilizados.

El Hamiltoniano H del sistema, en el centro de masa, se expresa como:

$$H = H_0 + V_T + V_P , \quad (2.1)$$

donde

$$H_0 = -\frac{1}{2\nu_T} \frac{\partial^2}{\partial X_T^2} - \frac{1}{2\mu_T} \frac{\partial^2}{\partial x_T^2} = -\frac{1}{2\nu_P} \frac{\partial^2}{\partial X_P^2} - \frac{1}{2\mu_P} \frac{\partial^2}{\partial x_P^2} \quad (2.2)$$

es el operador de energía cinética. Las masas reducidas $\nu_{T,P}$ y $\mu_{T,P}$ coinciden con las definidas en la ecuación (B.2) del apéndice B, y las relaciones entre los sistemas

coordenados se obtienen linealizando la ecuación (B.1) de dicho apéndice. Para el proceso de captura, los potenciales perturbativos inicial y final son $V_i = V_P$ y $V_f = V_T$, y las correspondientes funciones de onda no perturbadas son:

$$\Phi_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iK_i X_T} \phi_T(x_T), \quad (2.3)$$

$$\Phi_f = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iK_f X_P} \phi_P(x_P), \quad (2.4)$$

siendo $K_{i,f}$ los momentos relativos inicial y final. Las funciones $\phi_T(x_T)$ y $\phi_P(x_P)$ son las funciones de onda electrónicas inicial (ligada al núcleo blanco T), y final (ligada al núcleo proyectil P), con energías de ligadura ϵ_i y ϵ_f , respectivamente.

En el caso unidimensional, la probabilidad p_{fi} de que ocurra la transición está relacionada con la matriz de transición T_{fi} a través de la siguiente expresión^{21,22}:

$$p_{fi} = \frac{(2\pi)^2}{v^2} |T_{fi}|^2, \quad (2.5)$$

donde v es la velocidad de impacto. La matriz de transición será evaluada con distintos métodos aproximados.

2.2 Solución exacta

El sistema de una partícula interactuando con dos pozos cuadrados en movimiento es descrito por una ecuación unidimensional de Schrödinger dependiente del tiempo. Esta ecuación fue resuelta numéricamente en el Centro Atómico Bariloche por V.H. Ponce^{19,20} con el algoritmo de Goldberg y colab.¹⁵, obteniéndose la función de onda en una grilla de valores espaciales y temporales. La función de onda alcanza el régimen asintótico de evolución cuando su proyección sobre cada uno de los estados ligados alrededor de cada centro es independiente del tiempo, y estas proyecciones definen las probabilidades de transición para los procesos de captura, excitación e ionización. La única dificultad es el pequeño valor de la probabilidad de captura para grandes velocidades y poca profundidad del pozo que representa al proyectil, lo cual introduce incertezas numéricas.

2.3 Métodos teóricos

Esta sección contiene una síntesis de las matrices de transición correspondientes a las distintas teorías que estudiamos con el modelo unidimensional de colisión. El álgebra involucrada en la evaluación de estos elementos no será presentada.

2.3.1 Primera aproximación de Born

De acuerdo con la ecuación (1.15), la matriz de transición en la primera aproximación de Born es:

$$T_{fi}^{B1} = \langle \Phi_f | V_T | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_f | V_P | \Phi_i \rangle . \quad (2.6)$$

Esta aproximación será denotada como B-B para indicar que las funciones de onda no perturbadas Φ_f y Φ_i , llamadas también funciones de onda de Born, son usadas en los canales final e inicial, respectivamente.

2.3.2 Segundas aproximaciones de Born

Las segundas aproximaciones de Born, denotadas B2Gk, pueden ser escritas utilizando (1.16) como:

$$T_{fi}^{B2Gk} = T_{fi}^{B1} + A_{fi}^{B2Gk} , \quad k=0,T,P,F , \quad (2.7)$$

donde se define:

$$A_{fi}^{B2Gk} = \langle \Phi_f | V_T G_k^+(E) V_P | \Phi_i \rangle , \quad k=0,T,P,F , \quad (2.8)$$

siendo $G_k^+(E)$ los operadores de Green aproximados considerados en la sección 1.3.1, y E la energía total del sistema. En el modelo de colisión que se estudia, los operadores de Green inicial y final (dados por la ecuación (1.7)) coinciden con los operadores

de Green del blanco ($G_T^\pm(E)$) y del proyectil ($G_P^\pm(E)$), respectivamente, los cuales se definen como:

$$G_k^\pm(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_0 - V_k \pm i\epsilon}, \quad k=T,P. \quad (2.9)$$

Luego, el operador de Green de Faddeev (definido en (1.18)) se expresa como:

$$G_F^\pm(E) = G_T^\pm(E) + G_P^\pm(E) - G_0^\pm(E), \quad (2.10)$$

siendo $G_0^\pm(E)$ el operador de Green libre (dado por la ecuación (1.17)), y la correspondiente amplitud A_{fi}^{B2GF} verifica la siguiente relación:

$$A_{fi}^{B2GF} = A_{fi}^{B2GT} + A_{fi}^{B2GP} - A_{fi}^{B2G0}, \quad (2.11)$$

que permite calcularla conociendo las restantes amplitudes.

Para los casos $k = 0, T, P$, la expresión dada por la ecuación (2.8) puede ser evaluada insertando una base completa de autoestados del correspondiente operador de Green, a los que llamamos estados intermedios. Por considerar núcleos pesados, el límite $\epsilon \rightarrow 0^+$ permite dividir la ecuación (2.8) en suma de dos términos, uno *on-shell* y otro *off-shell*²³. El término *on-shell* involucra la contribución de los estados intermedios cuya energía coincide con la energía total del sistema, mientras que el término *off-shell* contiene estados intermedios que no satisfacen esa conservación. Estos términos se expresan en función de integrales unidimensionales y bidimensionales, respectivamente, las que calculamos numéricamente usando el algoritmo de Romberg²⁴.

2.3.3 Principio variacional de Schwinger

La forma fraccional del principio variacional de Schwinger asociada al segundo orden de la serie de Born con el operador de Green de Faddeev (denotada FGF), de acuerdo a la ecuación (1.27), se expresa en función de los distintos términos de la correspondiente serie de Born como:

$$T_{fi}^{FGF} = \frac{(T_{fi}^{B1})^2}{T_{fi}^{B1} - A_{fi}^{B2GF}} \quad (2.7)$$

Esta es la única funcional fraccional que se evalúa, ya que como se dijo en la sección 1.3.2, las formas fraccionales de segundo orden asociadas a las series de Born con G_0^\pm , G_T^\pm , y G_P^\pm , no son posibles para el proceso de captura.

2.3.4 Métodos de onda distorsionada

Consideramos las siguientes funciones de onda distorsionadas, cuya derivación fue presentada en la sección 1.4 :

(i) funciones de onda impulsivas:

$$\chi_i^I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dg \tilde{\phi}_T(g) \exp[i(\mu_T K_i + g) X_P] \phi_P^+(g - v, x_P), \quad (2.12)$$

$$\chi_f^I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dg \tilde{\phi}_P(g) \exp[i(\mu_P K_f - g) X_T] \phi_T^-(g + v, x_T), \quad (2.13)$$

(ii) funciones de onda impulsivas de pico:

$$\chi_i^{PI} = \sqrt{2\pi} \Phi_i \exp(ivx_P) \phi_P^+(-v, x_P), \quad (2.14)$$

$$\chi_f^{PI} = \sqrt{2\pi} \Phi_f \exp(-ivx_T) \phi_T^-(v, x_T). \quad (2.15)$$

Las funciones $\phi_C^\pm(k, x)$ son las funciones de onda del continuo saliente y entrante asociadas al electrón con momento k en el potencial V_C , con $C=T,P$, y la tilde indica la transformada de Fourier.

Por simplicidad, denotamos como $f - i$ las distintas aproximaciones que pueden obtenerse utilizando estas funciones de onda en la formulación de onda distorsionada, donde $f(i)$ indica la función de onda final(inicial) usada en las ecuaciones (1.33) o (1.35). Consideramos $f, i = 1, PI, B$, donde I representa la función de onda impulsiva, PI la función de onda impulsiva de pico, y B la función de onda no perturbada, llamada función de onda de Born. De este modo, es posible listar las aproximaciones estudiadas junto a al nombre utilizado habitualmente en colisiones atómicas para designarlas 25,26,27:

B-I (I-B), aproximación impulsiva *post (prior)* (IA);

B-PI (PI-B), aproximación impulsiva de pico *post (prior)*;

PI-PI, aproximación de onda del continuo distorsionada (CDW);

PI-I (I-PI), aproximación impulsiva semigeneralizada *post (prior)*, o en la notación de

Crothers²⁶, CDW-I (I-CDW).

En cada una de estas aproximaciones hemos verificado que se cumplen las condiciones (1.32), que garantizan la anulación de los términos de superficie.

2.4 Resultados

En esta sección discutimos los resultados obtenidos, analizando en forma separada los casos simétrico ($V_T = V_P$), y asimétrico ($V_T \neq V_P$). Para simplificar el estudio sólo consideramos transiciones entre niveles fundamentales.

2.4.1 Caso simétrico

En el caso simétrico, donde $V_T = V_P$, no existe discrepancia entre las versiones *post* y *prior* de las aproximaciones de onda distorsionada, puesto que los canales inicial y final son equivalentes. De la misma manera, las aproximaciones B2GT y B2GP coinciden entre si.

En la Figura 2 se muestran las probabilidades de captura para el caso simétrico estudiado por Mittleman y Quong²⁸, donde los parámetros de la colisión son:

$$V_{T0} = V_{P0} = \frac{\pi^2}{16}, \quad a_T = a_P = 1. \quad (2.16)$$

Cada uno de los pozos tiene un sólo estado ligado, con energía de ligadura $\epsilon_i = \epsilon_f = -\frac{\pi^2}{32}$.

Fácilmente es posible reconocer el comportamiento de las aproximaciones teóricas conocidas. La primera aproximación de Born no provee el correcto límite de alta velocidad, mientras que los segundos ordencs de las series de Born parecen tender lentamente al valor exacto cuando la energía aumenta²².

De la comparación con el *experimento* se observa que la aproximación B2GT (igual a B2GP) no presenta resultados suficientemente buenos como para justificar su aplicación en los casos simétricos reales, aunque representa una mejora sobre B2G0. Por otra parte, como es esperable para una colisión simétrica, B2GF es la mejor aproximación de Born de segundo orden⁵. Su expresión fraccional *FGF* no tiene el correcto límite de alta velocidad, por lo que sus resultados no son mostrados en la figura, aunque presentan un buen acuerdo con los valores exactos en la región intermedia.

Los métodos de onda distorsionada tienen un comportamiento comparativamente mejor que cualquiera de los métodos perturbativos, siendo esta conclusión válida para

todos los casos estudiados. Para esta colisión, en particular, las aproximaciones CDW e impulsiva semigeneralizada concuerdan muy bien con los datos exactos.

La Figura 3 muestra las probabilidades de captura para el modelo de colisión descrito por los siguientes parámetros:

$$V_{T0} = V_{P0} = 2 , \quad a_T = a_P = 1 , \quad (2.16)$$

de forma tal que cada pozo tiene dos estados ligados, lo cual hace que el proceso sea levemente más realista, ya que la captura puede ocurrir a través de un estado excitado intermedio. El comportamiento de las distintas teorías coincide con el mostrado en el caso anterior, excepto que se intercambian los papeles entre la aproximación impulsiva y la aproximación impulsiva semigeneralizada, siendo ahora mejor la primera. Nuevamente, la aproximación CDW reproduce correctamente las soluciones exactas, mientras que los segundos ordenes perturbativos B2G0, B2GT y B2GF son relativamente ineficientes frente a los métodos de onda distorsionada.

En conclusión, para el caso simétrico, de los siete métodos teóricos que calculamos la aproximación CDW es la más confiable, concordando con los resultados exactos aún en el límite de la región de energías intermedias, $v = 1$ y $v = 2$, en las Figuras 2 y 3, respectivamente.

2.4.2 Caso asimétrico

Estudiamos en esta sección la colisión determinada por los parámetros:

$$V_{P0} = 2 , \quad a_T = a_P = 1 , \quad (2.16)$$

para las velocidades $v = 2$ y $v = 5$, como función de la profundidad del pozo blanco V_{T0} . La idea es simular la captura electrónica desde la capa interna de un átomo por un

núcleo liviano. Para clarificar las figuras se han descartado la primera aproximación de Born (B-B), que no posee el correcto límite de alta velocidad, y los segundos ordenes de las series de Born B2G0 y B2GP, que no tienen en cuenta a V_T , la cual es la interacción más relevante en los casos analizados.

En la Figura 4 se muestran las probabilidades de captura para $v = 2$, siendo esta una velocidad pequeña que puede ser considerada como un caso límite. Cuando la profundidad V_{T0} aumenta deben notarse dos hechos importantes: primero, la falla de la aproximación de Born para Potenciales Fuertes (*Strong Potential Born*) (SPB), esto es B2GT, y segundo, el éxito de la versión *prior* de la aproximación impulsiva semigeneralizada (I-PI). Aunque B2GT es una teoría ideada para tratar con grandes potenciales²³ V_T , no explica satisfactoriamente el *experimento* en el rango estudiado, mientras que su versión *on-shell*, la aproximación I-B, en la cual los estados intermedios verifican la conservación de energía del sistema, presenta una mejor concordancia.

El acuerdo de la aproximación I-PI con el *experimento* para $V_{T0} > 6$ hace que esta teoría sea un buen candidato para tratar procesos de captura en colisiones muy asimétricas. Cuando $V_{T0} > V_{P0}$ es razonable esperar que las versiones *prior* de los métodos de onda distorsionada considerados, sean mejores que las versiones *post* (como se discutirá en la sección 3.2), y la aproximación impulso semigeneralizada verifica esta condición. En lo que respecta a la CDW, esta aproximación deteriora su comportamiento a medida que V_{T0} aumenta, debido a que sale de su rango de aplicación³ cuando $V_{T0} > v$.

En la Figura 5 se presentan las probabilidades de captura para $v = 5$. En este caso se verifica $V_{P0} < v \sim V_{T0}$, por lo tanto corresponde a un típico rango de velocidades intermedias²³. Como en el caso anterior, la aproximación impulsiva semigeneralizada muestra el mejor comportamiento, y tiene una pequeña discrepancia *prior-post*, mientras que B2GT presenta resultados distantes de los valores exactos.

2.5 Conclusiones

En general, los métodos de onda distorsionada presentan un mejor acuerdo con el *experimento* que las series perturbativas. En lo que respecta a los casos simétricos, la aproximación CDW reproduce correctamente los resultados exactos, mejorando la concordancia a medida que la velocidad aumenta, en forma similar a lo encontrado en los problemas reales³.

Para las colisiones asimétricas en las que $V_{T0} > V_{P0}$, la versión *prior* de la aproximación impulsiva semigeneralizada es la mejor teoría, mientras que la aproximación de Born para Potenciales Fuertes (SPB) no concuerda con los datos exactos para las velocidades consideradas, contrariamente a lo que se esperaba.

CAPITULO 3

SIMPLE CAPTURA ELECTRONICA

Diferentes autores ^{3,29,30} han puntualizado la importancia de las apropiadas condiciones de contorno coulombianas, determinadas por la ecuación (1.46), en las teorías de intercambio de carga. Como consecuencia de ello, surgieron distintas aproximaciones de primer orden que incluyen estas condiciones de contorno, entre las que se encuentran la primera aproximación de Born con condiciones de contorno (BIB) ^{30,31} y la aproximación eikonal simétrica ^{12,32}. Estos métodos proveen buenos resultados en la región de energías intermedias, pero poseen una deficiencia reconocida dada por la ausencia de procesos de dispersión múltiple, los que son predominantes en el límite de alta energía. Esta es la razón por la que es necesario introducir aproximaciones de segundo orden, tales como las segundas aproximaciones de Born con correctas condiciones de contorno ^{32,33,34}.

Otra forma de atacar el problema es utilizando el método de onda distorsionada con funciones relacionadas a la función de onda impulsiva, lo que no sólo garantiza las correctas condiciones de contorno, sino que también permite incluir los procesos de dispersión múltiple proveyendo correctamente el límite de altas velocidades, dado por las aproximaciones de Born de segundo orden ³⁵. Además, en el caso de colisiones asimétricas es posible incorporar los estados del continuo correspondientes a la carga nuclear más grande, brindando de este modo una mejor descripción del proceso.

En un trabajo previo (Ref. 1), utilizamos la experiencia brindada por el modelo unidimensional considerado en el capítulo 2, y aplicamos los mejores métodos a la

transición $1s-1s$ en procesos de simple captura electrónica por protones sobre átomos. En particular, evaluamos las aproximaciones impulsiva (IA), impulsiva semigeneralizada, y eikonal impulsiva (EI), siendo esta última teoría una reformulación de la IA que se obtiene reemplazando en el método de onda distorsionada la función de onda no perturbada por la función de onda eikonal.

La aproximación impulsiva semigeneralizada, que había provisto los resultados más satisfactorios para las colisiones asimétricas en el modelo unidimensional, no introdujo una mejora con respecto a la IA, lo que indica que la inclusión de las condiciones asintóticas es contrabalanceada por la pérdida de la normalización^{36,26}, ya que la función de onda impulsiva de pico no está normalizada³⁷. De la comparación con los experimentos concluimos que la versión *prior* de la aproximación EI es un buen método para tratar la captura en colisiones asimétricas con $Z_T \gg Z_P$, cuando se estudian los regímenes de velocidades altas ($v > Z_T \gg Z_P$) e intermedias ($Z_T \geq v \gg Z_P$), y por consiguiente, será la aproximación empleada.

La versión *prior* de la aproximación EI es un método de onda distorsionada basado en el uso de la función de onda impulsiva *exacta* en el canal final, y la función de onda eikonal en el canal inicial. Ambas funciones tienen el correcto comportamiento asintótico y la apropiada normalización. Esta teoría ha sido también aplicada a procesos de excitación de hidrógeno por impacto con proyectiles pesados³⁸, y ha explicado satisfactoriamente los experimentos en el rango de energías altas e intermedias.

En este capítulo calculamos la versión *prior* de la aproximación EI para los procesos de simple captura electrónica por protones impactando sobre diferentes blancos, considerando transiciones a los niveles $1s, 2s, 2p$ y $3s$. En la sección 3.1 se muestran las expresiones de la matriz de transición obtenidas empleando esta aproximación, y en la sección 3.2 se fundamenta la elección de la versión *prior*, en lugar de la versión *post*,

para las colisiones asimétricas estudiadas. Los resultados para una gran variedad de sistemas, que van desde los sistemas asimétricos (p-Ar) hasta el sistema simétrico p-H se exponen en la sección 3.3, donde se comparan con los experimentos. Evaluamos, además de secciones eficaces totales, magnitudes derivadas de la matriz densidad para el nivel $n = 2$ (parámetro de alineamiento, y componentes z del momento dipolar y de la velocidad del perihelio), y secciones eficaces diferenciales. En la sección 3.4 se presentan las conclusiones.

3.1 Aproximación eikonal impulsiva

El sistema de tres partículas interviniente en el proceso de simple captura está formado por un núcleo proyectil P (de masa M_P y carga Z_P), un núcleo blanco T (de masa M_T y carga Z_T), y un electrón e. El Hamiltoniano asociado, considerado en el centro de masa, es:

$$H = H_0 + V_T + V_P, \quad (3.1)$$

donde

$$H_0 = -\frac{1}{2\nu_T} \nabla_{\vec{R}_T}^2 - \frac{1}{2\mu_T} \nabla_{\vec{r}_T}^2 = -\frac{1}{2\nu_P} \nabla_{\vec{R}_P}^2 - \frac{1}{2\mu_P} \nabla_{\vec{r}_P}^2 \quad (3.2)$$

es el operador de energía cinética. En la Figura 6 se muestran los sistemas coordenados, y las correspondientes transformaciones son listadas en el apéndice B, junto con las definiciones de las masas reducidas $\nu_{T,P}$ y $\mu_{T,P}$. Los potenciales V_T y V_P representan la interacción coulombiana entre el electrón e y los núcleos T y P, respectivamente. Como se explicó en la sección 1.5, el potencial internuclear se ha anulado ($V_{TP} = 0$), y se reintroducirá como un factor de fase cuando se calculen secciones eficaces diferenciales.

Las funciones de onda no perturbadas inicial y final se expresan como:

$$\Phi_i = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_T} \phi_T(\vec{r}_T), \quad (3.3)$$

y .

$$\Phi_f = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_P} \phi_P(\vec{r}_P), \quad (3.4)$$

siendo \vec{K}_i (\vec{K}_f) el momento relativo inicial (final), y ϕ_T y ϕ_P las funciones de onda electrónicas inicial (ligada al núcleo blanco T) y final (ligada al núcleo proyectil P), con energías de ligadura ϵ_i y ϵ_f , respectivamente.

Introducimos ahora una notación general, que será usada a lo largo de esta tesis, exceptuando el capítulo 2. Se define el estado del continuo, con condiciones de contorno saliente o entrante, asociado al potencial coulombiano $V_C(\vec{r}) = -Z_C/r$, con $C=T,P$, como:

$$\phi_C^\pm(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} D_C^\pm(\vec{k}, \vec{r}), \quad C=T,P, \quad (3.5)$$

con:

$$D_C^\pm(\vec{k}, \vec{r}) = e^{\frac{\pi}{2} a_C} \Gamma(1 \mp i a_C) {}_1F_1(\pm i a_C, 1, \pm i k r - i \vec{k} \cdot \vec{r}), \quad C=T,P, \quad (3.6)$$

y $a_C = Z_C/k$. La fase eikonal se obtiene tomando el límite de la ecuación (3.6) para grandes distancias:

$$E_C^\pm(\vec{k}, \vec{r}) = \lim_{r \rightarrow \infty} D_C^\pm(\vec{k}, \vec{r}) = \exp[\mp i a_C \ln(kr \mp \vec{k} \cdot \vec{r})], \quad C=T,P. \quad (3.7)$$

Se definen también las siguientes integrales de Nordsieck:

$$\begin{pmatrix} H_C^{X^\pm}(\vec{k}, \vec{q}) \\ I_C^{X^\pm}(\vec{k}, \vec{q}) \\ J_C^{X^\pm}(\vec{k}, \vec{q}) \\ \vec{K}_C^{X^\pm}(\vec{k}, \vec{q}) \end{pmatrix} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{r} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \begin{pmatrix} \nabla_{\vec{r}}^2 \\ 1 \\ V_C(\vec{r}) \\ \vec{\nabla}_{\vec{r}} \end{pmatrix} X_C^\pm(\vec{k}, \vec{r}), \quad (3.8)$$

y

$$\begin{pmatrix} L_C^{X^\pm}(\vec{k}, \vec{q}) \\ \vec{M}_C^{X^\pm}(\vec{k}, \vec{q}) \end{pmatrix} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{r} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \begin{pmatrix} X_C^\pm(\vec{k}, \vec{r}) \phi_C^*(\vec{r}) \\ X_C^\pm(\vec{k}, \vec{r}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \phi_C^*(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

donde X^\pm denota las funciones D^\pm o E^\pm , ϕ_C representa la función de onda ligada, y $C=T,P$ indica el centro. Estas integrales pueden ser calculadas en forma analítica, y las hemos compilado en la Ref. 39.

En la versión *prior* de la aproximación EI, la matriz de transición se obtiene reemplazando en la ecuación (1.35) las funciones distorsionadas inicial y final por las funciones de onda eikonal (χ_i^E) e impulsiva (χ_f^I), respectivamente, las cuales han sido discutidas en la sección 1.4, siendo en este caso:

$$\chi_i^E = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_T} \phi_T(\vec{r}_T) E_P^+(-\vec{v}, \vec{r}_P), \quad (3.10)$$

y

$$\chi_f^I = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{q} \tilde{\phi}_P(\vec{q}) \exp \left[i \left(\mu_P \vec{K}_f - \vec{q} \right) \cdot \vec{R}_T \right] \phi_T^-(\vec{q} + \vec{v}, \vec{r}_T), \quad (3.11)$$

donde \vec{v} es la velocidad de impacto dada por (1.14), y la tilde indica la transformada de Fourier. La correspondiente matriz de transición se expresa como:

$$\begin{aligned} T_{fi}^{EI-} &= \langle \chi_f^I | W_f^I | \chi_i^E \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{q} \tilde{\phi}_P^*(\vec{v} - \vec{q}) L_T^{D-\bullet}(\vec{q}, -\vec{W}_T) \\ &\quad \left[\left(\frac{(\vec{v} - \vec{q})^2}{2} - \epsilon_f \right) I_P^{E+}(-\vec{v}, \vec{q} - \vec{W}_T) + J_P^{E+}(-\vec{v}, \vec{q} - \vec{W}_T) \right], \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde \vec{W}_T y \vec{W}_P son los momentos transferidos definidos en el apéndice B.

En la ecuación (3.12) se emplea la interacción residual final W_f^I , definida a través de la relación $(H - E)\chi_f^I = W_f^I\chi_f^I$. Como se observa de la ecuación (1.35), es posible usar, en forma equivalente, la interacción residual inicial W_i^E , dada por: $(H - E)\chi_i^E = W_i^E\chi_i^E$, obteniéndose:

$$\begin{aligned} T_{fi}^{EI-} &= \langle \chi_f^I | W_i^E | \chi_i^E \rangle \\ &= - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{q} \tilde{\phi}_P^*(\vec{v} - \vec{q}) \\ &\quad \left[\frac{1}{2} L_T^{D-\bullet}(\vec{q}, -\vec{W}_T) H_P^{E+}(-\vec{v}, \vec{q} - \vec{W}_T) + \vec{M}_T^{D-\bullet}(\vec{q}, -\vec{W}_T) \cdot \vec{K}_P^{E+}(-\vec{v}, \vec{q} - \vec{W}_T) \right]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Si los núcleos proyectil y blanco son realmente núcleos desnudos, las ecuaciones (3.12) y (3.13) son exactamente iguales. Sin embargo, estas expresiones no son equivalentes

cuando se aproximan las funciones de onda correspondientes a los estados ligados inicial o final con el objeto de tratar blancos multielectrónicos o proyectiles no totalmente desnudos.

Alternativamente, la versión *post* de la aproximación EI se obtiene reemplazando en la ecuación (1.35) las funciones distorsionadas por las funciones impulsiva (χ_i^I) en el canal inicial, y eikonal (χ_f^E) en el canal final, las cuales están dadas por:

$$\chi_i^I = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{q} \tilde{\phi}_T(\vec{q}) \exp \left[i \left(\mu_T \vec{K}_i + \vec{q} \right) \cdot \vec{R}_P \right] \phi_P^+(\vec{q} - \vec{v}, \vec{r}_P), \quad (3.14)$$

y

$$\chi_f^E = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_P} \phi_P(\vec{r}_P) E_T^-(\vec{v}, \vec{r}_T). \quad (3.15)$$

La matriz de transición asociada es:

$$\begin{aligned} T_{fi}^{EI+} &= \langle \chi_f^E | W_f^{E\dagger} | \chi_i^I \rangle \\ &= - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{q} \tilde{\phi}_T(\vec{v} + \vec{q}) \\ &\quad \left[\frac{1}{2} L_P^{D+}(\vec{q}, \vec{W}_P) H_T^{E-}(\vec{v}, \vec{q} + \vec{W}_P) + \vec{M}_P^{D+}(\vec{q}, \vec{W}_P) \cdot \vec{K}_T^{E-}(\vec{v}, \vec{q} + \vec{W}_P) \right], \end{aligned} \quad (3.16)$$

o bien:

$$\begin{aligned} T_{fi}^{EI+} &= \langle \chi_f^E | W_i^I | \chi_i^I \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{q} \tilde{\phi}_T(\vec{v} + \vec{q}) L_P^{D+}(\vec{q}, \vec{W}_P) \\ &\quad \left[\left(\frac{(\vec{v} + \vec{q})^2}{2} - \epsilon_i \right) I_T^{E-}(\vec{v}, \vec{q} + \vec{W}_P) + J_T^{E-}(\vec{v}, \vec{q} + \vec{W}_P) \right], \end{aligned} \quad (3.17)$$

dependiendo del uso de las interacciones residuales final o inicial, respectivamente. Nuevamente, si se considera un núcleo proyectil desnudo colisionando con un átomo hidrogénico las ecuaciones (3.16) y (3.17) coinciden.

Cuando se estudia la colisión de un proyectil puntual contra un blanco multi-electrónico, como en los casos considerados aquí, y el estado ligado inicial se describe

por medio de una buena función de onda de Hartree-Fock, es conveniente usar las expresiones de la matriz de transición que contienen el potencial residual inicial (W_i^E en la ecuación (3.13) o W_i^I en la ecuación (3.17)). Esto se debe a que la interacción P-e es descrita por un potencial coulombiano puro, siendo por lo tanto ϕ_P^+ un autoestado del continuo exacto para dicho potencial, mientras que en el cálculo de ϕ_T^- o E_T^- se emplea una carga nuclear efectiva con el objeto de tener en cuenta los electrones del blanco que no intervienen en la colisión. Por consiguiente, el error involucrado en la evaluación de las interacciones residuales iniciales es menor que el contenido en las interacciones residuales finales.

3.2 El uso de la versión *prior*

En esta sección discutimos la justificación del uso de la versión *prior* de la aproximación EI para las colisiones asimétricas consideradas en este capítulo. Existen dos argumentos físicos distintos que pueden ser empleados para determinar la elección de una u otra versión para la descripción de un dado proceso de captura, los cuales se resumen como sigue:

- a- *Argumento de carga:* Cuando en una colisión las cargas de los núcleos blanco y proyectil son asimétricas, la matriz de transición debería tener en cuenta en forma completa la influencia de la carga más grande. Dado que la función de onda impulsiva representa mejor las interacciones fuertes que la función de onda eikonal, si $Z_T > Z_P$ conviene usar la función χ_f^I en el canal final para incluir la distorsión del potencial más fuerte, dando lugar de este modo a la aproximación T_{fi}^{EI-} . Este argumento fue fundamentado por Briggs³⁵, y posteriormente se empleó en forma extensiva en procesos de captura desde capa interna^{23,40}.
- b- *Argumento de velocidad:* La hipótesis impulsiva, presentada en la sección 1.4, sostiene que si el tiempo de duración de la colisión es corto comparado con el

tiempo orbital característico del electrón, las fuerzas de ligadura, aparte de proveer la distribución de momentos del electrón en el estado ligado inicial o final, no juegan un papel importante durante el proceso. Por consiguiente, bajo esta hipótesis, cuanto más pequeña es la velocidad orbital electrónica, mejor se aproxima la función de onda impulsiva al estado de colisión exacto. Luego, si se considera la captura $1s \rightarrow n_f, l_f, m_f$ con $Z_T > Z_P$, la velocidad orbital electrónica final es menor que la inicial, y por lo tanto χ_f^l satisface mejor la hipótesis impulsiva en el canal final que χ_i^l en el canal inicial, siendo nuevamente conveniente el uso de T_{fi}^{EI-} en lugar de T_{fi}^{EI+} . Este argumento se ha aplicado en forma exitosa para procesos de excitación³⁸, pero para procesos de captura no ha sido aún estudiado.

Nosotros estudiamos la captura a estados excitados en sistemas con $Z_T \geq Z_P$, por lo que ambos argumentos concuerdan en que la versión *prior* de la aproximación EI es la que se debe elegir. En el caso particular del sistema simétrico protón - hidrógeno ($Z_T = Z_P = 1$) mostramos los resultados de ambas versiones, T_{fi}^{EI-} y T_{fi}^{EI+} .

3.3 Resultados

De acuerdo a la discusión presentada en la sección anterior, calculamos secciones eficaces de captura para las colisiones de protones sobre átomos, empleando la versión *prior* de la aproximación EI. Para obtener una sección eficaz total es necesario efectuar una integral cuádruple: tres integrales en el espacio de los momentos para evaluar la matriz de transición, y una integral angular para calcular la sección eficaz total a partir de la sección eficaz diferencial. Estas integraciones se efectuaron numéricamente, siendo el error relativo de la matriz de transición del orden del 1 %. Por lo tanto, la sección eficaz diferencial se obtuvo con un error relativo de aproximadamente 2 %, y se introdujo un error adicional del 1 % al efectuar la integración angular. En conclusión,

estimamos un error relativo del 3 % a nivel de la sección eficaz total, considerando 16 ángulos de colisión.

Para tratar átomos multielectrónicos empleamos el modelo de electrón independiente, y utilizamos una función doble-z de Hartree-Fock para representar la función de onda electrónica correspondiente al estado fundamental. La interacción coulombiana del continuo e-T en el canal final, la cual es descrita por el parámetro a_T , fue aproximada utilizando una carga de Hilleras, igual a $Z_T - 5/16$. Para el caso del helio estimamos la sensibilidad de los resultados con esta carga efectiva del orden del 20 %, siendo mucho menor para blancos atómicos más pesados. También exploramos la respuesta al uso de las funciones multiple-z de Hartree-Fock en lugar de las funciones doble-z que hemos considerado, y no encontramos apreciables diferencias, ni siquiera para el caso de helio que debería ser el más sensible.

3.3.1 Captura asimétrica

En las Figuras 7, 8, y 9 se muestra la captura en las capas K y L por protones desde la capa interna de Ar, Ne, y C, respectivamente. Como $Z_T > Z_P$, los argumentos de carga y velocidad concuerdan en que la versión *prior* de la aproximación EI (T_{fi}^{EI-}) es la versión apropiada. Para representar el estado fundamental del átomo blanco usamos la función doble-z de Clementi y Roetti (Ref. 41, Tabla 42), la cual contiene seis orbitales de Slater para el átomo de argón, y cuatro para los átomos de neón y carbono. La discrepancia con nuestros resultados previos de captura al nivel fundamental¹, donde simplemente habíamos usado una carga efectiva para representar el estado electrónico inicial, es del orden o menor que el 5%, por lo que el uso de una elaborada función de Hartree-Fock en lugar de una simple carga efectiva no produce sustanciales cambios. La captura al nivel 1s es la más relevante, mientras que la captura al nivel 2s sigue

aproximadamente la regla de Oppenheimer⁴² y la captura al estado $2p$ es muy pequeña. La versión *prior* de la aproximación EI concuerda en los tres casos con los experimentos.

Para el caso del argón, graficamos también la aproximación BIB³⁰. Este primer orden da una buena descripción de los experimentos a velocidades intermedias, cuando $Z_T/v \sim 1$, pero sobrestima los datos cuando $Z_T/v \gg 1$. La aproximación EI, en cambio, es válida en los rangos de velocidades intermedias ($Z_T \geq v \gg Z_P$) y altas ($v > Z_T \gg Z_P$).

3.3.2 Captura levemente asimétrica

Consideramos en este punto la captura por protones sobre helio, siendo los resultados mostrados en la Figura 10. Si bien la aproximación EI parte de suponer una colisión muy asimétrica y la considerada aquí no lo es, los argumentos de carga y velocidad presentados en la sección 3.2 son todavía válidos, aunque el cociente Z_P/Z_T no es mucho menor que la unidad. La versión *prior* de la aproximación EI presenta un buen acuerdo con los experimentos, aún para energías tan bajas como 50 KeV, más de lo esperado para un método de onda distorsionada.

Los cálculos se efectuaron empleando una función doble- z de Hartree-Fock (Ref. 41, Tabla 42) para describir el estado fundamental del helio. Para algunas velocidades elegidas al azar utilizamos también la función múltiple- z de Hartree-Fock (Ref. 41, Tabla 1), la cual es más precisa, y las correcciones observadas fueron despreciables.

También presentamos, para la captura total y la captura al nivel $1s$, la aproximación BIB⁴³, la cual da resultados superiores a los de la aproximación EI, los que van desde un 30% por encima a 50 KeV, hasta un 60% para energías de impacto de 500 KeV.

Estudiamos además magnitudes relacionadas con la matriz densidad, tales como el parámetro de alineamiento (A_{20}), la componente z del vector momento dipolar ($\langle \vec{D} \rangle_z$),

y la componente z de la velocidad del perihelio ($(\vec{L} \times \vec{A})_z$, donde \vec{L} es el vector momento angular y \vec{A} es el vector de Runge-Lenz), las cuales se definen como sigue⁴⁴:

$$A_{20} = \frac{\sigma_{211} - \sigma_{210}}{\sigma_{21}}, \quad \langle \vec{D} \rangle_z = \frac{6}{\sigma_2} \text{Re}(\rho_{200,210}), \quad \langle \vec{L} \times \vec{A} \rangle_z = -\frac{2}{\sigma_2} \text{Im}(\rho_{200,210}), \quad (3.18)$$

donde σ_{nlm} es la sección eficaz de captura al estado n, l, m , $\sigma_{nl} = \sum_m \sigma_{nlm}$, $\sigma_n = \sum_l \sigma_{nl}$, $\rho_{nlm, n'l'm'}$ es el elemento de matriz densidad definido por la ecuación (1.13), y $\text{Re}(\text{Im})$ indica la parte real(imaginaria).

En la Figura 11 graficamos estos parámetros evaluados con la aproximación EI *prior*, junto con los resultados de Jain y colab.⁴⁴ y con los experimentos^{45,46}. El apartamiento de la teoría con respecto a los datos experimentales a bajas energías se debe probablemente a la ausencia del efecto Stark⁴⁷, el cual mezcla los estados degenerados $2s$ y $2p_0$, modificando los valores de los parámetros mostrados en la figura. Es posible obtener un tratamiento analítico de este efecto, llamado modelo de interacción post colisional (PCI)^{47,48} evolucionando la matriz densidad a partir de cierto punto de empalme. Sin embargo, una aplicación directa de este modelo a la aproximación EI probablemente no sea adecuada, puesto que primero deberíamos analizar el operador de evolución asociado a la función de onda impulsiva, para el cual no se conoce una expresión manejable⁴⁹. Los resultados de Jain y colab.⁴⁴, obtenidos mediante el método de expansión en orbitales atómicos a dos centros (método de canales acoplados), contienen la PCI. También presentamos en la misma figura los resultados de la aproximación CDW con PCI^{45,46}.

Nuestros resultados de $\langle \vec{D} \rangle_z$, para el cual el efecto de la PCI no es tan importante, convergen razonablemente a los resultados del método de canales acoplados⁴⁴; pero para A_{20} nuestra teoría no concuerda con los datos ni tiende a los valores dados por la aproximación CDW sin PCI. Esto es inesperado, ya que si bien la teoría EI considerada

no tiene en cuenta la mezcla Stark, la cual es relevante a energías intermedias como se observa en $\langle \vec{L} \times \vec{A} \rangle_z$, debería trabajar bien en el régimen de alta energía. Este es el principal punto de conflicto de la aproximación EI.

3.3.3 Captura simétrica

En esta sección analizamos el comportamiento de la teoría EI frente a colisiones simétricas, siendo este el peor caso. Para la captura simétrica y resonante $1s \rightarrow 1s$ las versiones *post* y *prior* de la aproximación EI son iguales, mientras que para captura a estados excitados ambas versiones difieren entre si. Si bien el argumento de carga presentado en la sección 3.2 no puede ser utilizado, el argumento de velocidad aún es válido y para la captura a estados excitados favorece débilmente a la forma *prior*. Con el objeto de explorar la discrepancia *post-prior* para sistemas simétricos graficamos ambas versiones.

La Figura 12 muestra los resultados de captura en las capas K y L , y en el estado $3s$ por protones impactando sobre hidrógeno atómico, junto con los valores experimentales. Dado que la mayoría de los experimentos fueron llevados a cabo sobre hidrógeno molecular, los datos se transformaron a secciones eficaces para hidrógeno atómico siguiendo el procedimiento de Belkić y colab.³ Con respecto a la discrepancia *post-prior* se debe remarcar que ambas versiones coinciden para energías superiores a 70 KeV, y que para energías inferiores, contrariamente al argumento de velocidad, la versión *post* parece aproximarse mejor a los datos, aunque esta última conclusión no es definitiva.

También se presenta en la figura la aproximación B1B⁵⁰. Comparando esta teoría con nuestros resultados se observa una relativa coincidencia de ambas aproximaciones a velocidades intermedias (excepto para la captura al nivel $2p$), y un sistemático apartamiento para altas energías debido al diferente límite de alta velocidad de ambas

teorías. Mientras que la aproximación EI tiende al correcto límite de alta energía dado por la segunda aproximación de Born ³⁵, la aproximación BIB tiende, sólo para el presente caso, a la forma asintótica de la sección eficaz de Jackson-Schiff ⁴³.

Para probar que la aproximación EI da el supuesto correcto límite de alta velocidad, se muestran en la Figura 13 las secciones eficaces diferenciales correspondientes a la captura electrónica por protones desde hidrógeno para dos energías de impacto, 2.8 y 5 MeV. Para el cálculo de las secciones eficaces diferenciales se reintrodujo el potencial internuclear tal como se explicó en la sección 1.5. Los resultados de la aproximación EI (las versiones *post* y *prior* coinciden para estas energías de impacto) se graficaron junto con los experimentos de Vogt y colab. ⁵¹. La teoría da una buena descripción para ángulos pequeños y presenta el pico de Thomas alrededor de 0.45 mrad, indicando claramente que contiene el mecanismo de doble dispersión; sin embargo, subestima los experimentos alrededor del ángulo de Thomas. Este comportamiento parece ser una tendencia general de varios resultados teóricos^{52,53}, lo que sugiere que puede existir algún problema con los datos experimentales.

En la Figura 14 presentamos los valores de los parámetros A_{20} , $\langle \vec{D} \rangle_z$, y $\langle \vec{L} \times \vec{A} \rangle_z$, calculados usando las definiciones (3.18), y los comparamos con los obtenidos por Jain y colab. ⁵⁴ y Shakeshaft⁵⁵. La discrepancia *post-prior* para estas magnitudes es significativa, aún para energías en las que no hay diferencias a nivel de la sección eficaz total, y ambas versiones coinciden sólo a altas energías de impacto.

Los valores de A_{20} y $\langle \vec{L} \times \vec{A} \rangle_z$ dados por las versiones *post* y *prior* tienen el mismo signo y forma para todas las energías consideradas, y parecen tender a los otros resultados teóricos^{54,55}, los cuales fueron obtenidos con el método de canales acoplados. En lo que respecta a los valores de $\langle \vec{D} \rangle_z$, son los que presentan la diferencia *post-prior* más significativa, y ambas versiones concuerdan cualitativamente entre si sólo para energías superiores a 100 KeV. A su vez, estos valores difieren de los resultados de Jain y colab.

⁵⁴. El efecto Stark, como se indicó en el punto anterior, debería producir importantes cambios a bajas energías.

3.4 Conclusiones

De acuerdo a los resultados presentados, podemos concluir que la aproximación EI puede ser usada con confianza para tratar colisiones asimétricas en el rango de energías intermedias y altas, y colisiones simétricas a altas energías de impacto. Esta teoría posee:

- correcto comportamiento asintótico coulombiano en ambos canales ¹,
- correcto límite de alta velocidad³⁵,
- apropiada normalización ^{37,56},
- distorsión total en términos de la carga nuclear más grande, y
- ninguna otra aproximación adicional a la correspondiente a la aproximación impulsiva.

Un punto débil del método EI parece ser cierta pérdida de la mezcla post colisional producida por el efecto Stark, la que afecta a los momentos A_{20} , $\langle \vec{D} \rangle_z$, y $\langle \vec{L} \times \vec{A} \rangle_z$. Para estudiar este problema deberíamos calcular el segundo orden del método de onda distorsionada con la aproximación EI e introducir estados intermedios de manera tal de incluir transiciones ópticamente permitidas.

CAPITULO 4

PROPAGADORES EN PROCESOS DE SIMPLE CAPTURA

Macek y colab. formularon la aproximación de Born para Potenciales Fuertes (*Strong Potential Born*) (SPB) con el objeto de tratar procesos de captura electrónica en colisiones asimétricas, en el rango de velocidades intermedias²³, siendo su punto de partida la segunda aproximación de Born con un operador de Green que contiene al potencial más fuerte. Esta teoría es equivalente a la aproximación impulsiva (IA) pero considerando los estados electrónicos intermedios *off-shell*²³ (o sea, *fuera de la capa de energía*), mientras que en la IA estos estados son reemplazados por su límite *on-shell* (o sea, *sobre la capa de energía*)^{2,35}. Los estados *off-shell* considerados en la SPB introducen divergencias en la matriz de transición, y dan una contribución sustancial a la sección eficaz cuando se compara esta teoría con la IA.

Los problemas encontrados en la aproximación SPB^{57,29} fueron resueltos por Macek y colab. incorporando los efectos de la interacción estática entre los agregados en los canales inicial y final⁴⁰, y la teoría así reformulada se denomina aproximación de Born para Potenciales Fuertes Distorsionada (DSPB). La teoría DSPB se comporta linealmente en el límite *on-shell*, desapareciendo de esta manera las indeseables singularidades, pero contiene aún una contribución de los estados *off-shell*, que aunque pequeña está totalmente ausente en la IA.

En este capítulo atacamos el problema empleando el formalismo de onda distorsionada, y mostramos que si la IA es reformulada para incluir las condiciones asintóticas coulombianas en ambos canales, presenta una contribución *off-shell* similar a la de la

DSPB. La teoría considerada es la aproximación eikonal impulsiva (EI), que fue tratada en el capítulo 3, la cual se basa en la IA y distorsiona la función de onda no perturbada con la fase eikonal para proveer el correcto comportamiento asintótico.

Para estudiar la contribución *off-shell* y su límite *on-shell* analizamos el propagador de la matriz de transición, el cual se define en la sección 4.1. En la sección 4.2 se estudian los propagadores asociados con las series perturbativas de Born, y en la sección 4.3, aquellos correspondientes a los métodos de onda distorsionada relacionados con la IA. Las conclusiones a las que arribamos son presentadas en la sección 4.4.

4.1 Propagador

Consideramos el proceso de colisión presentado en la sección 3.1, utilizando la misma notación y los mismos sistemas coordenados que en dicha sección. En general, la matriz de transición correspondiente a una dada aproximación perturbativa o de onda distorsionada puede expresarse como una integral en el espacio de momentos:

$$T_{fi} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 \tilde{\phi}_P^*(\vec{q}_2) \tilde{V}_P(\vec{q}_2 - \vec{W}_P) P(\vec{q}_1, \vec{q}_2) \tilde{V}_T(\vec{q}_1 - \vec{W}_T) \tilde{\phi}_T(\vec{q}_1), \quad (4.1)$$

donde \vec{W}_T y \vec{W}_P son los momentos transferidos definidos en el apéndice B, y la tilde denota la transformada de Fourier. La función $P(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ se denomina propagador y está relacionada a la transformada de Fourier del correspondiente operador de Green. Es importante notar que no existe un único propagador asociado con una dada aproximación de la matriz de transición. En el caso de los métodos de onda distorsionada, por cada matriz de transición hay dos propagadores asociados, correspondientes al uso de los potenciales de distorsión inicial o final. A continuación analizamos los propagadores correspondientes a distintos métodos teóricos, cuyas expresiones se obtuvieron luego de utilizar la técnica de Nordsieck^{58,39} para efectuar las respectivas integraciones.

4.2 Series perturbativas de Born

4.2.1 Primer orden

Utilizando la ecuación de Schrödinger en el espacio de los momentos se obtiene el propagador asociado a la aproximación de Born de primer orden, definida por la ecuación (1.15), el cual se expresa como:

$$P_{B1}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = \left[\epsilon_i - \frac{W_T^2}{2} \right]^{-1} = \left[\epsilon_f - \frac{W_P^2}{2} \right]^{-1} . \quad (4.2)$$

Este propagador es una constante, y permite separar las integrales sobre \vec{q}_1 y \vec{q}_2 en la ecuación (4.1).

4.2.2 Segundo orden con el operador de Green libre

El propagador asociado al segundo orden de la serie de Born con el operador de Green libre G_0^+ , correspondiente al segundo término de la ecuación (1.16), tiene una forma simple dada por:

$$\begin{aligned} P_{B2G0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) &\equiv \frac{1}{\alpha} = \frac{1}{\alpha_T - \delta_P} = \left[\frac{(\vec{v} - \vec{q}_2)^2 - (\vec{q}_1 - \vec{q}_2 + \vec{W}_P)^2}{2} + i\epsilon - \delta_P \right]^{-1} \\ &= \frac{1}{\alpha_P - \delta_T} = \left[\frac{(\vec{v} - \vec{q}_1)^2 - (\vec{q}_1 - \vec{q}_2 - \vec{W}_T)^2}{2} + i\epsilon - \delta_T \right]^{-1} , \end{aligned} \quad \text{con } \epsilon \rightarrow 0^+ \quad (4.3)$$

donde definimos:

$$\delta_P = \frac{q_2^2}{2} - \epsilon_f , \quad \delta_T = \frac{q_1^2}{2} - \epsilon_i , \quad (4.4)$$

como los parámetros que miden la contribución *off-shell* de un dado propagador. La validez de esta identificación será evidente en el próximo punto cuando se analice la aproximación SPB. Las variables α y $\alpha_{T,P}$ han sido introducidas para simplificar en lo que sigue la notación.

El propagador $P_{B_2G_0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ es *off-shell*, y tiene dos límites *on-shell* distintos, definidos como:

$$\lim_{\delta_P \rightarrow 0} P_{B_2G_0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = \frac{1}{\alpha_T} = \left[\frac{(\vec{v} - \vec{q}_2)^2 - (\vec{q}_1 - \vec{q}_2 + \vec{W}_P)^2}{2} + i\varepsilon \right]^{-1} \quad (4.5)$$

y

$$\lim_{\delta_T \rightarrow 0} P_{B_2G_0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = \frac{1}{\alpha_P} = \left[\frac{(\vec{v} - \vec{q}_1)^2 - (\vec{q}_1 - \vec{q}_2 - \vec{W}_T)^2}{2} + i\varepsilon \right]^{-1} \quad (4.6)$$

Deseamos analizar el comportamiento de $P_{B_2G_0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ en las proximidades del límite *on-shell*, y para ello consideraremos dos expansiones distintas, dadas por:

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{1}{\alpha_T - \delta_P} = \frac{1}{\alpha_T} + \frac{1}{\alpha_T} \delta_P \frac{1}{\alpha} \simeq \frac{1}{\alpha_T} + \frac{1}{\alpha_T} \delta_P \frac{1}{\alpha_P}, \quad (4.7)$$

y

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{1}{\alpha_P - \delta_T} = \frac{1}{\alpha_P} + \frac{1}{\alpha_P} \delta_T \frac{1}{\alpha} \simeq \frac{1}{\alpha_P} + \frac{1}{\alpha_P} \delta_T \frac{1}{\alpha_T}, \quad (4.8)$$

donde hemos despreciado términos del orden de δ^2/α^3 . De estas expresiones se concluye que $P_{B_2G_0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ se comporta linealmente en el límite *on-shell*, y usando la identidad $\alpha_T + \delta_T = \alpha_P + \delta_P$ se puede probar que los miembros derechos de las ecuaciones (4.7) y (4.8) son exactamente iguales.

Cuando $\vec{q}_1 = \vec{W}_T$ vale $\alpha_T = 0$, y por lo tanto, se puede decir que el propagador es **totalmente** *off-shell*, ya que $1/\alpha = -1/\delta_P$; de manera similar, si $\vec{q}_2 = \vec{W}_P$ vale $\alpha_P = 0$, y por consiguiente, $1/\alpha = -1/\delta_T$. Es interesante notar que $P_{B_1}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = P_{B_2G_0}(\vec{q}_1 = \vec{W}_T, \vec{q}_2 = \vec{W}_P)$, es decir, el propagador de la primera aproximación de Born coincide con $P_{B_2G_0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ evaluado en los puntos máximos de las transformadas de Fourier de los potenciales V_T y V_P contenidos en la ecuación (4.1).

Dado que las energías ϵ_i y ϵ_f son negativas, los parámetros δ_T y δ_P son cantidades positivas. Los valores de $\delta_{T,P}$ relevantes en la ecuación (4.1) están determinados por los picos de las funciones $\tilde{\phi}_T(\vec{q}_1)$ y $\tilde{\phi}_P(\vec{q}_2)$, siendo por lo tanto del orden de ϵ_i y ϵ_f ,

respectivamente. En el caso de una colisión asimétrica con $Z_T \gg Z_P$ en los rangos de velocidades intermedias ($Z_T \geq v \gg Z_P$) y altas ($v > Z_T \gg Z_P$), es posible, por consiguiente, realizar una expansión perturbativa del propagador en potencias de δ_P , y conservar sólo los primeros términos.

Por otra parte, se puede obtener una forma lineal del propagador $P_{B2G0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ despreciando en la ecuación (4.3) los términos cuadráticos en \vec{q}_1 y \vec{q}_2 , con lo cual se reduce a:

$$\frac{1}{\alpha} \sim \frac{1}{\alpha_I} = \left[D_0 - \vec{q}_1 \cdot \vec{W}_P - \vec{q}_2 \cdot \vec{W}_T + i\epsilon \right]^{-1}, \quad (4.9)$$

donde

$$D_0 = \frac{v^2 - W_P^2 + 2\epsilon_f}{2} = \frac{v^2 - W_T^2 + 2\epsilon_i}{2}. \quad (4.10)$$

Esta aproximación ha sido largamente usada para obtener expresiones analíticas de la segunda aproximación de Born, considerando aproximaciones de pico².

4.2.3 Segundo orden con el operador de Green del blanco

Macek y colab. propusieron la teoría SPB, la cual, en el caso de colisiones asimétricas con $Z_T \gg Z_P$, se basa en la segunda aproximación de Born conteniendo el operador de Green de blanco G_T^+ (definido al igual que en el caso unidimensional por la ecuación (2.9)). Su derivación usual⁵⁹ tiene asociada el propagador:

$$P_{SPB}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) \simeq F(a_T, A_T) \frac{1}{\alpha_T} O_{SPB}^{-*}, \quad (4.11)$$

donde

$$F(a, A) = e^{\pi a/2} \Gamma(1 - ia) A^{-ia}, \quad (4.12)$$

$$O_{SPB}^{-*} = e^{\pi a_T/2} \Gamma(1 + ia_T) \left[\frac{\delta_P}{2|\vec{v} - \vec{q}_2|} \right]^{-ia_T}, \quad (4.13)$$

$$A_T = \frac{-2\alpha_T}{(\vec{q}_1 - \vec{W}_T)^2}, \quad (4.14)$$

siendo $a_T = Z_T / |\vec{v} - \vec{q}_2|$ el parámetro coulombiano. La ecuación (4.11) tiene una lectura simple: $F(a_T, A_T)$ da cuenta de las fases coulombianas de largo alcance, $1/\alpha_T$ coincide con el propagador *on-shell* definido por la ecuación (4.5), y O_{SPB}^{-*} es el llamado factor *off-shell*. Este último factor diverge en el límite $\delta_P \rightarrow 0$, y da una importante contribución a la sección eficaz total en la región de energías intermedias. De la ecuación (4.13) se puede identificar claramente δ_P con el parámetro *off-shell* definido en las referencias Ref. 23 y Ref. 40, justificando de este modo la definición (4.4).

Recientemente Macek y colab. reformularon la teoría SPB para incluir los efectos de la dispersión elástica en los estados inicial y final ⁴⁰, y la nueva aproximación, denominada DSPB, tiene asociada un propagador similar al de la aproximación SPB, el cual se expresa como:

$$P_{DSPB}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) \simeq F(a_T, A_T) \frac{1}{\alpha_T} O_{DSPB}^{-*}, \quad (4.15)$$

donde

$$O_{DSPB}^{-*} \rightarrow \begin{cases} O_{SPB}^{-*}, & \delta_P \gg v/R_0 \\ 1 + \frac{i [\psi(1) - \psi(1+ia_T)] R_0}{v} \delta_P, & \delta_P \ll v/R_0, \end{cases} \quad (4.16)$$

siendo ψ la función digamma y R_0 un parámetro de rango. Este propagador no posee singularidades y se comporta linealmente alrededor del límite *on-shell*, cuando $\delta_P \rightarrow 0$.

A su vez, para grandes velocidades y en las proximidades del límite *on-shell* se puede aproximar como:

$$O_{DSPB}^{-*} \sim 1 + \frac{\pi^2 Z_T R_0}{6v^2} \delta_P, \quad \text{con } \delta_P \rightarrow 0. \quad (4.17)$$

Aproximando $R_0 \sim 1/Z_T$ se obtiene:

$$O_{DSPB}^{-*} \sim 1 + \frac{1.6}{v^2} \delta_P, \quad \text{con } \delta_P \rightarrow 0. \quad (4.18)$$

Luego se observa que O_{DSPB}^{-*} en el límite *on-shell* tiende a la unidad como $1 + O(v^{-2}) \delta_P$ para grandes velocidades. La expresión (4.18) se comparará con la predicciones de la aproximación El estudiada en la próxima sección.

4.3 Aproximaciones de onda distorsionada

En esta sección investigamos los términos *off-shell* en distintos métodos de onda distorsionada basados en el uso de la función de onda impulsiva y funciones de onda relacionadas, las cuales han sido estudiadas en la sección 1.4.

4.3.1 Aproximación impulsiva

La IA se obtiene a partir de la ecuación (1.33) utilizando como función distorsionada la función de onda impulsiva. Esta aproximación es por construcción *on-shell*^{2,35}, y por lo tanto, el propagador asociado a la versión *prior*:

$$P_{IA-}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = F(a_T, A_T) \frac{1}{\alpha_T} \quad (4.19)$$

no presenta ninguna contribución de δ_P . Similarmente, el correspondiente a la versión *post*:

$$P_{IA+}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = \frac{1}{\alpha_P} F(a_P, A_P) \quad (4.20)$$

no incluye ninguna información sobre δ_T , siendo:

$$A_P = \frac{-2\alpha_P}{(\vec{q}_2 - \vec{W}_P)^2}, \quad (4.21)$$

y $a_P = Z_P / |\vec{v} - \vec{q}_1|$.

4.3.2 Aproximación impulsiva generalizada

La teoría impulsiva generalizada (GIA)²⁵ emplea la ecuación (1.35) con funciones de onda impulsivas en los canales inicial y final, incluyendo de este modo las correctas condiciones asintóticas (dadas por la ecuación (1.46)) en ambos canales. El propagador asociado:

$$P_{GIA}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = F(a_T, A_T) \left[\frac{1}{\alpha_T} \left(1 + \delta_P \frac{1}{\alpha_P} \right) \right] F(a_P, A_P) \quad (4.22)$$

presenta una contribución lineal de δ_P . Se puede identificar en esta ecuación el factor encerrado entre corchetes con el primer orden de la expansión de $P_{B2G0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ dada por la ecuación (4.7)⁶⁰. De manera análoga, usando el potencial de distorsión final se obtiene una expresión equivalente en la que el término encerrado entre corchetes es reemplazado por el miembro derecho de la ecuación (4.8). Ambas expresiones de $P_{GIA}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ son exactamente iguales.

La comparación de los propagadores asociados a la IA y a la GIA nos lleva a pensar que si en la formulación de onda distorsionada se incluyen las correctas condiciones asintóticas coulombianas en ambos canales, la aproximación resultante contiene un término *off-shell*.

4.3.3 Aproximación eikonal impulsiva

El cálculo de la matriz de transición correspondiente a la GIA requiere la evaluación numérica de una integral seisdimensional, lo que implica un formidable esfuerzo computacional. Para colisiones asimétricas con $Z_T \gg Z_P$ en el régimen de energías altas e intermedias podemos aproximar en el canal de entrada la función de onda impulsiva por la función de onda eikonal, tal como se discutió en la sección 3.2, obteniéndose de este modo la versión *prior* de la aproximación EI. Esta teoría conserva las condiciones asintóticas coulombianas y la correcta normalización en ambos canales, y reduce el cálculo a una integración tridimensional. El propagador asociado:

$$P_{EI}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = F(a_T, A_T) \left[\frac{1}{\alpha_T} \left(1 + \delta_P \frac{1}{\gamma_P} \right) \right] F(c_P, C_P), \quad (4.23)$$

donde

$$\gamma_P = -\vec{v} \cdot (\vec{q}_2 - \vec{W}_P) + i\epsilon, \quad (4.24)$$

$$C_P = \frac{-2\gamma_P}{(\vec{q}_2 - \vec{W}_P)^2}, \quad (4.25)$$

y $c_P = Z_P/v$, tiene una estructura similar al correspondiente a la GIA, presentando también, aunque simplificada, una contribución lineal en δ_P .

Ahora procedemos a hacer un paralelo entre esta teoría y la aproximación DSPB, considerando el caso particular de una colisión muy asimétrica con $Z_T \gg Z_P$, en el límite de alta velocidad. Dado que la variable \vec{q}_2 es afectada en la ecuación (4.1) por la función $\tilde{\phi}_P^*(\vec{q}_2)$, se espera que la mayor contribución a la matriz de transición provenga del rango $|\vec{q}_2| \leq 2|\epsilon_J| \ll |\vec{W}_P|$, de manera tal que podemos evaluar γ_P alrededor de $\vec{q}_2 = 0$, dando:

$$\gamma_P(\vec{q}_2 = 0) = \vec{v} \cdot \vec{W}_P + i\varepsilon = \frac{1}{2}v^2 - \epsilon_i + \epsilon_J + i\varepsilon \sim \frac{v^2}{2}, \quad (4.26)$$

donde hemos despreciado ϵ_i y ϵ_J frente a v . Luego, vale:

$$P_{EI^-}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) \simeq F(a_T, \Lambda_T) \frac{1}{\alpha_T} \left[1 + \frac{2}{v^2} \delta_P \right]. \quad (4.27)$$

Esta expresión es similar a la forma asintótica del propagador $P_{DSPB}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$, dada por las ecuaciones (4.15) y (4.18). Se observa que los términos que dan la contribución *off-shell* en δ_P tienen el mismo signo y el mismo orden de magnitud; además, para grandes velocidades de impacto, el factor que contiene a δ_P en ambas aproximaciones tiende a la unidad como $1 + O(v^{-2})\delta_P$.

Estamos interesados en conocer cuan importantes son las contribuciones *off-shell*, considerando en particular la aproximación EI. Para ello estudiamos el proceso de captura:



y evaluamos el siguiente cociente:

$$R_{off} = \frac{\sigma_{f_i}^{EI^-} - \sigma_{f_i}^{EI^-}(on)}{\sigma_{f_i}^{EI^-}}, \quad (4.29)$$

donde $\sigma_{fi}^{E'}$ es la sección eficaz total calculada usando la expresión completa del propagador dado por la ecuación (4.23), y $\sigma_{fi}^{E'}(on)$ es la sección eficaz total correspondiente límite *on-shell*, calculada imponiendo la condición $\delta_p = 0$. Para energías de impacto del protón de 1.5, 4, 7, y 10 MeV, los resultados para R_{off} fueron 0.082, 0.145, 0.089, 0.077, respectivamente, indicando que la contribución *off-shell* es menor que el 15%.

4.4 Conclusiones

En este capítulo analizamos los propagadores correspondientes a los segundos ordenes de las series de Born conteniendo la función de Green libre y la función de Green blanco, y los asociados a distintas aproximaciones de onda distorsionada relacionadas con la aproximación impulsiva. Comparando las diferentes teorías estudiadas vemos que la mayoría de ellas concuerdan en que las contribuciones *off-shell* son lineales alrededor del límite *on-shell*.

En lo que respecta a los propagadores asociados con los métodos de onda distorsionada considerados, tienen una estructura simple compuesta de factores del tipo $F(a, A)$ que provienen de las distorsiones coulombianas en uno o en ambos canales, y de un factor que contiene la información *off-shell*. Además, cuando ambos canales poseen las correctas condiciones asintóticas coulombianas, los propagadores asociados contienen un término lineal en $\delta_{T,p}$. Sin embargo, esta conclusión no puede ser extrapolada a otras aproximaciones de onda distorsionada fuera de las estudiadas en este capítulo.

La aproximación EI incluye un factor *off-shell* que en el límite *on-shell* es similar al correspondiente a la aproximación DSPB, siendo su contribución estimada como menor al 15%. Fuera de este caso límite, el comportamiento de la aproximación DSPB es no lineal en $\delta_{T,p}$.

CAPITULO 5

DOBLE CAPTURA ELECTRONICA

La captura electrónica múltiple es un proceso muy interesante que permite estudiar la dinámica de un sistema con varios electrones durante la colisión. Sin embargo, los correspondientes experimentos a altas energías, discriminando los distintos estados electrónicos finales⁶¹, son complicados, y la teoría asociada debe encarar el problema no trivial de trabajar con más de un electrón activo. En general, para tratar estos procesos se emplea el modelo de electrón independiente (IEM), el cual consiste en descomponer el sistema de n partículas en una colección de subsistemas de tres partículas, formados por el núcleo proyectil P, el núcleo blanco T, y uno de los electrones. Cada uno de estos subsistemas se calcula con una técnica teórica apropiada, y no está permitida la transferencia de momento ni de energía entre ellos. Además, no se considera la relajación, y la correlación es totalmente despreciada, de manera que cada subsistema evoluciona en forma completamente independiente de los otros. Una derivación formal de este modelo fue hecha por McGuire y Weaver⁶², siendo empleado con éxito para tratar procesos de simple captura inducidos por iones rápidos³. Para procesos de doble captura, el IEM conduce al producto de las probabilidades de simple captura de cada uno de los electrones, y es comúnmente usado en los formalismos cuántico^{14,63,64,65} y clásico^{66,67}.

Existe una mejora del IEM, llamada modelo de eventos independientes⁶⁸, que se basa en el cálculo de la doble captura como un producto de probabilidades de simple captura, pero evalúa cada una de ellas considerando la correlación electrónica en los

estados ligados, por medio de funciones de onda de Pluvinage⁶⁸ o de interacción de configuraciones (CI)⁶⁹.

En lo que respecta a los intentos por resolver la ecuación de Schrödinger de dos electrones empleando el método de canales acoplados, se investigaron, en particular, dos clases de expansiones del estado de colisión dependiente del tiempo: la expansión en orbitales del tipo Slater^{70,71}, y la expansión en orbitales del tipo gaussiano⁷². La validez de estas aproximaciones está generalmente restringida al régimen de velocidades intermedias, a menos que la base incluya estados del continuo.

En este capítulo estudiamos la doble captura electrónica con un formalismo de onda distorsionada para dos electrones. Dentro de este marco, el primer orden, que representa un colisión en un único paso, es mucho más pequeño que el término de segundo orden⁶⁸, por lo que lo hemos despreciado. Nos concentramos entonces en el término de segundo orden, que involucra un proceso de dos pasos, el cual se calculó usando un función de Green *on-shell* representando un electrón en el blanco y el otro en el proyectil. De esta forma, la doble captura puede ser vista como dos procesos consecutivos de simple captura, interviniendo en cada uno de ellos ambos electrones. El IEM se puede obtener a partir de este modelo agregando varias aproximaciones adicionales.

La teoría general correspondiente al modelo considerado se presenta en la sección 5.1, y en la sección 5.2 se calcula dicha teoría empleando la aproximación impulsiva para evaluar las matrices de transición de simple captura involucradas. Para describir los estados electrónicos ligados consideramos una combinación lineal de productos de dos orbitales de una partícula, los cuales pueden provenir de funciones de onda de interacción de configuraciones (CI), de Hartree-Fock (HIF), o variacionales. Además, incluimos la repulsión electrónica durante la colisión, en primer orden como un potencial

perturbativo, y consideramos también la relajación. Los valores de secciones eficaces totales son presentados en la sección 5.3. En las subsecciones 5.3.1 y 5.3.2 estudiamos el caso simétrico: $\text{He}^{++} + \text{He}(1s^2) \longrightarrow \text{He}(1s^2, 1s2s, 1s2p) + \text{He}^{++}$, y comparamos los resultados con los experimentos y con otros métodos teóricos; y en la subsección 5.3.3 consideramos los sistemas asimétricos: $X^{Z+} + \text{He}(1s^2) \longrightarrow X^{(Z-2)+}(1s^2) + \text{He}^{++}$, $Z = 3, 5$. En la sección 5.4 mostramos secciones eficaces diferenciales para el caso simétrico anterior. Las conclusiones de este capítulo están contenidas en la sección 5.5.

5.1 Teoría

Consideramos la colisión de un núcleo proyectil P (de masa M_P y carga Z_P) con un átomo similar al helio, compuesto por un núcleo blanco T (de masa M_T y carga Z_T), y dos electrones (e_1 y e_2). Los sistemas coordenados son mostrados en la Figura 15, y las correspondientes transformaciones son listadas en el apéndice C. Las masas reducidas ν_X , μ_{X1} , y μ_{X2} , están asociadas a las coordenadas \vec{R}_X , \vec{r}_{X1} , y \vec{r}_{X2} , respectivamente, con $X=T$ o P , y la masa reducida ν está asociada a la coordenada \vec{R} . El potencial V_{Xj} es el potencial coulombiano entre el núcleo X y el electrón j ($j=1,2$), y $V_{12} = 1/r_{12}$ es la repulsión electrónica. Como se consideró en la sección 1.5, el potencial internuclear será anulado, y se reintroducirá como un factor de fase cuando se evalúen secciones eficaces diferenciales.

El Hamiltoniano total H asociado al sistema, en el centro de masa, es:

$$H = -\frac{1}{2\nu_T} \nabla_{\vec{R}_T}^2 + H_T + V_{P1} + V_{P2} , \quad (5.1)$$

siendo H_T el Hamiltoniano atómico:

$$H_T = -\frac{1}{2\mu_{T1}} \nabla_{\vec{r}_{T1}}^2 - \frac{1}{2\mu_{T2}} \nabla_{\vec{r}_{T2}}^2 + V_{T1} + V_{T2} + V_{12} . \quad (5.2)$$

En el formalismo de onda distorsionada, la aproximación de segundo orden de la matriz de transición está dada por la ecuación (1.36), y se expresa como:

$$T_{fi} = T_{fi}^{(1)} + T_{fi}^{(2)}, \quad (5.3)$$

donde:

$$T_{fi}^{(1)} = \langle \chi_f^- | W_f^\dagger | \chi_i^+ \rangle = \langle \chi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle \quad (5.4)$$

es el término de primer orden, y

$$T_{fi}^{(2)} = \langle \chi_f^- | W_f^\dagger G^+(E) W_i | \chi_i^+ \rangle \quad (5.5)$$

es el término que corresponde al segundo orden, siendo $G^+(E)$ una aproximación del operador de Green total, y χ_i^+ y χ_f^- las funciones de onda distorsionadas inicial y final, respectivamente. Como vimos en la sección 1.3.3, estas funciones satisfacen:

$$(E - H \pm i\varepsilon)\chi_j^\pm = -W_j\chi_j^\pm, \quad j = i, f, \quad \varepsilon \rightarrow 0^+, \quad (5.6)$$

donde E es la energía total del sistema. El primer orden, $T_{fi}^{(1)}$, representa un mecanismo por el cual los dos electrones saltan juntos desde el blanco hasta el proyectil, en un sólo paso^{68,73}. Crothers y McCarroll⁶⁸ calcularon este término, y concluyeron que era despreciable frente al mecanismo de dos pasos (un orden de magnitud más pequeño a 1.4 MeV en la colisión de He^{++} sobre He). Por lo tanto, no estudiaremos este orden, y sólo nos concentraremos en el término de segundo orden.

En la ecuación (5.5) utilizamos como operador de Green $G^+(E)$ un operador de Green $G_N^+(E)$, que representa un electrón en el blanco y el otro en el proyectil, con lo cual podemos aproximar el término de segundo orden como:

$$T_{fi}^{(2)} = \sum_n \langle \chi_f^- | W_f^\dagger | \xi_n \rangle \frac{1}{(E - E_n + i\varepsilon)} \langle \xi_n | W_i | \chi_i^+ \rangle, \quad (5.7)$$

donde ξ_n son autofunciones de $G_N^+(E)$, E_n es la autoenergía, y el subíndice n involucra también el estado de spin (el cual permanece inalterado durante la colisión) y los

estados del continuo. Las funciones de onda ξ_n deberían formar una base completa, correctamente ortonormalizada y simetrizada.

La principal aproximación efectuada para calcular este segundo orden es considerar en la ecuación (5.7) sólo la contribución *on-shell* (o sea, *sobre la capa de energía*), por medio de la igualdad:

$$\frac{1}{(E - E_n + i\varepsilon)} = PP\left(\frac{1}{E - E_n}\right) - i\pi\delta(E - E_n), \quad (5.8)$$

donde despreciamos la parte principal (*PP*). Con respecto a esta aproximación debemos remarcar que, como ha puntualizado McGuire⁷⁴, la *PP* juega un papel importante en doble excitación cuando se usan funciones de onda de Born⁷⁵. Sin embargo, este no es nuestro caso, dado que pensamos utilizar funciones de onda impulsivas, las cuales ya contienen la *PP* del correspondiente propagador, por lo que esperamos que la contribución de la *PP*, despreciada en la ecuación (5.8), no sea muy relevante. Por otra parte, el cálculo exacto del segundo orden completo, incluyendo la parte principal, involucra una formidable tarea numérica que no podemos actualmente encarar. La contribución *on-shell* provee una simple representación física: los estados intermedios satisfacen la conservación de la energía. Luego, con esta suposición, podemos usar la simplificación introducida por la función delta de Dirac, y $T_{fi}^{(2)}$ se aproxima como:

$$T_{fi}^{(2)} = -\frac{i\pi}{v} \sum_n K_n^2 \int_0^{2\pi} d\varphi_n \int_0^\pi d\theta_n \sin\theta_n T_{fn}^- T_{ni}^+, \quad (5.9)$$

donde

$$K_n = \sqrt{2\nu \left(\frac{K_i^2}{2\nu_T} + \epsilon_i - \epsilon_n \right)}, \quad (5.10)$$

siendo \vec{v} la velocidad de impacto, θ_n el ángulo entre el momento inicial del proyectil con respecto al blanco, \vec{K}_i , y el momento intermedio, \vec{K}_n , φ_n el ángulo azimutal, y ϵ_i y ϵ_n

las energías de ligadura electrónicas inicial e intermedia, respectivamente, considerando los dos electrones. En la ecuación (5.9):

$$T_{fn}^- = \langle \chi_f^- | W_f^\dagger | \xi_n \rangle, \quad T_{ni}^+ = \langle \xi_n | W_i | \chi_i^+ \rangle, \quad (5.11)$$

son las matrices de transición correspondientes a los procesos en los que un electrón es capturado y el otro se relaja a cualquier estado.

Cualquiera sean las funciones distorsionadas empleadas, la contribución de este segundo orden a la sección eficaz total está dada por

$$\sigma_{fi}^{(2)} = \frac{(2\pi)^6}{4v^4} \int d\vec{\eta} \left| \sum_n \int d\vec{\eta}_n T_{fn}^-(\vec{\eta} - \vec{\eta}_n) T_{ni}^+(\vec{\eta}_n) \right|^2, \quad (5.12)$$

donde los argumentos de las matrices de transición involucradas denotan los correspondientes momentos transversales:

$$\vec{\eta} = K_f \sin \theta (\cos \varphi, \sin \varphi, 0), \quad \vec{\eta}_n = K_n \sin \theta_n (\cos \varphi_n, \sin \varphi_n, 0), \quad (5.13)$$

y K_f , θ y φ son el momento relativo final, y sus correspondientes ángulo polar y ángulo azimutal, respectivamente. Introduciendo las transformadas de Fourier:

$$T_{ba}(\vec{\eta}) = \frac{v}{(2\pi)^3} \int d\vec{\rho} a_{ba}(\vec{\rho}) e^{-i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}}, \quad (5.14)$$

donde $\vec{\rho}$ es el parámetro de impacto, la sección eficaz total se expresa en función de las amplitudes de transición como:

$$\sigma_{fi}^{(2)} = \int d\vec{\rho} |\Lambda_{fi}(\vec{\rho})|^2, \quad (5.15)$$

donde

$$\Lambda_{fi}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{2} \sum_n a_{fn}^-(\vec{\rho}) a_{ni}^+(\vec{\rho}). \quad (5.16)$$

Aunque la expresión (5.15) no parece familiar, es posible obtener a partir de ella el IEM, eliminando \sum_n , considerando estados *congelados* (o sea, sin relajación), y despreciando la correlación mediante el reemplazo de las amplitudes de transición a_{ba}^\pm por

las amplitudes de transición de simple captura. Además, si se emplean aproximaciones simétricas, tales como el primer orden de Born o la aproximación de onda distorsionada del continuo (CDW) ⁶⁴, en las que a_{ba}^+ coincide con a_{ba}^- , se obtiene el conocido producto de probabilidades.

El factor $i/2$ en la ecuación (5.16) produce un coeficiente 4^{-1} a nivel de la sección eficaz total, el cual es total o parcialmente removido de acuerdo a la simetrización de las funciones de onda. A nivel de la matriz de transición podemos encontrar interferencia entre los diferentes *caminos* que conectan el estado electrónico inicial $i = \{i_a, i_b\}$ con el estado electrónico final $f = \{f_c, f_d\}$, pasando a través de los estados intermedios $n = \{n_T, n_P\}$. Podemos identificar cuatro posibilidades distintas, que son: un electrón hace el *camino* $i_a \rightarrow n_T \rightarrow f_c$, y el otro hace el *camino* $i_b \rightarrow n_P \rightarrow f_d$; o bien, $i_a \rightarrow n_P \rightarrow f_c$, y $i_b \rightarrow n_T \rightarrow f_d$; o $i_a \rightarrow n_P \rightarrow f_d$, y $i_b \rightarrow n_T \rightarrow f_c$; o $i_a \rightarrow n_T \rightarrow f_d$, y $i_b \rightarrow n_P \rightarrow f_c$. En el caso particular en que $i_a = i_b$, y $f_c = f_d$, los cuatro *caminos* son iguales y sus contribuciones se suman coherentemente, de manera tal que el factor 4^{-1} es totalmente removido. En la Figura 16 mostramos una representación esquemática de este caso: en el primer paso, un electrón (llamado activo) es capturado, y el otro (el pasivo) se relaja; en el segundo paso los papeles se intercambian.

5.2 La aproximación impulsiva

Siguiendo la derivación de Coleman¹⁰ presentada en la sección 1.4, la función de onda impulsiva inicial para un sistema con dos electrones, considerando el estado de espín singlete, es:

$$\chi_i^I = \frac{(1 + P_{12})}{\sqrt{2}} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{g}_1 \int d\vec{g}_2 \tilde{\phi}_{i_a}(\vec{g}_1) \tilde{\phi}_{i_b}(\vec{g}_2) \phi_P^+(\vec{g}_1 - \vec{v}, \vec{r}_{P1}) \phi_P^+(\vec{g}_2 - \vec{v}, \vec{r}_{P2}) \quad (5.17)$$

$$\exp \left[i \left(\mu_{T1} \mu_{T2} \vec{K}_i + \vec{g}_1 + \vec{g}_2 \right) \cdot \vec{R}_P \right],$$

donde $\phi_C^\pm(\vec{k}, \vec{r})$, con $C=T, P$, es el estado coulombiano del continuo definido en la ecuación (3.5). Las funciones ϕ_α ($\alpha = i_a, i_b$) son orbitales iniciales de un electrón. El producto $\phi_{i_a}(\vec{r}_{T1}) \phi_{i_b}(\vec{r}_{T2})$ representa un término de una expansión CI o de HF de la función de onda electrónica inicial total $\Phi_i^{(e)}(\vec{r}_{T1}, \vec{r}_{T2})$. El operador permutación P_{12} intercambia los electrones 1 y 2, y la tilde indica la transformada de Fourier. De la ecuación (5.17) se desprende que los electrones están en el continuo del proyectil.

En forma equivalente, para el canal final la función de onda impulsiva para un sistema con dos electrones es:

$$\chi_f' = \frac{(1 + P_{12})}{\sqrt{2}} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{g}_1 \int d\vec{g}_2 \tilde{\phi}_{f_c}(\vec{g}_1) \tilde{\phi}_{f_d}(\vec{g}_2) \phi_T^-(\vec{g}_1 + \vec{v}, \vec{r}_{T1}) \phi_T^-(\vec{g}_2 + \vec{v}, \vec{r}_{T2}) \quad (5.18)$$

$$\exp \left[i \left(\mu_{P1} \mu_{P2} \vec{K}_f - \vec{g}_1 - \vec{g}_2 \right) \cdot \vec{R}_T \right],$$

donde ϕ_β ($\beta = f_c, f_d$) son orbitales finales de un electrón. Otra vez, el producto $\phi_{f_c}(\vec{r}_{P1}) \phi_{f_d}(\vec{r}_{P2})$ representa un término de una expansión CI o de HF de la función de onda electrónica final total $\Phi_f^{(e)}(\vec{r}_{P1}, \vec{r}_{P2})$.

En esta sección usamos las funciones de onda impulsivas χ_i' y χ_f' (dadas por las ecuaciones (5.17) y (5.18)) como funciones distorsionadas inicial y final, y para los estados intermedios proponemos las siguientes funciones de onda de Born:

$$\xi_n = \frac{(1 + P_{12})}{\sqrt{2} N_n} \xi_n', \quad (5.19)$$

con

$$\xi_n' = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{K}_n \cdot \vec{R}} \phi_{n_T}(\vec{r}_{T1}) \phi_{n_P}(\vec{r}_{P2}), \quad (5.20)$$

donde ϕ_{n_T} y ϕ_{n_P} son estados ligados de un electrón, en el núcleo proyectil y en el núcleo blanco, respectivamente. La correspondiente energía de ligadura electrónica ϵ_n es la suma de las energías electrónicas individuales, y asumimos que la base propuesta satisface la ortonormalización con $N_n = 1$.

Como el elemento de matriz T_{ni}^+ es calculado sobre la capa de energía, en la ecuación (5.11) es posible usar W_i o el potencial intermedio⁷⁶ V_n , definido a partir de $(H - E) \xi_n = V_n \xi_n$; por lo tanto:

$$T_{ni}^+ = \langle \xi_n | W_i | \chi_i^I \rangle = \langle \xi_n | V_n | \chi_i^I \rangle = A_{ni}^{(1)+} + A_{ni}^{(2)+} + A_{ni}^{(3)+}, \quad (5.21)$$

donde

$$\begin{aligned} A_{ni}^{(1)+} &= \sqrt{2} \langle \xi_n' | V_{T2} | \chi_i^I \rangle, \\ A_{ni}^{(2)+} &= \sqrt{2} \langle \xi_n' | V_{12} | \chi_i^I \rangle, \\ A_{ni}^{(3)+} &= \sqrt{2} \langle \xi_n' | V_{P1} | \chi_i^I \rangle. \end{aligned} \quad (5.22)$$

La repulsión electrónica es una perturbación genuina del estado intermedio, y dado que los electrones en dicho estado están en diferentes centros, decrece cuando los núcleos se separan. Los términos anteriores se expresan como:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_{ni}^{(1)+} \\ A_{ni}^{(2)+} \end{bmatrix} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{g}_2 \int d\vec{g} \tilde{\phi}_{i_b}(\vec{g}_2) L_{n_p}^{D+}(\vec{g}_2 - \vec{v}, \vec{U}_{P2} - \vec{g}) \begin{bmatrix} \tilde{V}_{T2}(\vec{g} - \vec{g}_2) C_{n_T, i_a}^{(1)+}(\vec{g}) \\ \tilde{V}_{12}(\vec{g}_2 - \vec{g}) C_{n_T, i_a}^{(2)+}(\vec{g}, \vec{g}_2) \end{bmatrix} \\ &+ ch(i_a \leftrightarrow i_b), \end{aligned}$$

$$A_{ni}^{(3)+} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{g}_2 \tilde{\phi}_{i_b}(\vec{g}_2) L_{n_p}^{D+}(\vec{g}_2 - \vec{v}, \vec{U}_{P2} - \vec{g}_2) C_{n_T, i_a}^{(3)+}(\vec{g}_2) + ch(i_a \leftrightarrow i_b), \quad (5.23)$$

siendo

$$\begin{bmatrix} C_{n_T, i_a}^{(1)+}(\vec{g}) \\ C_{n_T, i_a}^{(2)+}(\vec{g}, \vec{g}_2) \end{bmatrix} = \int d\vec{g}_1 \tilde{\phi}_{i_a}(\vec{g}_1) I_{P1}^{D+}(\vec{g}_1 - \vec{v}, \vec{U}_{P1} + \vec{g}) \begin{bmatrix} \tilde{\phi}_{n_T}^*(\vec{U}_{T1} - \vec{g}_1 - \vec{g}) \\ \tilde{\phi}_{n_T}^*(\vec{U}_{T1} - \vec{g}_1 - \vec{g}_2) \end{bmatrix}, \quad (5.24)$$

$$C_{n_T, i_a}^{(3)+}(\vec{g}_2) = \int d\vec{g}_1 \tilde{\phi}_{i_a}(\vec{g}_1) J_{P1}^{D+}(\vec{g}_1 - \vec{v}, \vec{U}_{P1} + \vec{g}_2) \tilde{\phi}_{n_T}^*(\vec{U}_{T1} - \vec{g}_1 - \vec{g}_2),$$

donde se utilizan las integrales de Nordsieck, definidas en las ecuaciones (3.8) y (3.9).

Los vectores momento transferido \vec{U}_{T1} , \vec{U}_{P1} , \vec{U}_{P2} están definidos en el apéndice C, y $ch(i_a \leftrightarrow i_b)$ representa un término similar intercambiando i_a con i_b .

Cada primer término de (5.23) puede ser descrito físicamente como sigue: el primer término de $A_{ni}^{(1)+}$ representa la captura del electrón e_2 (llamado activo) por interacción con el proyectil, mientras que el electrón e_1 (llamado pasivo) se relaja por simple solapamiento y finaliza en el campo coulombiano de la carga nuclear Z_T . Dado que usamos la aproximación impulsiva, el elemento de simple captura $A_{ni}^{(1)+}$ incluye procesos de dispersión múltiple³⁵. El primer término del elemento $A_{ni}^{(2)+}$ contiene el mismo proceso pero involucrando la repulsión electrónica, en lugar de la interacción con el proyectil. Por último, el primer término del elemento $A_{ni}^{(3)+}$ describe la captura del electrón e_2 por interacción del proyectil con e_1 , y este elemento es nulo en la aproximación impulsiva, debido a la ortogonalidad entre los autoestados ligado y del continuo del proyectil (en este caso $L_{nP}^{D+} = 0$). Los segundos términos de estos elementos, caracterizados por $ch(i_a \leftrightarrow i_b)$, intercambian los papeles de los electrones e_1 y e_2 .

Los cálculos son muy complejos porque cada elemento involucra una integral nueve dimensional. Sin embargo, se puede obtener una simplificación sustancial si se reemplaza la interacción coulombiana del proyectil con el electrón pasivo por su forma asintótica. Esto es equivalente a aproximar:

$$D_P^+(\vec{g}_1 - \vec{v}, \vec{r}_{P1}) \sim \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln (vR_T - \vec{v} \cdot \vec{R}_T) \right], \quad (5.25)$$

en la ecuación (5.24) para calcular I_{P1}^{D+} . Debe notarse que aún se mantiene en forma completa la interacción coulombiana con el electrón activo. El factor de fase logarítmico dado por la ecuación (5.25) será eliminado y luego se adicionará al factor de fase proveniente de la interacción internuclear, para el cálculo de secciones eficaces diferenciales en la sección 5.4. Con esta simplificación $C_{nT,i_a}^{(1,2)+}$ se reduce a:

$$\begin{bmatrix} C_{nT,i_a}^{(1)+}(\vec{g}) \\ C_{nT,i_a}^{(2)+}(\vec{g}, \vec{g}_2) \end{bmatrix} \sim (2\pi)^{\frac{3}{2}} \delta(\vec{g} + \vec{U}_{P1}) \begin{bmatrix} K_{nT,i_a}^{(1)+} \\ K_{nT,i_a}^{(2)+} \end{bmatrix}, \quad (5.26)$$

con

$$K_{nT,i_a}^{(1)+} = S_{nT,i_a}(0), \quad K_{nT,i_a}^{(2)+} = S_{nT,i_a}(\vec{g}_2 - \vec{U}_{T1}), \quad (5.27)$$

donde

$$S_{\alpha,\beta}(\vec{u}) = \int d\vec{r} \phi_{\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{\beta}(\vec{r}) e^{i\vec{u}\cdot\vec{r}}, \quad (5.28)$$

se puede evaluar en forma analítica para cualquier estado. Luego, la expresión a la que se llega es:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_{ni}^{(1)+} \\ A_{ni}^{(2)+} \end{bmatrix} &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{g}_2 \tilde{\phi}_{i_b}(\vec{g}_2) L_{n_P}^{D+}(\vec{g}_2 - \vec{v}, \vec{U}_{P_2} + \vec{U}_{P_1}) \begin{bmatrix} \tilde{V}_{T_2}(-\vec{g}_2 - \vec{U}_{P_1}) K_{n_T, i_a}^{(1)+} \\ \tilde{V}_{12}(\vec{g}_2 + \vec{U}_{P_1}) K_{n_T, i_a}^{(2)+} \end{bmatrix} \\ &+ ch(i_a \leftrightarrow i_b). \end{aligned} \quad (5.29)$$

En forma similar se obtiene:

$$T_{fn}^- = \langle \chi_f' | W_f^\dagger | \xi_n \rangle = A_{fn}^{(1)-} + A_{fn}^{(2)-}, \quad (5.30)$$

con

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_{fn}^{(1)-} \\ A_{fn}^{(2)-} \end{bmatrix} &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{g}_1 \tilde{\phi}_{f_c}^*(-\vec{g}_1) L_{n_T}^{D-}(\vec{g}_1 + \vec{v}, -\vec{P}_{T_1}) \begin{bmatrix} \tilde{V}_{P_1}(\vec{g}_1 + \vec{P}_{P_1}) K_{f_d, n_P}^{(1)-} \\ \tilde{V}_{12}(\vec{g}_1 + \vec{P}_{P_1}) K_{f_d, n_P}^{(2)-} \end{bmatrix} \\ &+ ch(f_c \leftrightarrow f_d), \end{aligned} \quad (5.31)$$

donde

$$K_{f_d, n_P}^{(1)-} = S_{f_d, n_P}(0), \quad K_{f_d, n_P}^{(2)-} = S_{f_d, n_P}(-\vec{g}_1 - \vec{P}_{P_1}), \quad (5.32)$$

y los vectores de momento transferido \vec{P}_{T_1} , \vec{P}_{P_1} están definidos en el apéndice C.

$K_{\alpha,\beta}^{(1)\pm}$ son simples factores de relajación, mientras que $K_{\alpha,\beta}^{(2)\pm}$ son funciones de relajación que dependen de la variable de integración. De las ecuación (5.29) y (5.31) se desprende que $A_{ni}^{(1)+}$ y $A_{fn}^{(1)-}$ son equivalentes a la suma de dos términos, conteniendo cada uno de ellos el producto del elemento de matriz de transición para simple captura, evaluado con la aproximación impulsiva, por los factores de relajación $K_{\alpha,\beta}^{(1)\pm}$. A su vez, $A_{ni}^{(2)+}$ y $A_{fn}^{(2)-}$ representan la contribución del proceso de simple captura involucrando la repulsión electrónica, e incluyen en la integración las funciones de relajación $K_{\alpha,\beta}^{(2)\pm}$.

Además de la relajación, la presencia de los términos $A_{ni}^{(2)+}$ y $A_{fn}^{(2)-}$ diferencia estos cálculos de los del IEM.

Finalmente, usando la ecuación (5.9), la matriz de transición se puede escribir como:

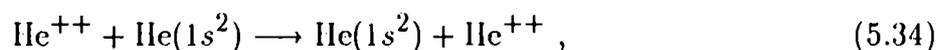
$$T_{fi}^{(2)} = -\frac{i\pi}{v} \sum_n \int d\vec{\eta}_n \left[A_{fn}^{(1)-} + A_{fn}^{(2)-} \right] \left[A_{ni}^{(1)+} + A_{ni}^{(2)+} \right]. \quad (5.33)$$

5.3 Secciones eficaces totales

Para obtener una sección eficaz total de segundo orden se requiere la evaluación de una integral cincodimensional, esto es: una integral tridimensional para obtener T_{ba}^{\pm} , otra integración para obtener $a_{ba}^{\pm}(\vec{\rho})$, y una integración final sobre los parámetros de impacto. De manera alternativa, se pueden integrar directamente las matrices de transición, usando la ecuación (5.12). Los errores numéricos se estimaron alrededor del 3 %.

5.3.1 Colisión simétrica resonante

Para estudiar la reacción simétrica y resonante:



usamos dos descripciones distintas del estado electrónico fundamental del helio, con el objeto de estudiar la sensibilidad del modelo frente el grado de correlación contenida en los estados ligados inicial y final. Las funciones de onda utilizadas fueron las funciones de CI y las funciones de HF Clementi-Roetti⁴¹.

a- El uso de funciones de onda de CI

Para describir el estado fundamental del helio construimos la siguiente función de onda de CI:

$$|\Phi^{(CI)}\rangle = [0.9327|\Phi_1\rangle - 0.3536|\Phi_2\rangle - 0.0339|\Phi_3\rangle - 0.0619|\Phi_4\rangle] \otimes |S = 0, M_S = 0\rangle, \quad (5.35)$$

donde

$$\begin{aligned} |\Phi_1\rangle &= |1s^2\rangle = |\phi_{1s}, \phi_{1s}\rangle, \\ |\Phi_2\rangle &= |1s, 2s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_{1s}, \phi_{2s}\rangle + |\phi_{2s}, \phi_{1s}\rangle], \\ |\Phi_3\rangle &= |1s, 3s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_{1s}, \phi_{3s}\rangle + |\phi_{3s}, \phi_{1s}\rangle], \\ |\Phi_4\rangle &= |2p, 2p\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|\phi_{2p0}, \phi_{2p0}\rangle - |\phi_{2p1}, \phi_{2p-1}\rangle - |\phi_{2p-1}, \phi_{2p1}\rangle], \end{aligned} \quad (5.36)$$

y $|S = 0, M_S = 0\rangle$ corresponde al estado de spín. En la representación \vec{r} cada vector de la base se expresa como: $\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \phi_{nlm}, \phi_{n'l'm'} \rangle = \phi_{nlm}(\vec{r}_1) \phi_{n'l'm'}(\vec{r}_2)$, siendo este el producto de orbitales de una partícula que hemos considerado en la sección anterior. La parte radial de $\phi_{nlm}(\vec{r})$, denotada como $R_{nl}(r)$, puede escribirse en términos de los orbitales de Slater $S_{nl}(Z|r)$, donde Z es el coeficiente exponencial o carga efectiva, como:

$$\begin{aligned} R_{1s}(r) &= S_{1s}(2.153|r), \\ R_{2s}(r) &= 0.3992S_{1s}(2.153|r) + 1.331S_{1s}(1.034|r) - 2.305S_{2s}(1.424|r), \\ R_{3s}(r) &= 0.4275S_{1s}(2.153|r) + 1.312S_{1s}(1.034|r) - 2.272S_{2s}(1.424|r) \\ &\quad + 1.991S_{1s}(0.4738|r) - 6.896S_{2s}(0.6342|r) + 6.295S_{3s}(0.9154|r), \\ R_{2p}(r) &= S_{2p}(2.451|r). \end{aligned} \quad (5.37)$$

La presente función de onda de CI tiene una estructura similar a la usada por Fritsch y Lin⁷¹, pero con la diferencia de que las cargas efectivas de los orbitales de Slater en la ecuación (5.37), se optimizaron minimizando la energía por medio del programa ATMOLCI⁷⁷. La energía de esta función de onda CI es -2.873, siendo levemente mejor que la energía de la función de HF⁴¹ (-2.862). En el modelo considerado, debemos ser

económicamente precisos para describir los estados electrónicos inicial y final, debido a que el número de elementos $A_{ab}^{(1,2)\pm}$ que deben calcularse es proporcional al número de orbitales de Slater contenidos en la función de onda, y cada uno de estos elementos involucra una integral tridimensional.

La sección eficaz total para la reacción (5.34) es mostrada en la Figura 17, junto con los experimentos de McDaniel y colab.⁷⁸, DuBois⁷⁹, y Castro Faria y colab.⁸⁰. Como estado intermedio consideramos sólo el estado fundamental alrededor de cada centro. La concordancia con los datos experimentales es muy buena.

b- El uso de funciones de onda de HF

En esta sección, usamos la función de onda 5-z de HF Clementi-Roetti⁴¹ para describir el estado fundamental del helio. Consideramos como estado intermedio sólo el formado por estados 1s alrededor de cada centro, y encontramos que $K^{(1)\pm} = 0.982$, indicando que la relajación a estados intermedios superiores ($n_T, n_P \geq 2$) representa menos que el 4 % para cada centro. Para la reacción (5.34) la diferencia entre los resultados obtenidos usando funciones de onda de HF y de CI, es menor que la incerteza numérica del 3 %. Por lo tanto, teniendo en cuenta las limitaciones de la función de onda de CI empleada, la correlación en el estado fundamental (llamada también correlación estática) parece no ser relevante, al menos para el presente caso. Notemos que en este formalismo, también se incluye la repulsión electrónica como un primer orden perturbativo durante la colisión (lo cual se denomina correlación dinámica). Como consecuencia de este resultado, usamos funciones de onda de HF para evaluar las siguientes reacciones, las cuales involucran procesos de captura al estado fundamental y a estados simplemente excitados. Sin embargo, para el cálculo de captura a estados doblemente excitados es necesario emplear funciones de onda de CI muy precisas, ya que la correlación estática desempeña en estos casos un papel importante.

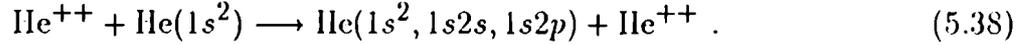
En la Tabla se comparan nuestros resultados con los de Crothers y McCarroll⁶⁸ (columna C-Mc), calculados con la función de onda electrónica de Pluvinage, la cual incluye la correlación. La similitud de los valores es una nueva indicación de que el uso de orbitales de HF es apropiado, aún cuando ambos métodos teóricos son diferentes. También se presentan los resultados de Gayet y colab.⁶⁴, calculados con la aproximación CDW en el IEM sin (columna IEM-CDW (i)) y con relajación (columna IEM-CDW (ii)), y usando el mismo estado ligado de HF.

Es interesante también comparar nuestros cálculos con los del IEM evaluado empleando el mismo método teórico, es decir, la aproximación impulsiva. Para ello calculamos las amplitudes de transición correspondientes al sistema de un electrón utilizando la aproximación impulsiva, y procedimos como en el caso (i) of Gayet y colab.⁶⁴. Los valores, mostrados en la Tabla (columna IEM-IA), son muy similares a los del IEM-CDW(i)⁶⁴. Las diferencias entre los resultados del IEM y los del modelo de dos electrones que hemos considerado están basadas en la presencia del término $1/r_{12}$ (correlación dinámica), y no en el uso de elaboradas funciones de onda electrónicas tales como las de CI (correlación estática).

El límite de alta energía de la sección eficaz total fue obtenido numéricamente en el rango de velocidades 10-15 como v^{-20} , en concordancia con el resultado de McGuire⁸¹. Esto puede ser una indicación de que el proceso de *shakeover* analizado por McGuire, está incluido en nuestro modelo a través de los términos $A_{fn}^{(2)-} A_{ni}^{(1)+}$ y $A_{fn}^{(1)-} A_{ni}^{(2)+}$. Deberíamos notar que usando el IEM, y despreciando los términos de doble dispersión (aquellos que conducen a v^{-11} en simple captura), la sección eficaz tiende como^{81,73} $Z_T^{10} Z_P^{10} v^{-22}$. Nosotros no estamos seguros de que el límite de alta energía haya sido ya alcanzado en nuestros resultados, a las velocidades consideradas.

5.3.2 Colisión simétrica no resonante

En esta sección estamos interesados en el siguiente proceso de doble captura:



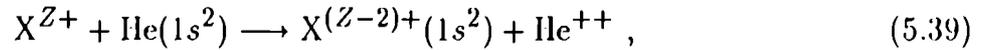
para una energía de impacto igual a 180 KeV , para la cual hay datos experimentales. Nuevamente, representamos el estado ligado inicial con la función de onda 5-z HF de Clementi-Roetti⁴¹, y los estados finales se describieron con funciones de onda variacionales⁸².

Obtuvimos secciones eficaces totales, cuyos valores estado a estado, fueron 5.7, 1.8 y $0.97 \times 10^{-17} \text{cm}^2$, para las transiciones $1s^2 \rightarrow 1s^2$, $1s^2 \rightarrow 1s2s$ y $1s^2 \rightarrow 1s2p$, respectivamente. Luego, la sección eficaz total obtenida fue $8.5 \times 10^{-17} \text{cm}^2$, concordando razonablemente bien con el valor experimental⁸³, que está alrededor de $6.20 \times 10^{-17} \text{cm}^2$.

Para este caso estudiamos también la influencia de los estados intermedios. Para la doble captura $1s^2 \rightarrow 1s2s$ encontramos que la principal contribución proviene de los estados intermedios $(n_T = 1s, n_P = 2s)$ y $(n_T = 1s, n_P = 1s)$, siendo sus respectivas contribuciones individuales ⁸⁴ iguales a 4.5 y $4.6 \times 10^{-18} \text{cm}^2$. Se observó que las contribuciones de otros estados intermedios tales como $(n_T = 2s, n_P = 1s)$ y $(n_T = 2s, n_P = 2s)$ son comparativamente pequeñas. Para la transición $1s^2 \rightarrow 1s2p$ analizamos la influencia de cinco estados intermedios, incluyendo la capa $n = 1$ alrededor del blanco y las capas $n = 1, 2$ alrededor del proyectil. De manera similar a las transiciones anteriores, hallamos que los estados $(n_T = 1s, n_P = 2p)$ y $(n_T = 1s, n_P = 1s)$ son los dominantes, y que las contribuciones de los otros estados intermedios son pequeñas. Por lo tanto, para el presente sistema concluimos que los estados intermedios más relevantes son los que corresponden al estado final, y que los otros estados, como se ha hecho en la subsección previa, se pueden descartar.

5.3.3 Colisiones asimétricas

En la Figura 18 mostramos la doble captura por iones multicargados sobre helio:



y comparamos los resultados con los datos disponibles^{85,86}. Para el estado electrónico inicial usamos la función de onda 5-z IIF de Clementi-Roetti⁴¹, mientras que para el estado final empleamos la función 3-z de IIF de la serie iso-electrónica al He(¹S) (Ref. 41). En general, nuestra teoría reproduce los experimentos. Para la colisión de B⁵⁺, la concordancia con los datos es mejor que la esperada si tenemos en cuenta que no hemos considerado la captura a estados excitados, la cual debería incrementar la sección eficaz. Por otra parte, este incremento debería mejorar los resultados de Li³⁺.

5.4 Secciones eficaces diferenciales

La sección eficaz diferencial es simplemente:

$$\frac{d\sigma_{fi}^{(2)}}{d\Omega} = \frac{K_f^2}{(2\pi)^2} \left| \int d\vec{\rho} \rho^{i2\lambda} \Lambda_{if}(\vec{\rho}) e^{-i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} \right|^2, \quad (5.40)$$

donde λ es el parámetro coulombiano de la interacción internuclear. En principio, de acuerdo a lo expuesto en la sección 1.5, λ debería ser $Z_T Z_P / v$; sin embargo, para ser consistente con la aproximación efectuada (ver ecuación (5.25)), adicionamos la fase asintótica correspondiente al electrón pasivo, dando $\lambda = (Z_T - 1)Z_P / v$. La sección eficaz diferencial para el caso simétrico ${}^3\text{He}^{++} + {}^4\text{He}(1s^2)$ se grafica en la Figura 19, considerando la captura a los estados $1s^2$, $1s2s$ y $1s2p$ para una energía de impacto de 60 KeV /amu . La teoría no sólo concuerda con los experimentos⁸⁷, sino también con los cálculos del método de trayectoria clásica de Montecarlo⁸³.

El caso que tratamos corresponde a un sistema simétrico, $Z_T = Z_P = 2$; por lo tanto, el parámetro coulombiano en el canal inicial coincide con el del canal final, esto

es, $(Z_T - 1)Z_P/v = Z_T(Z_P - 1)/v = 2/v$. Este hecho nos permite construir un valor común de λ . Sin embargo, en un caso asimétrico no es evidente el uso de un único parámetro, y el problema debería resolverse manteniendo el factor de fase del electrón pasivo dado por la ecuación (5.25) a lo largo de todo el cálculo.

5.5 Conclusiones

La doble captura se ha estudiado como un segundo orden en el formalismo de onda distorsionada. Este segundo orden representa el proceso doble como dos transiciones consecutivas de simple captura, involucrando la relajación y la cascada intermedia, y se calculó utilizando la aproximación impulsiva. En este modelo, y para la doble captura $1s^2 \rightarrow 1s^2$, encontramos que no hay diferencias apreciables entre el uso de funciones de onda de CI y de IIF, para representar los estados electrónicos inicial y final.

Se podrían hacer algunas mejoras:

- i- La inclusión de la distorsión de las cargas coulombianas en los estados intermedios, por ejemplo, reemplazando las funciones de onda de Born usadas por funciones de onda ciconales.
- ii- La conservación de la distorsión total del electrón pasivo durante la colisión, lo que implica dar una expresión exacta para los factores $C_{\alpha,\beta}^{(1,2)\pm}$. Desafortunadamente, esto involucra un cálculo mucho más pesado que el presente.
- iii- La evaluación de la parte principal despreciada en nuestro modelo (ver la ecuación (5.8)). Esta tarea es prohibitiva para nuestro actual sistema de cómputo.

Con este formalismo podemos también evaluar la captura a estados doblemente excitados, pero en estos casos se debe poner especial atención en la descripción del estado final. También es posible extender la teoría a otros procesos dobles, tales como captura y excitación, captura e ionización, doble ionización, etc.

APENDICE A

En el sistema de unidades atómicas vale:

$$\hbar = m_e = e = 1 , \quad (\text{A.1})$$

siendo \hbar la constante de Plank, y m_e y e , la masa y la carga del electrón, respectivamente. La equivalencia de las restantes unidades está dada por:

longitud: $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = 0.5291771 \cdot 10^{-8} \text{ cm} ,$

tiempo: $t_0 = \hbar^3/m_e e^2 = 0.2418882 \cdot 10^{-16} \text{ s} ,$

velocidad: $v_0 = c^2/\hbar = 2.187691 \cdot 10^8 \text{ cm/s} ,$

energía: $E_0 = e^2/a_0 = 27.2116 \text{ eV} ,$

sección eficaz: $a_0^2 = 2.800284 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2 .$

APENDICE B

Para un sistema de tres partículas, las relaciones entre las coordenadas mostradas en la Figura 1 están dadas por:

$$\begin{aligned}\vec{R}_T &= \frac{M_T}{(M_T + 1)} \vec{R}_P - \frac{(M_T + M_P + 1)}{(M_T + 1)(M_P + 1)} \vec{r}_P, \\ \vec{r}_T &= \vec{R}_P + \frac{M_P}{(M_P + 1)} \vec{r}_P,\end{aligned}\tag{B.1}$$

y las masas reducidas ν_C y μ_C asociadas con las coordenadas \vec{R}_C y \vec{r}_C , con $C=T,P$, se definen como:

$$\begin{aligned}\nu_T &= \frac{(M_T + 1)M_P}{(M_T + M_P + 1)}, & \nu_P &= \frac{(M_P + 1)M_T}{(M_T + M_P + 1)}, \\ \mu_C &= \frac{M_C}{(M_C + 1)}, & C &= T, P.\end{aligned}\tag{B.2}$$

Estas expresiones son válidas cualesquiera sean los valores de las masas nucleares M_T, M_P .

Los vectores momentos transferidos se definen a través de la relación:

$$\vec{K}_i \cdot \vec{R}_T - \vec{K}_f \cdot \vec{R}_P = -\vec{W}_T \cdot \vec{r}_T - \vec{W}_P \cdot \vec{r}_P,\tag{B.3}$$

siendo:

$$\vec{W}_T = \vec{K}_f - \mu_T \vec{K}_i, \quad \vec{W}_P = \vec{K}_i - \mu_P \vec{K}_f.\tag{B.4}$$

En el límite de grandes masas, usando la conservación de la energía, estos vectores se expresan como:

$$\vec{W}_T = \vec{\eta} + \left[\frac{v}{2} + \frac{(\epsilon_i - \epsilon_f)}{v} \right] \hat{z}, \quad \vec{W}_P = -\vec{\eta} + \left[\frac{v}{2} - \frac{(\epsilon_i - \epsilon_f)}{v} \right] \hat{z},\tag{B.5}$$

donde $\epsilon_{i,f}$ son las energías de ligadura inicial y final, y el eje z fue elegido en la dirección y sentido de la velocidad \vec{v} . El vector $\vec{\eta}$ es el momento transversal, dado por:

$$\vec{\eta} = K_f \sin \theta (\cos \varphi, \sin \varphi, 0).\tag{B.6}$$

APENDICE C

Las fórmulas de transformación para los sistemas coordenados son (ver Figura 15):

$$\begin{aligned}\vec{R}_T &= \frac{M_T}{(M_T + 2)} \vec{R}_P - \frac{(M_T + M_P + 2)}{(M_T + 2)(M_P + 1)} \vec{r}_{P1} - \frac{(M_T + M_P + 2)}{(M_T + 2)(M_P + 2)} \vec{r}_{P2}, \\ \vec{r}_{T1} &= \vec{R}_P + \frac{M_P}{(M_P + 1)} \vec{r}_{P1} - \frac{1}{(M_P + 2)} \vec{r}_{P2}, \\ \vec{r}_{T2} &= \frac{M_T}{(M_T + 1)} \vec{R}_P - \frac{M_P}{(M_T + 1)(M_P + 1)} \vec{r}_{P1} + \frac{[1 + (M_T + 1)(M_P + 1)]}{(M_T + 1)(M_P + 2)} \vec{r}_{P2},\end{aligned}\tag{C.1}$$

y

$$\begin{aligned}\vec{R} &= \frac{M_T}{(M_T + 1)} \vec{R}_P - \frac{M_P(M_T + M_P + 2)}{(M_T + 1)(M_P + 1)^2} \vec{r}_{P1} + \frac{(M_T + M_P + 2)}{(M_T + 1)(M_P + 1)(M_P + 2)} \vec{r}_{P2}, \\ \vec{r}_{T1} &= \vec{R}_P + \frac{M_P}{(M_P + 1)} \vec{r}_{P1} - \frac{1}{(M_P + 2)} \vec{r}_{P2}, \\ \vec{r}_{P2}' &= \frac{1}{(M_P + 1)} \vec{r}_{P1} + \vec{r}_{P2},\end{aligned}\tag{C.2}$$

mientras que otras relaciones pueden obtenerse fácilmente a partir de estas, siendo válidas para cualquier valor de las masas nucleares M_T, M_P .

Los vectores momentos transferidos se definen como:

$$\vec{K}_i \cdot \vec{R}_T - \vec{K}_n \cdot \vec{R} = -\vec{U}_{T1} \cdot \vec{r}_{T1} - \vec{U}_{P1} \cdot \vec{r}_{P1} - \vec{U}_{P2} \cdot \vec{r}_{P2},\tag{C.3}$$

$$\vec{K}_n \cdot \vec{R} - \vec{K}_f \cdot \vec{R}_P = -\vec{P}_{T1} \cdot \vec{r}_{T1} - \vec{P}_{P1} \cdot \vec{r}_{P1} - \vec{P}_{P2} \cdot \vec{r}_{P2}.\tag{C.4}$$

Para núcleos pesados, usando la conservación de la energía, estos vectores se expresan como:

$$\vec{U}_{T1} = \vec{\eta}_n + \left[\frac{v}{2} + \frac{(\epsilon_i - \epsilon_n)}{v} \right] \hat{z}, \quad \vec{U}_{P1} = -\vec{\eta}_n - \left[\frac{v}{2} + \frac{(\epsilon_i - \epsilon_n)}{v} \right] \hat{z}, \quad \vec{U}_{P2} = v \hat{z},\tag{C.5}$$

$$\vec{P}_{T1} = \vec{\eta} - \vec{\eta}_n + \left[\frac{v}{2} + \frac{(\epsilon_n - \epsilon_f)}{v} \right] \hat{z}, \quad \vec{P}_{P1} = -\vec{\eta} + \vec{\eta}_n + \left[\frac{v}{2} - \frac{(\epsilon_n - \epsilon_f)}{v} \right] \hat{z}, \quad \vec{P}_{P2} = 0,\tag{C.6}$$

donde $\epsilon_{i,f,n}$ son las energías de ligadura de dos electrones inicial, final e intermedia, el eje z fue elegido en la dirección y sentido de la velocidad \vec{v} , y $\vec{\eta}$ y $\vec{\eta}_n$ son los momentos transversales, dados por:

$$\vec{\eta} = K_f \sin \theta (\cos \varphi, \sin \varphi, 0), \quad \vec{\eta}_n = K_n \sin \theta_n (\cos \varphi_n, \sin \varphi_n, 0). \quad (\text{C.7})$$



JORGE MIRAGLIA



M.S. Gravelle

REFERENCIAS

1. M.S. Gravielle and J.E. Miraglia, *Phys. Rev. A* **38**, 5034 (1988).
2. M.R.C. McDowell and J.P. Coleman, *Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions* (North-Holland, Amsterdam, 1970).
3. Dz. Belkić, R. Gayet and A. Salin, *Phys. Rep.* **56**, 279 (1979).
4. C.J. Joachain, *Quantum Collision Theory* (North-Holland, Amsterdam, 1975).
5. J. Briggs, *J. Phys. B* **13**, L717 (1980).
6. J.E. Miraglia, *Phys. Rev. A* **26**, 309 (1982).
7. V.D. Rodríguez and J.E. Miraglia, *J. Phys. B* **20**, 211 (1987).
8. L.R. Dodd and K.R. Greider, *Phys. Rev.* **146**, 675 (1966).
9. J.P. Coleman, *J. Phys. B* **1**, 567 (1968).
10. J.P. Coleman, *Case studies in atomic collision physics I*, edited by E.W. McDaniel and M.C.R. McDowell (North-Holland, Amsterdam, 1969), p. 101.
11. J.E. Miraglia, *J. Phys. B* **15**, 4205 (1982).
12. J.M. Maidagan and R.D. Rivarola, *J. Phys. B* **17**, 2477 (1984).
13. C.O. Reinhold and J.E. Miraglia, *J. Phys. B* **20**, 1069 (1987).
14. M. Mittleman, *Phys. Rev.* **137**, A1 (1965).
15. A. Goldberg, H.M. Schey, and J.L. Schwartz, *Am. J. Phys.* **35**, 177 (1967).
16. V.H. Ponce, *Conferences invitees, 10th. Colloque sur la Physique de Collisions Atomiques*, Aussois, France (1984), p. 170.
17. Y. Takada, *Phys. Rev. A* **38**, 98 (1988).
18. H. Danared, *J. Phys. B* **17**, 2619 (1984).
19. V.D. Rodríguez, M.S. Gravielle, J.E. Miraglia, and V.H. Ponce, *Phys. Scripta* **43**, 52 (1991).

20. M.S. Gravielle, V.D. Rodríguez, J.E. Miraglia, and V.H. Ponce, *Phys. Scripta* **43**, 57 (1991).
21. K. Dettmann and G. Leibfried, *Z. Phys.* **210**, 43 (1968).
22. K. Dettmann, *Springer Tracts in Modern Physics* (Springer, Berlin), Vol. **58**, 119 (1971).
23. J. Macek and K. Taulbjerg, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 170 (1981).
24. Romberg to be supplied.
25. Miraglia82 to be supplied.
26. D.S.F. Crothers and J. McCann, *J. Phys. B* **16**, 3229 (1983).
27. L. Dube, *Invited Papers to the 14th International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions*, Palo Alto, 1985 (Edited by D.C. Lorents, W.E. Meyerhof, and J.R. Peterson), p. 345, North-Holland, Amsterdam (1986).
28. M.H. Mittleman and J. Quong, *Phys. Rev.* **167**, 74 (1968).
29. D.P. Dewangan and J. Eichler, *J. Phys. B* **18**, L65 (1985).
30. D.P. Dewangan and J. Eichler, *J. Phys. B* **19**, 2939 (1986).
31. Dz. Belkić, R. Gayet, J. Hanssen, and A. Salin, *J. Phys. B* **19**, 2945 (1986).
32. G. Deco, Tesis doctoral, Universidad Nacional de Rosario, 1987.
33. D.P. Dewangan and B.H. Bransden, *J. Phys. B* **21**, L353 (1988).
34. F. Decker and J. Eichler, *J. Phys. B* **22**, L95 (1989), y *J. Phys. B* **22**, 3023 (1989).
35. J.S. Briggs, *J. Phys. B* **10**, 3075 (1977).
36. D.S.F. Crothers, *J. Phys. B* **15**, 2061 (1982).
37. El estado de colisión asociado al canal inicial satisface:

$$\langle \Psi_{i_a}^+ | \Psi_{i_b}^+ \rangle = \delta_{i_a, i_b} ,$$

donde los subíndices i_a, i_b indican diferentes autoestados Φ_{i_a}, Φ_{i_b} , del Hamiltoniano no perturbado H_i , los cuales son ortonormales, y la función δ simboliza

la delta de Kronecker o de Dirac, según corresponda. La condición anterior se denomina normalización, y es verificada también por las funciones de onda impulsiva y eikonal, pero no por la función de onda impulsiva de pico. Las mismas relaciones se cumplen para el canal final.

38. V.D. Rodríguez and J.E. Miraglia, *J. Phys. B* **23**, 3629 (1990).
39. M.S. Gravielle and J.E. Miraglia, aceptado para su publicación en *Comp. Phys. Commun.* .
40. K. Taulbjerg, R.O. Barrachina, and J. Macek, *Phys. Rev. A* **41**, 207 (1990).
41. E. Clementi and C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables* **14**, 177 (1974).
42. La sección eficaz total de captura al nivel n se considera proporcional a n^{-3} a altas energías (Ver Ref. 2, p. 379).
43. N. Toshima, T. Ishihara, and J. Eichler, *Phys. Rev. A* **36**, 2659 (1987).
44. A. Jain, C.D. Lin, and W. Fritsch, *Phys. Rev. A* **36**, 2041 (1987).
45. R. Hippler, W. Harbich, M. Faust, H.O. Lutz, and L.J. Dubé, *J. Phys. B* **19**, 1507 (1986).
46. R. DeSerio, C. González-Lepera, J.P. Gibbons, J. Burgdörfer, and I.A. Sellin, *Phys. Rev. A* **37**, 4111 (1988).
47. J. Burgdörfer, *Phys. Rev. A* **24**, 1756 (1981).
48. J. Burgdörfer and L. Dubé, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2225 (1984).
49. Para usar el modelo post colisional deberíamos calcular primero el operador evolución asociado a la función de onda impulsiva final; segundo, involucionar $T_{fi}^{E,I-}$ hasta una cierta distancia de empalme, y tercero, evolucionar la matriz de transición desde ese punto hasta infinito bajo la influencia del efecto Stark.
50. Dz. Belkić, S. Saini, and H.S. Taylor, *Phys. Rev. A* **36**, 1601 (1987).
51. H. Vogt, R. Schuch, E. Justiniano, M. Schulz, and W. Schwab, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2256 (1986).

52. J. Macek and X.Y Dong, *Phys. Rev. A* **38**, 3327 (1988).
53. Dz. Belkić and H.S. Taylor, *Phys. Rev. A* **39**, 6134 (1989).
54. A. Jain, C.D. Lin, and W. Fritsch, *J. Phys. B* **21**, 1545 (1988).
55. R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **18**, 1930 (1978).
56. V.D. Rodríguez, Tesis doctoral, Univ. Nac. de Cuyo (1990).
57. R.O. Barrachina, C.R. Garibotti, and J.E. Miraglia, *Phys. Rev. A* **31**, 4026 (1985).
58. A. Nordsieck, *Phys. Rev.* **93**, 785 (1954).
59. J. Macek and S. Alston, *Phys. Rev. A* **26**, 250 (1982).
60. A partir de esta equivalencia estamos inclinados a sumar sobre todas las contribuciones *off-shell*, y definir el propagador como sigue:
- $$P(\vec{q}_1, \vec{q}_2) \sim F(a_T, A_T) \frac{1}{\alpha} F(a_P, A_P) = F(a_T, A_T) P_{B2G0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) F(a_P, A_P),$$
- donde la validez del propagador es prolongada para valores grandes de $\delta_{T,P}$, de acuerdo a $P_{B2G0}(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$.
61. T.J.M. Zourus, D. Schneider, and N. Stolterfoht, *Phys. Rev. A* **35**, 1963 (1987).
62. J.H. McGuire and L. Weaver, *Phys. Rev. A* **16**, 41 (1977).
63. T.C. Theisen and J.H. McGuire, *Phys. Rev. A* **20**, 1406 (1979).
64. R. Gayet, R.D. Rivarola, and A. Salin, *J. Phys. B* **14**, 2421 (1981).
65. M. Ghosh, C.R. Mandal, and S.C. Mukherjee, *Phys. Rev. A* **35**, 5259 (1987).
66. S.N. Chatterjee and B.N.Roy, *J. Phys. B* **18**, 4283 (1985).
67. R.E. Olson, *J. Phys. B* **15**, L163 (1982).
68. D.S.F. Crothers and R. McCarroll, *J. Phys. B* **20**, 2835 (1987).
69. A. Jain, C.D. Lin, and W. Fritsch, *Phys. Rev. A* **39**, 1741 (1989).
70. W. Fritsch and C.D. Lin, *J. Phys. B* **19**, 2683 (1986).
71. W. Fritsch and C.D. Lin, *Phys. Rev. A* **41**, 4776 (1990).
72. K. Gramlich, N. Grün, and W. Scheid, *J. Phys. B* **22**, 2567 (1989).

73. J.E. Miraglia and M.S. Gravielle, *Abstracts of Contributed Papers to the 15th International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions, Brighton, 1987*, editado por J. Geddes y colab. (Belfast, 1987), p. 521.
74. J. McGuire, comunicación privada (1991).
75. Cuando se usan funciones de onda no perturbadas en doble excitación, $T_{fi}^{(1)}$ es real y proporcional a Z_p . La PP es también real y contribuye con términos del orden de Z_p^3 a la sección eficaz, mientras que el término correspondiente a la conservación de la energía es imaginario y da una contribución del orden de Z_p^4 , siendo por lo tanto menos importante que la parte principal.
76. Notemos que $\langle \xi_n | W_i | \chi_i^+ \rangle = \langle \xi_n | H - E | \chi_i^+ \rangle = \langle \xi_n | E_n - E + V_n | \chi_i^+ \rangle$, donde E_n es la energía del estado intermedio ξ_n , y nosotros estamos trabajando sobre la capa de energía $E = E_n$ (ver la ecuación (5.8)).
77. A.V. Bunge, C.F. Bunge, R. Jáuregui, and G. Cisneros, *Computers Chem.* **13**, 201 (1989); C.F. Bunge, R. Jáuregui, and G. Cisneros, *Computers Chem.* **13**, 277 (1989).
78. E.W. McDaniel, M.R. Flannery, H.W. Ellis, F.L. Eisele, and W. Pope, *US Army Missile Research and Development Command. Technical Report II 78-1* (1977).
79. R.D. DuBois, *Phys. Rev. A* **36**, 2585 (1987).
80. N.V. de Castro Faria, F.L. Freire, Jr., and A.G. de Pinho, *Phys. Rev. A* **37**, 280 (1988).
81. J.H. McGuire, N.C. Deb, Y. Aktas, and N.C. Sil, *Phys. Rev. A* **38**, 3333 (1988).
82. W. Fritsch and C.D. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 690 (1988).
83. L.Meng and C.O. Reinhold, comunicación privada (1990).
84. Cada contribución debe ser sumada coherentemente.
85. M.B. Shah and H.B. Gilbody, *J. Phys. B* **18**, 899 (1985).

86. R. Hippler, S. Datz, P.D. Miller, P.L. Pepmiller, and P.F. Dittner, *Phys. Rev. A* **35**, 585 (1987).
87. V. Irby y colab. , DAMOP Meeting (Monterey, 1990), resultados previos.
88. M.S. Gravielle and J.E. Miraglia, aceptado para su publicación en *Phys. Rev. A* .
89. M.S. Gravielle and J.E. Miraglia, aceptado para su publicación en *Phys. Rev. A* .
90. M.S. Gravielle and J.E. Miraglia, enviado para su publicación.
91. C.L. Cocke, R.K. Gardner, B. Curnutte, T. Bratton, and T.K. Saylor, *Phys. Rev. A* **16**, 2248 (1977).
92. E. Horsdal-Pedersen, C.L. Cocke, J.L. Rasmussen, S.L. Varghese, and W. Waggoner, *J. Phys. B* **16**, 1799 (1983).
93. J.R. Macdonald, C.L. Cocke, and W.W. Edison, *Phys. Rev. Lett.* **32**, 648 (1974).
94. M. Rødbro, E. Horsdal-Pedersen, C.L. Cocke, and J. R. Macdonald, *Phys. Rev. A* **19**, 1936 (1979).
95. E.P. Andreev, V.A. Ankudinov, and S.V. Bobashev, *Proceedings of the 5th IC-PEAC* (Leningrad, Nauka, 1967), Abstract of Papers p. 309.
96. C.F. Barnett and H.K. Reynolds, *Phys. Rev.* **109**, 355 (1958).
97. R.J. Conrads, T.W. Nichols, J.C. Ford, and E.W. Thomas, *Phys. Rev. A* **7**, 1928 (1973).
98. V. Dose, *Helv. Phys. Acta* **39**, 683 (1966).
99. J.L. Edwards and E.W. Thomas, *Phys. Rev. A* **2**, 2346 (1970).
100. J.C. Ford and E.W. Thomas, *Phys. Rev. A* **5**, 1604 (1972).
101. R. H. Hughes, C.A. Stigers, B.M. Doughty, and E.D. Stokes, *Phys. Rev. A* **1**, 1424 (1970).
102. R.H. Hughes, E.D. Stokes, Song-Sik Choe, and T.J. King, *Phys. Rev. A* **4**, 1453 (1971).
103. T.J. Morgan, J. Geddes, and H.B. Gilbody, *J. Phys. B* **6**, 2118 (1973).

104. T.J. Morgan, J. Stone, and R. Mayo, *Phys. Rev. A* **22**, 1460 (1980).
105. G. Ryding, A.B. Wittkower, and H.B. Gilbody, *Proc. Phys. Soc.* **89**, 547 (1966).
106. R.F. Stebbings, R.A. Young, C.L. Oxley, and H. Ehrhardt, *Phys. Rev. A* **138**, 1312 (1965).
107. L.H. Toburen, M.Y. Makai, and R.A. Langley, *Phys. Rev.* **171**, 114 (1968).
108. L.M. Welsh, K.H. Barker, S.N. Kaplan, and R.V. Pyle, *Phys. Rev.* **158**, 85 (1967).
109. J.F. Williams, *Phys. Rev.* **157**, 97 (1967).

DESCRIPCION DE LAS FIGURAS

Fig. 1. Sistemas de coordenadas para el modelo unidimensional de colisión.

Fig. 2. Probabilidades de captura para el caso unidimensional simétrico con: $V_{T0} = V_{P0} = \pi^2/16$, y $a_T = a_P = 1$, en función de la velocidad del proyectil, en unidades atómicas.

Teorías: como se indica en el capítulo 2;

●: resultados exactos de Mittleman y Quong, Ref. 14.

Fig. 3. Probabilidades de captura para el caso unidimensional simétrico con: $V_{T0} = V_{P0} = 2$, y $a_T = a_P = 1$, en función de la velocidad del proyectil, en unidades atómicas.

Teorías: como se indica en el capítulo 2;

●: resultados exactos obtenidos en el Centro Atómico Bariloche, Ref. 20.

Fig. 4. Probabilidades de captura para el caso unidimensional asimétrico con: $V_{P0} = 2$, y $a_T = a_P = 1$, en función de la profundidad V_{T0} del pozo blanco, para la velocidad $v = 2$, en unidades atómicas. Teorías y resultados exactos como en la Figura 3.

Fig. 5. Similar a la Figura 4 para la velocidad $v = 5$.

Fig. 6. Coordenadas relativas para el sistema con tres partículas.

Fig. 7. Secciones eficaces totales para la captura electrónica desde la capa K del argón por impacto de protones, en función de la energía del proyectil.

Teorías:

línea sólida, versión *prior* de la aproximación EI para la captura a los estados $1s$, $2s$, y $2p$;

línea de puntos, BIB de Dewangan y colab. (1986), Ref. 30, para la captura al estado $1s$.

Datos experimentales para captura a todos los estados:

□, Macdonald y colab. (1974), Ref. 93; ●, Horsdal-Pedersen y colab. (1983), Ref. 92.

Fig. 8. Similar a la Figura 7 para el sistema protón-neón.

Datos experimentales: □, Cocke y colab. (1977), Ref. 91; ●, Rødbro y colab. (1979), Ref. 94.

Fig. 9. Similar a la Figura 7 para el sistema protón-carbono.

Datos experimentales: ●, Rødbro y colab. (1979), Ref. 94.

Fig. 10. Secciones eficaces totales para la captura electrónica desde helio por impacto de protones, en función de la energía del proyectil.

Teorías:

línea sólida, versión *prior* de la aproximación EI para la captura a los estados $1s, 2s, 2p$, y $3s$, y para captura a todos los estados (usando⁴² $\sigma_{total} = \sigma_{(n=1)} + 1.616\sigma_{(n=2)}$);

línea de puntos, BIB de Toshima y colab. (1987), Ref. 43, para captura al estado $1s$, y para captura a todos los estados (usando⁴² $\sigma_{total} = 1.2 \sigma_{(n=1)}$).

Datos experimentales para captura a todos los estados:

●, Barnett y colab. (1958), Ref. 96; ▲, Williams (1967), Ref. 109; ▼, Welsh y colab. (1967), Ref. 108; ▽, Toburen y colab. (1968), Ref. 107.

Datos experimentales para captura al estado:

2s : ■, Hughes y colab. (1971), Ref. 102; ▲, Dose (1966), Ref. 98; ✕, Ryding y colab. (1966), Ref. 105;

2p : ■, Hughes y colab. (1971), Ref. 102; ▲, Dose (1966), Ref. 98;

3s : □, Hughes y colab. (1970), Ref. 101; ◇, Edwards y colab. (1970), Ref. 99; ◆, Conrads y colab. (1973), Ref. 97; ○, Ford y colab. (1972), Ref. 100.

Los experimentos graficados en esta figura se normalizaron, cuando fue necesario, como en el trabajo de Belkić y colab. (1979), Ref. 3.

Fig. 11. Parámetro de alineamiento (A_{20}), velocidad del perihelio ($\langle \vec{L} \times \vec{A} \rangle_z$), y componente z del momento dipolar ($\langle \vec{D} \rangle_z$), definidos por la ecuación (3.18), para la captura electrónica por protones desde helio, en función de la energía de impacto.

Teorías:

línea sólida, versión *prior* de la aproximación EI;

línea de puntos, Jain y colab. (1987), Ref. 44;

línea quebrada con puntos, aproximación CDW con PCI de Hippler y colab. (1986), Ref. 45, para A_{20} , y de DeSerio y colab. (1988), Ref. 46, para $\langle \vec{L} \times \vec{A} \rangle_z$ y $\langle \vec{D} \rangle_z$;

línea quebrada, aproximación CDW sin PCI de Hippler y colab. (1986), Ref. 45.

Datos experimentales:

○, Hippler y colab. (1986), Ref. 45; ●, DeSerio y colab. (1988), Ref. 46.

Fig. 12. Secciones eficaces totales para la captura electrónica desde hidrógeno por impacto de protones, en función de la energía del proyectil.

Teorías:

líneas sólida y quebrada, versiones *prior* y *post* de la aproximación EI, respectivamente, para la captura a los estados $1s, 2s, 2p$, y $3s$;

línea de puntos, BIB de Belkić y colab. (1987), Ref. 50, para la captura a los estados $1s, 2s, 2p$, y $3s$.

Datos experimentales para captura al estado:

$2s$: ●, Ryding y colab. (1966), Ref. 105; △, Morgan y colab. (1973), Ref. 103; ○, Morgan y colab. (1980), Ref. 104;

2p : \diamond , Andreev y colab. (1967), Ref. 95; \triangle , Morgan y colab. (1973), Ref. 103; \blacklozenge , Stebbings y colab. (1965), Ref. 106;

3s : \square , Hughes y colab. (1970), Ref. 101; \blacksquare , Ford y colab. (1972), Ref. 100.

Los experimentos graficados en esta figura se normalizaron, cuando fue necesario, como en el trabajo de Belkić y colab. (1979), Ref. 3.

Fig. 13 Secciones eficaces diferenciales $d\sigma/d\Omega$ para la colisión $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s + 2s + 2p) + H^+$, en función del ángulo de dispersión en el sistema de laboratorio, para energías de impacto de 2.8 y 5 MeV.

Línea sólida, la aproximación EI;

\bullet , los experimentos de Vogt y colab. , Ref. 51.

Fig. 14. Parámetro de alineamiento (A_{20}), velocidad del perihelio ($\langle \vec{L} \times \vec{A} \rangle_z$), y componente z del momento dipolar ($\langle \vec{D} \rangle_z$), definidos por la ecuación (3.18), para la captura electrónica por protones desde hidrógeno, en función de la energía de impacto.

Teorías:

líneas sólida y quebrada, versiones *prior* y *post* de la aproximación EI, respectivamente;

línea de puntos, Jain y colab. (1988), Ref. 54;

\circ , Shakeshaft (1978), Ref. 55.

Fig. 15. Coordenadas relativas para el sistema con cuatro partículas.

Fig. 16. Representación esquemática del proceso de doble captura desde el estado fundamental.

(a) Los dos electrones están en el estado inicial.

(b) El electrón activo (e_2) es capturado al estado ϕ_{n_p} (de energía $-Z_p^2/(2n_p^2)$), y el electrón pasivo (e_1) se relaja al estado ϕ_{n_T} (de energía $-Z_T^2/(2n_T^2)$).

- (c) Los papeles de los electrones se intercambian; el electrón activo (e_1) es capturado, mientras que el electrón e_2 se relaja al estado final.

Fig. 17. Secciones eficaces totales para la doble captura electrónica $1s^2 \rightarrow 1s^2$ en la colisión $\text{He}^{++} - \text{He}$, en función de la energía de impacto. Los datos experimentales involucran captura a todos los estados.

Teorías:

línea sólida, segundo orden en la aproximación impulsiva, como se indica en la sección 4.3.1-a, usando una función de onda de CI;

línea de puntos, resultados obtenidos con el método de canales acoplados, usando una expansión en orbitales de Gauss, de Gramlich y colab. (1989), Ref. 72.

Datos experimentales:

○, McDaniel y colab. (1977), Ref. 78; □, DuBois (1987), Ref. 79; ●, Castro Faria y colab. (1988), Ref. 80.

Fig. 18. Secciones eficaces totales para la doble captura electrónica $1s^2 \rightarrow 1s^2$, en las colisiones de Li^{3+} y B^{5+} sobre helio, en función de la velocidad del ión incidente normalizada a Z_p , en unidades atómicas. Los datos experimentales involucran captura a todos los estados.

Línea sólida, segundo orden en la aproximación impulsiva, como se indica en la sección 4.3.3.

Datos experimentales:

■, Shah y Gilbody (1985), Ref. 85; □, Hippler y colab. (1987), Ref. 86.

Fig. 19. Secciones eficaces diferenciales para la doble captura electrónica en la colisión ${}^3\text{He}^{++} + {}^4\text{He}(1s^2)$, involucrando la captura a los estados $1s^2$, $1s2s$, y $1s2p$, para una energía de impacto de 60 KeV /amu, en función del ángulo de dispersión

medido en el sistema de laboratorio. Los datos experimentales involucran captura a todos los estados.

Líneas quebrada y sólida, captura $1s^2 \rightarrow 1s^2$ y captura total, respectivamente, calculadas con el segundo orden de la aproximación impulsiva;

línea de puntos, cálculos con el método de trayectoria clásica de Montecarlo de Reinhold y colab. (1990), Ref. 83;

□, experimentos de Irby y colab. (1990), Ref. 87.

DESCRIPCION DE LA TABLA

Secciones eficaces totales (en cm^2) para la doble captura electrónica $1s^2 \rightarrow 1s^2$ en la colisión $\text{He}^{++} - \text{He}$. E es la energía de impacto del proyectil (en KeV).

Experimentos, de McDaniel y colab. ⁷⁸, involucrando captura a todos los estados;

IEM-CDW, resultados del modelo de electrón independiente con la aproximación CDW, como fueron reportados por Gayet y colab. ⁶⁴, sin (i), y con (ii) relajación;

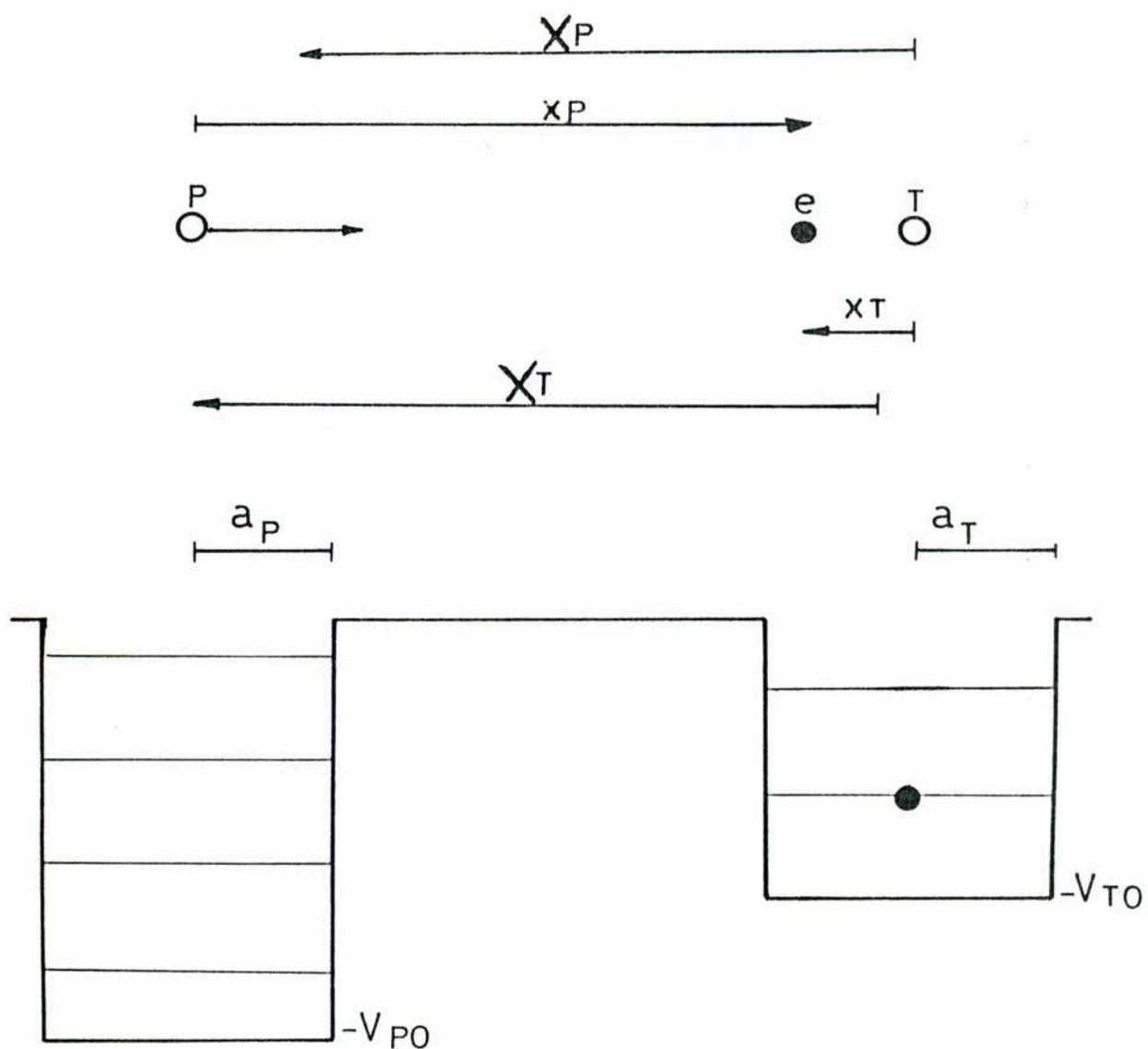
IEM-IA, resultados del modelo de electrón independiente con la aproximación impulsiva (ver sección 4.3.1-b).

C-Mc, los mejores cálculos de Crothers y McCarroll⁶⁸, usando la función de onda electrónica de Pluvinage en la aproximación CDW;

$\sigma_{fi}^{(2)}$, el segundo orden de la aproximación impulsiva, como se calcula en la sección 4.3.1-b usando la función de onda de HF. Empleando la función de onda de CI obtenemos el mismo resultado, considerando las dos primeras cifras significativas.

TABLA

E(KeV)	Experimentos	IEM-CDW	IEM-IA	C-Mc	$\sigma_{ji}^{(2)}$
500	5.1×10^{-18}	$16. \times 10^{-18}(i)$ $13. \times 10^{-18}(ii)$	$13. \times 10^{-18}$	5.8×10^{-18}	5.0×10^{-18}
750	9.5×10^{-19}	$18. \times 10^{-19}(i)$ $11. \times 10^{-19}(ii)$	$18. \times 10^{-19}$	7.4×10^{-19}	7.6×10^{-19}
1000	2.6×10^{-19}	$3.1 \times 10^{-19}(i)$ $1.7 \times 10^{-19}(ii)$	3.4×10^{-19}	1.5×10^{-19}	1.6×10^{-19}
1400	3.6×10^{-20}	$3.4 \times 10^{-20}(i)$ $1.7 \times 10^{-20}(ii)$	$3.7. \times 10^{-20}$	2.1×10^{-20}	1.9×10^{-20}



COORDENADAS PARA EL MODELO UNIDIMENSIONAL

FIGURA 1

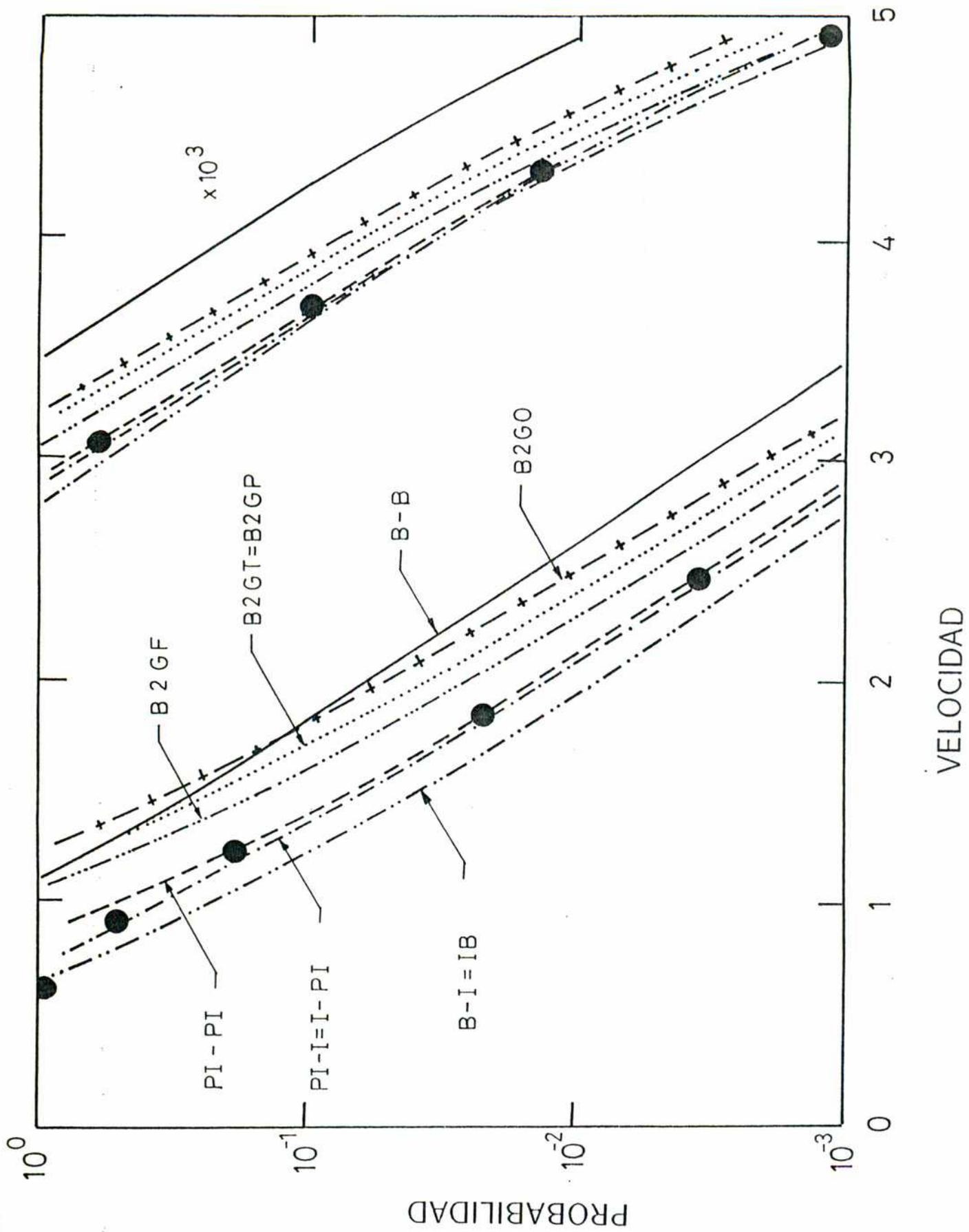


FIGURA 2

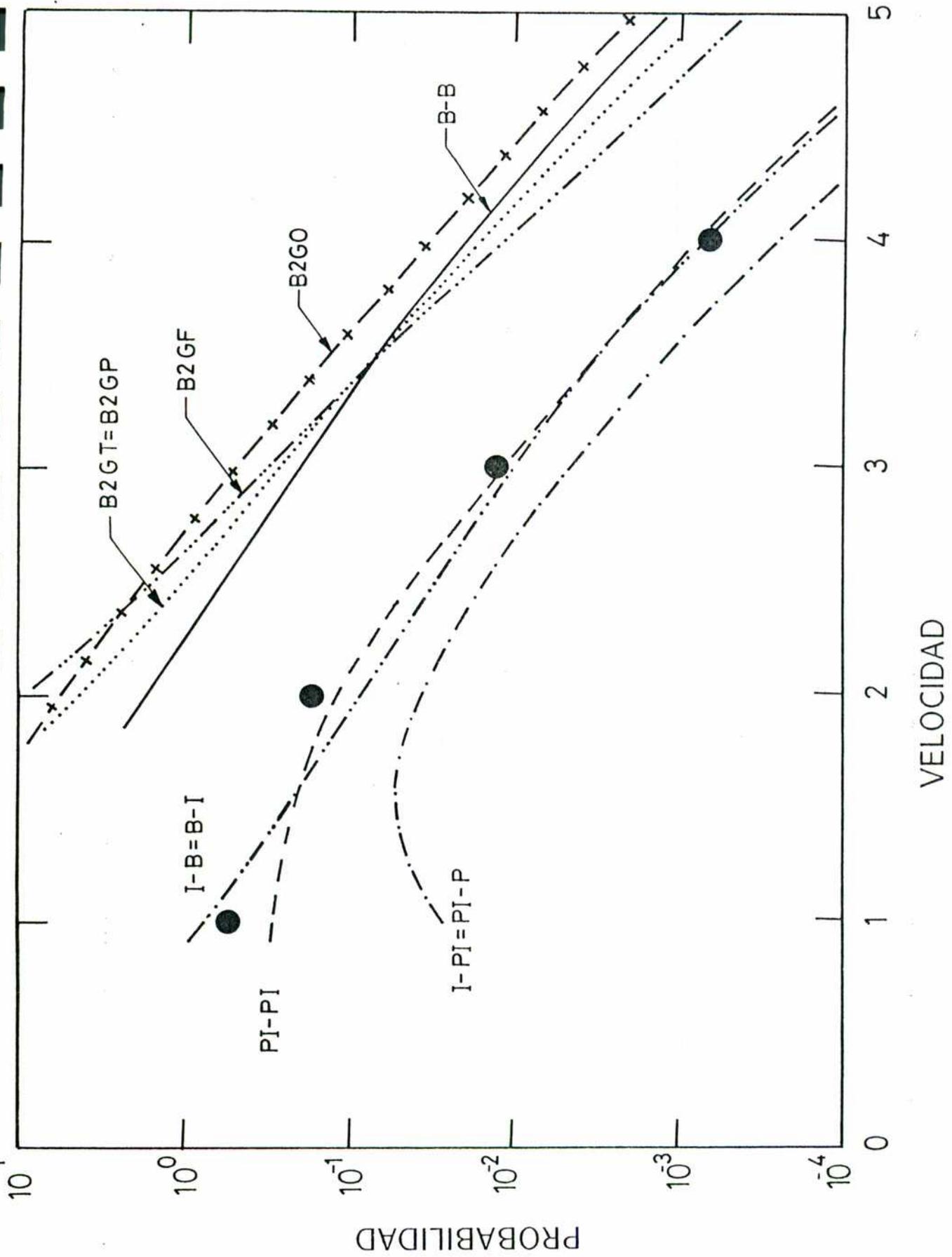


FIGURA 3

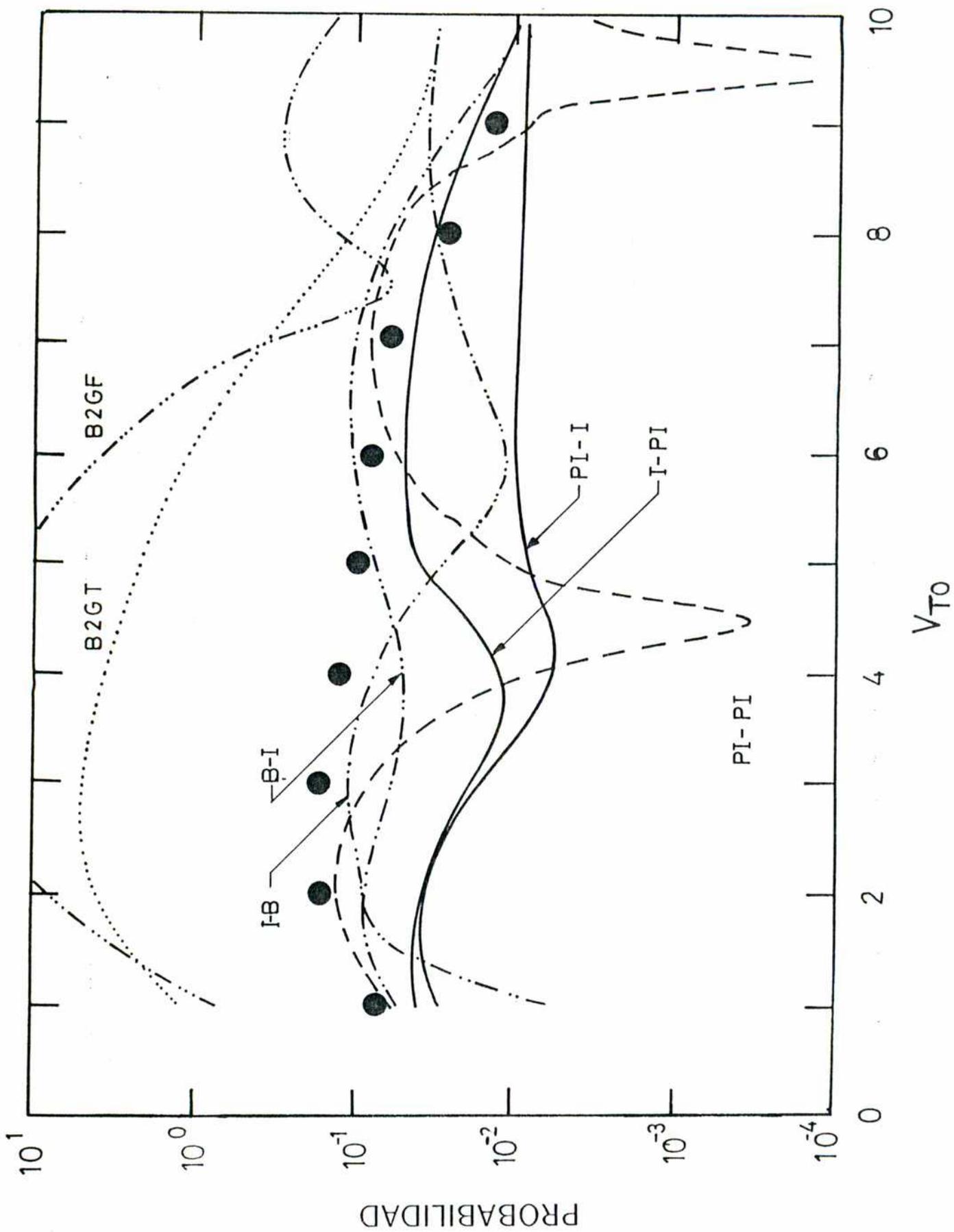


FIGURA 4

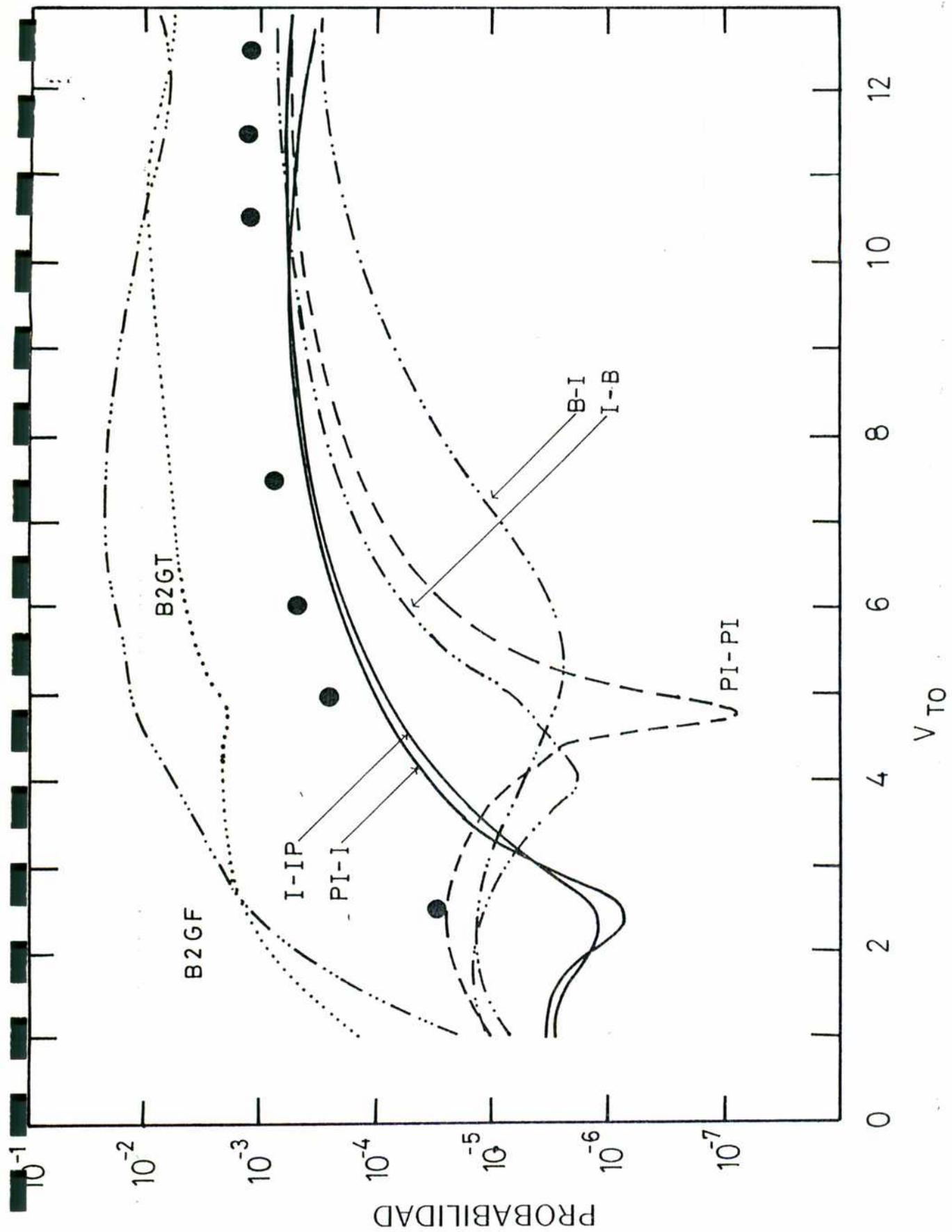
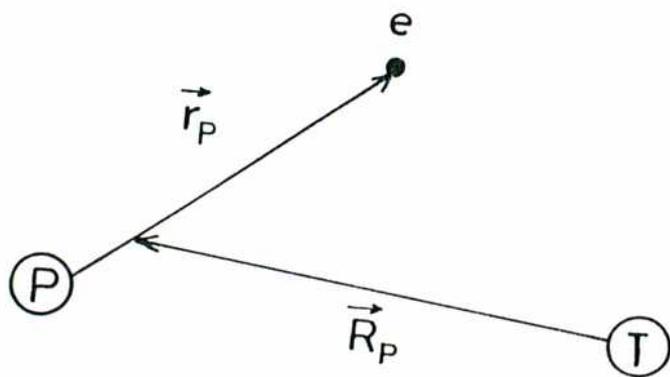
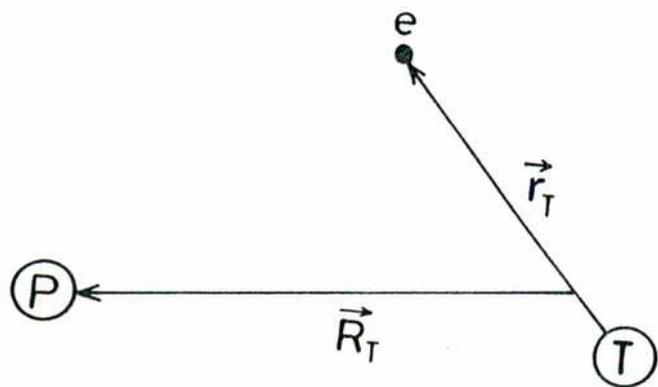


FIGURA 5



COORDENADAS PARA EL SISTEMA DE TRES PARTICULAS

FIGURA 6

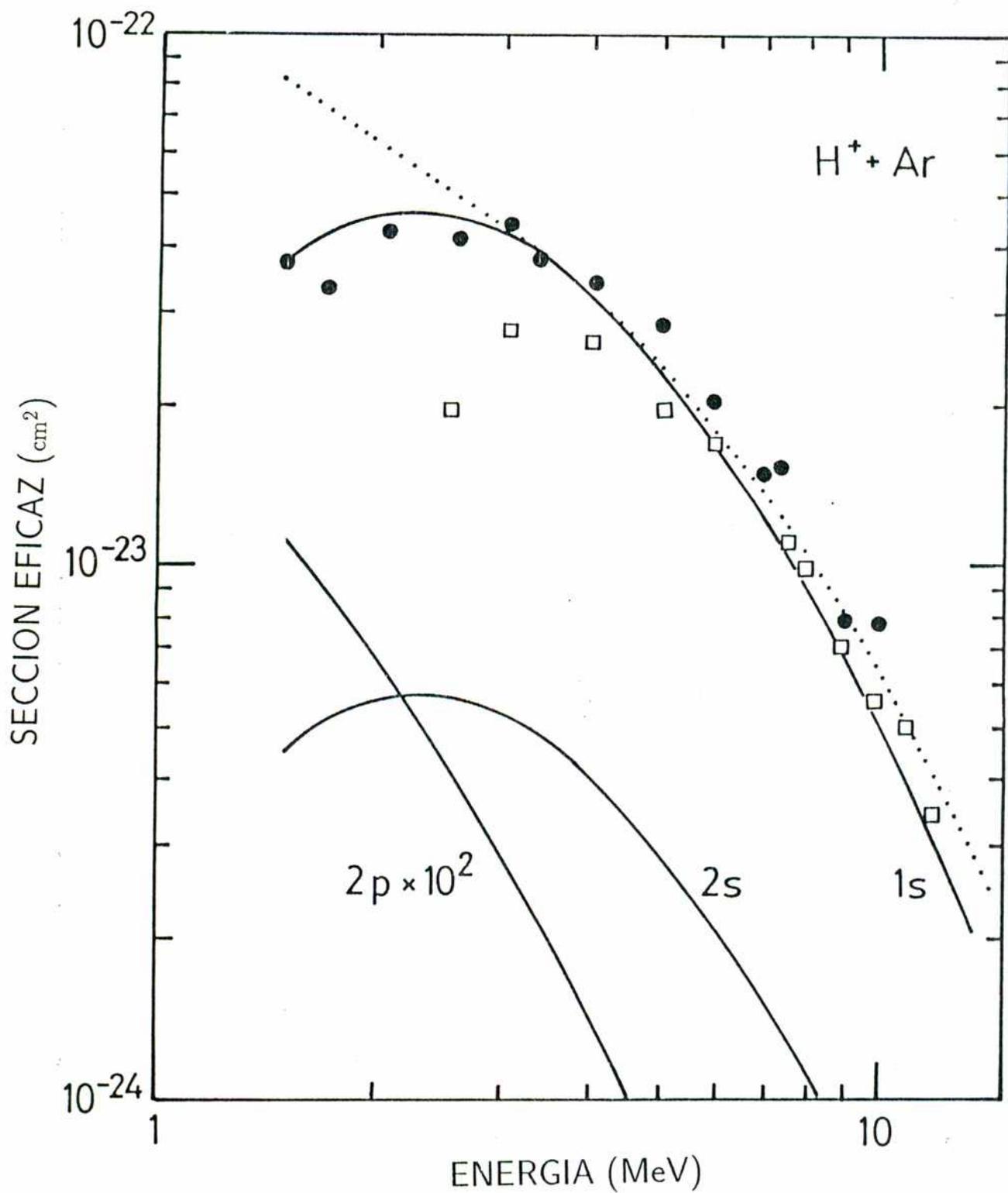


FIGURA 7

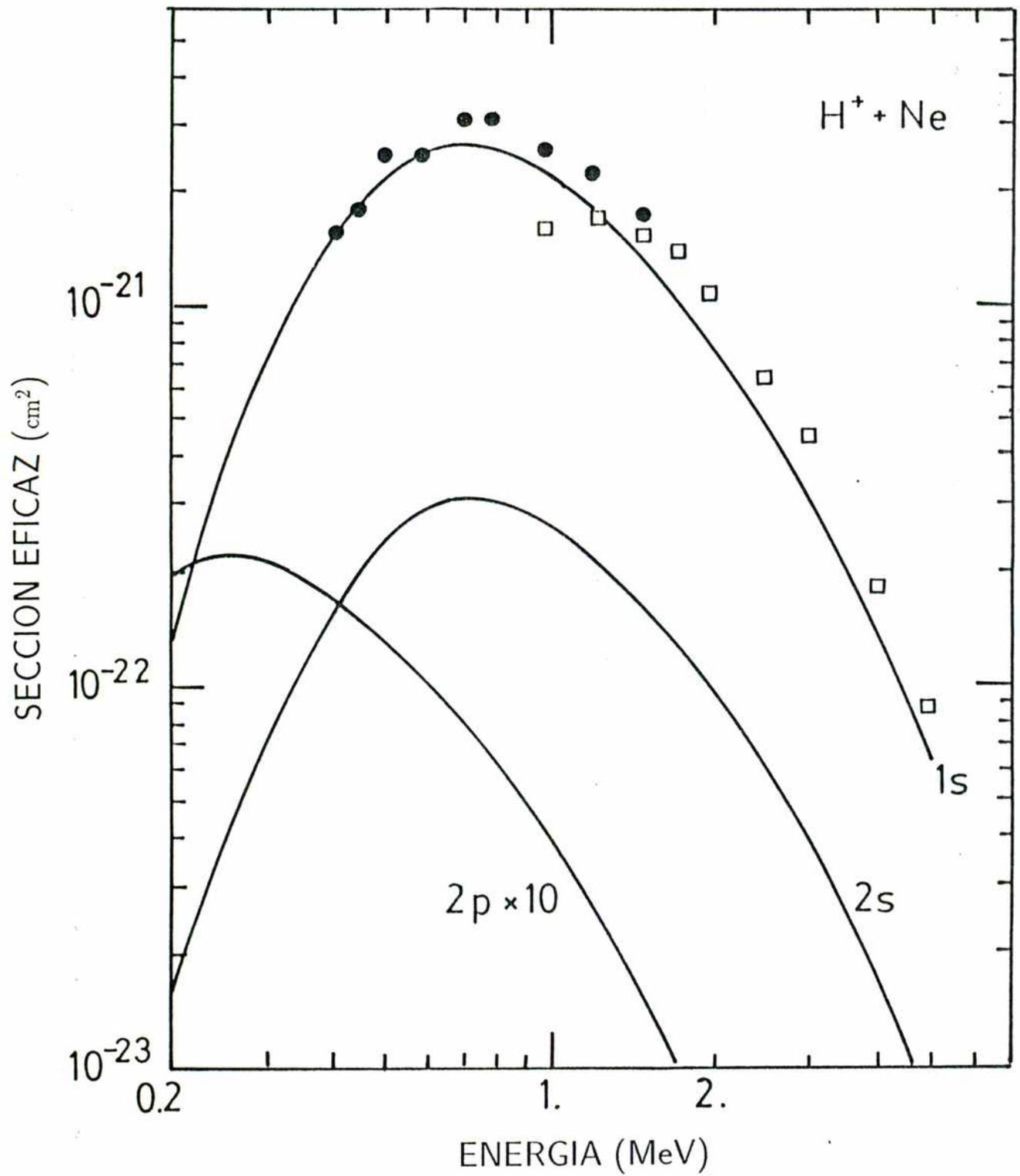


FIGURA 8

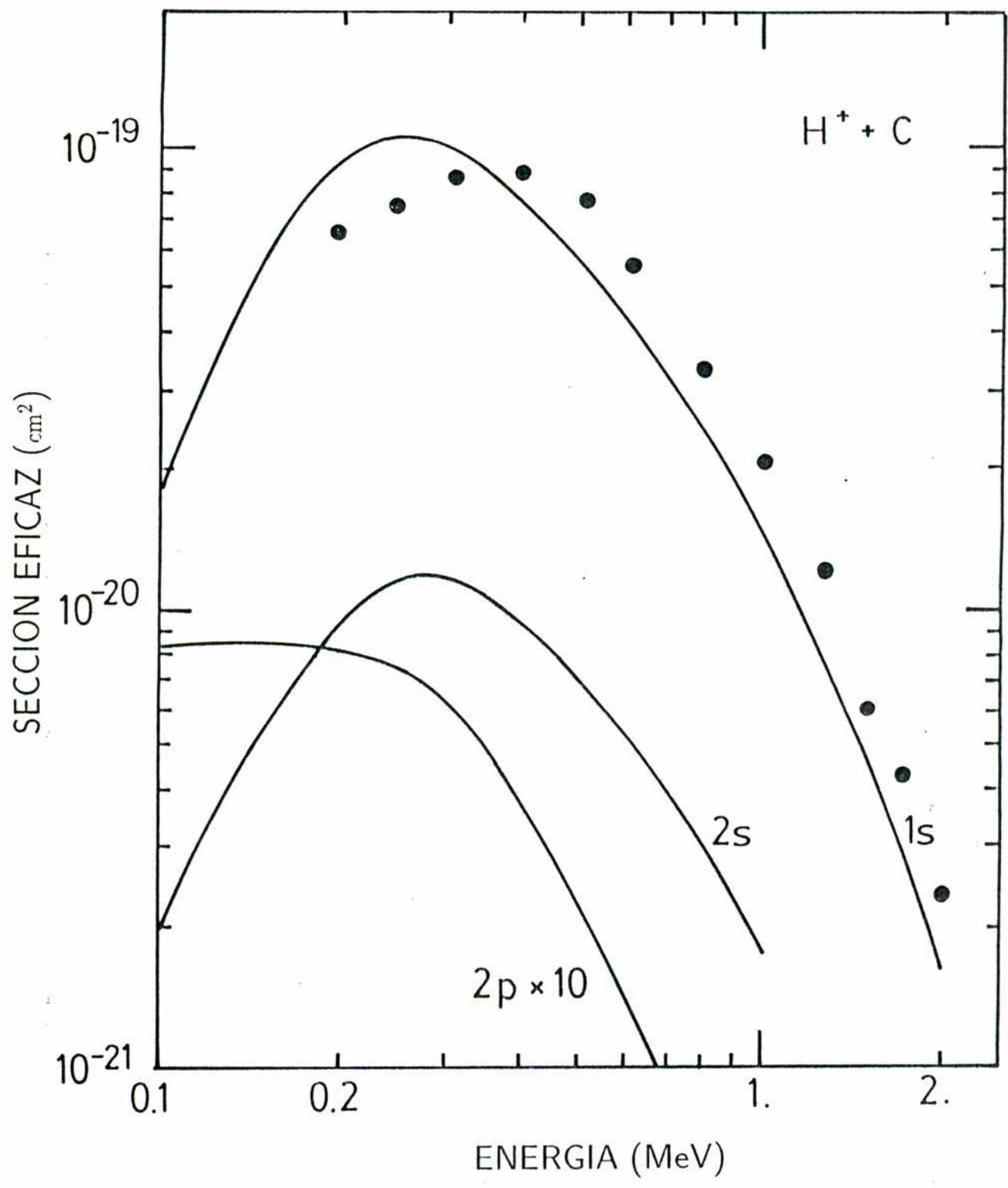


FIGURA 9

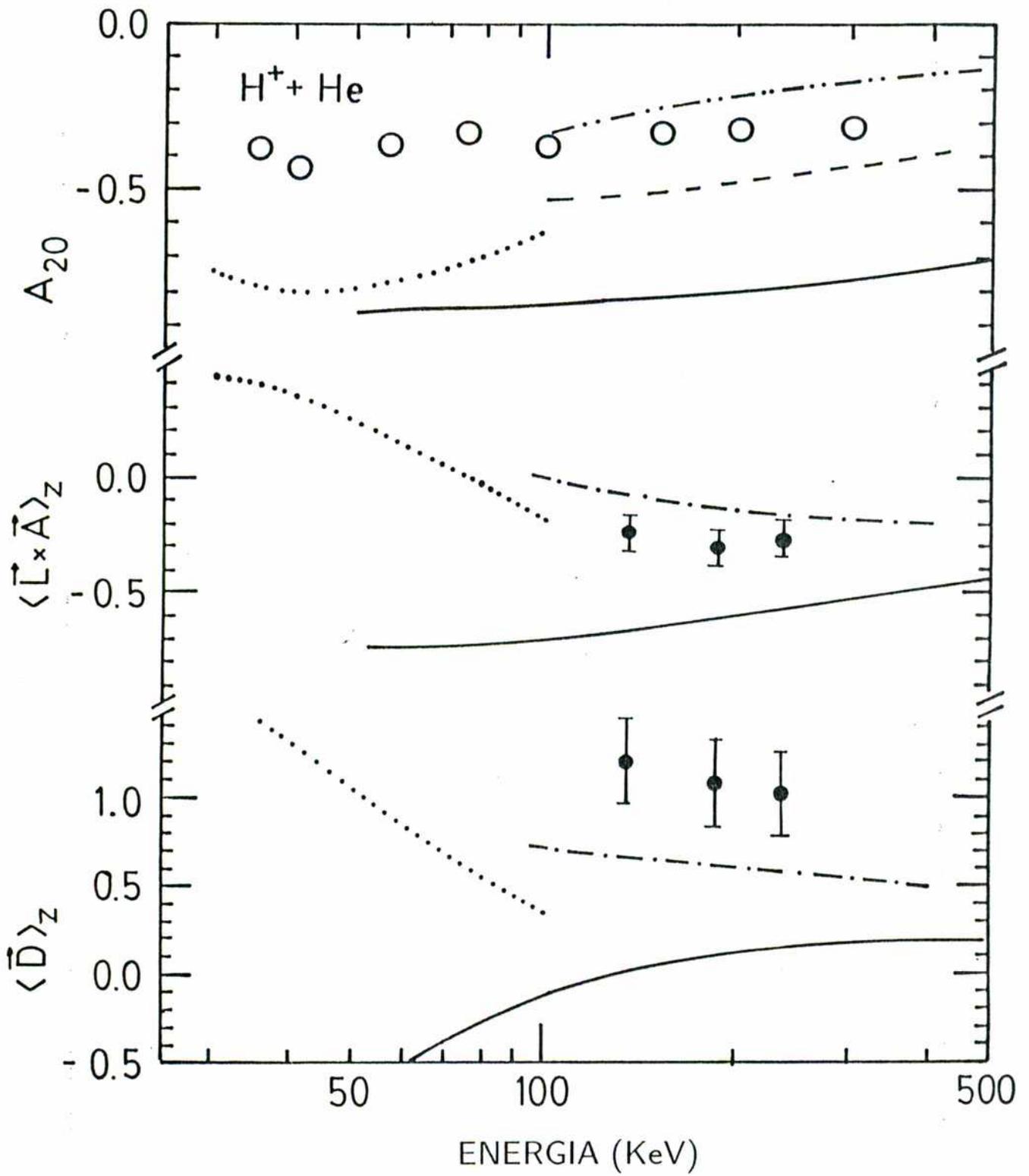


FIGURA 11

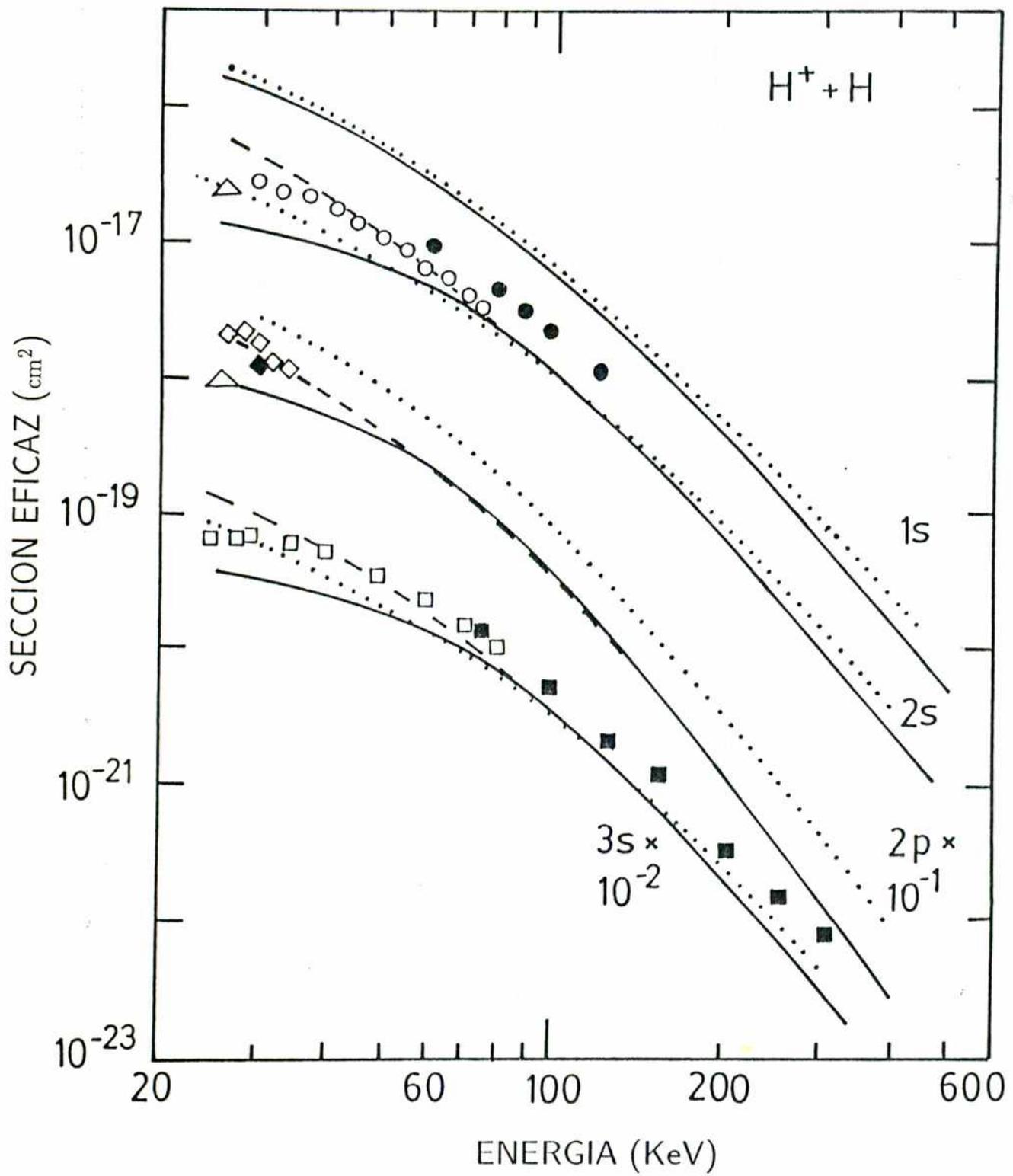


FIGURA 12

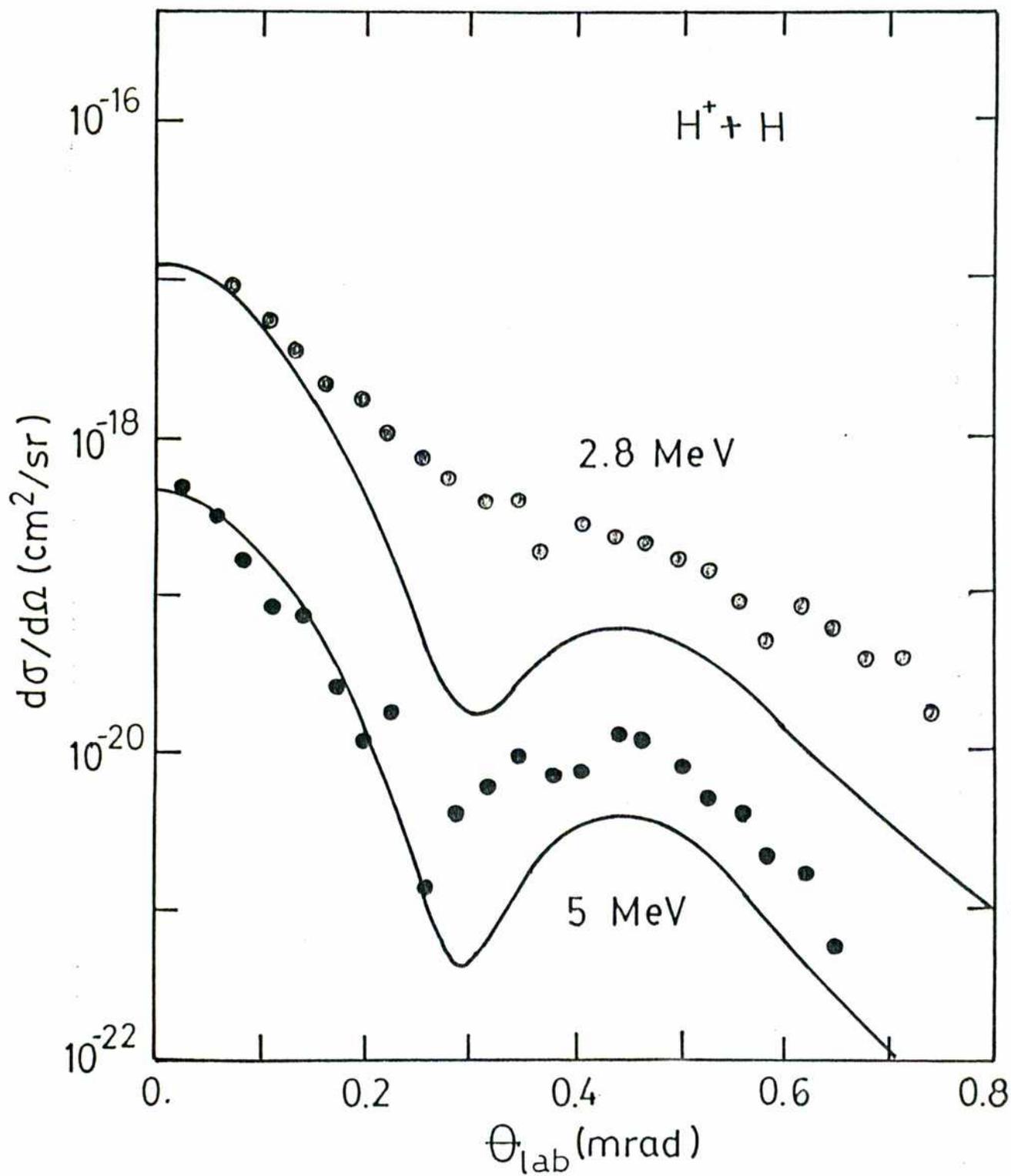


FIGURA 13

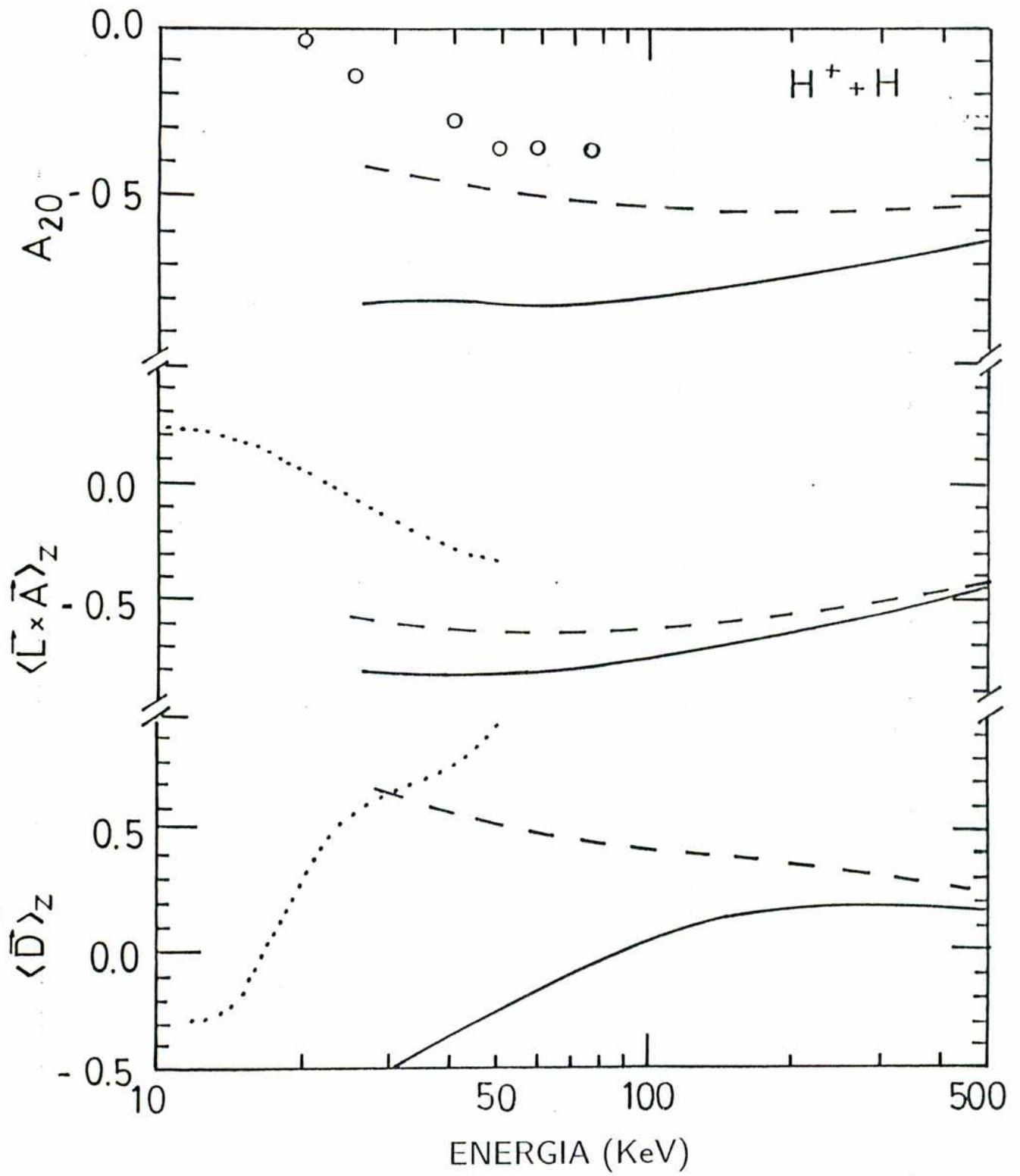
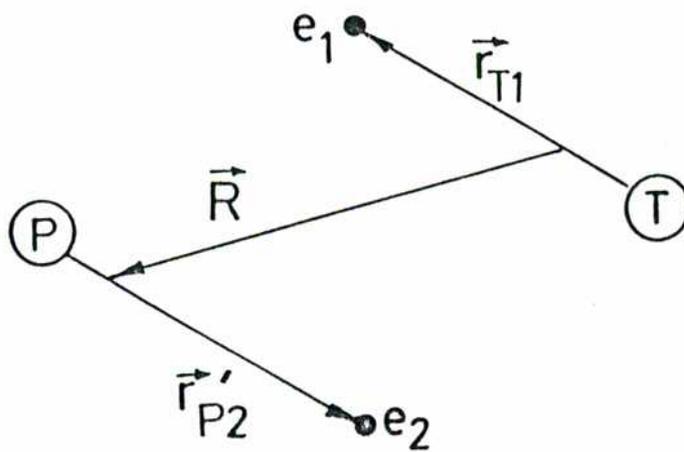
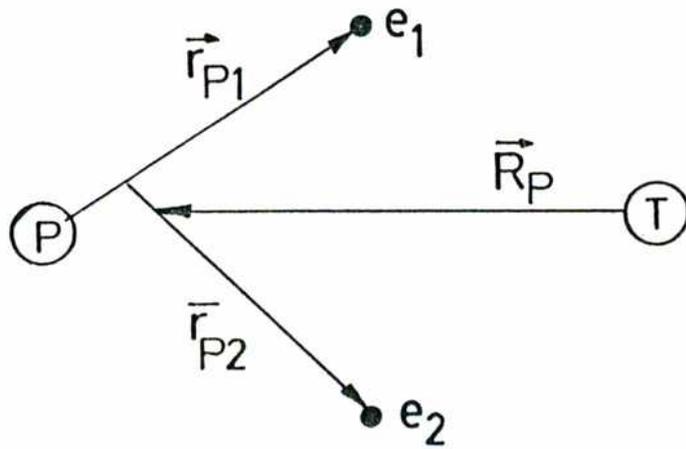
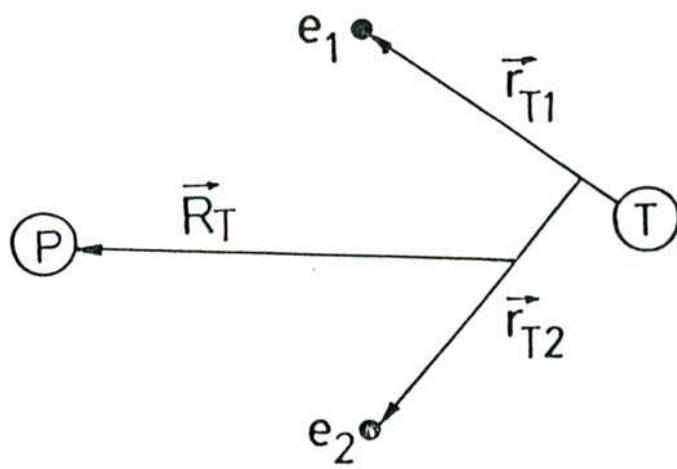
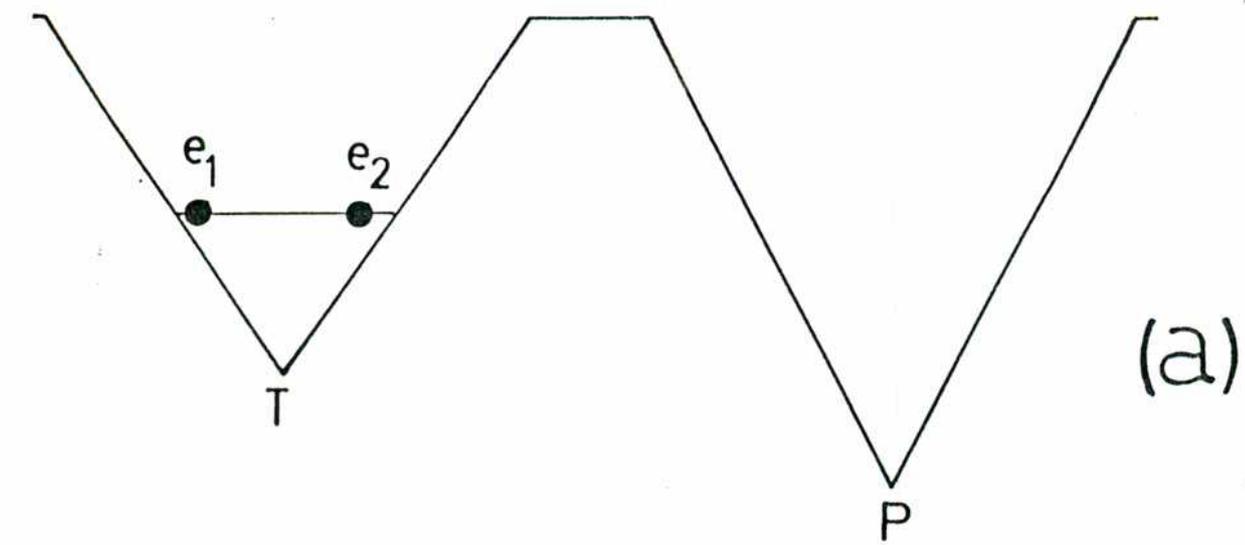


FIGURA 14

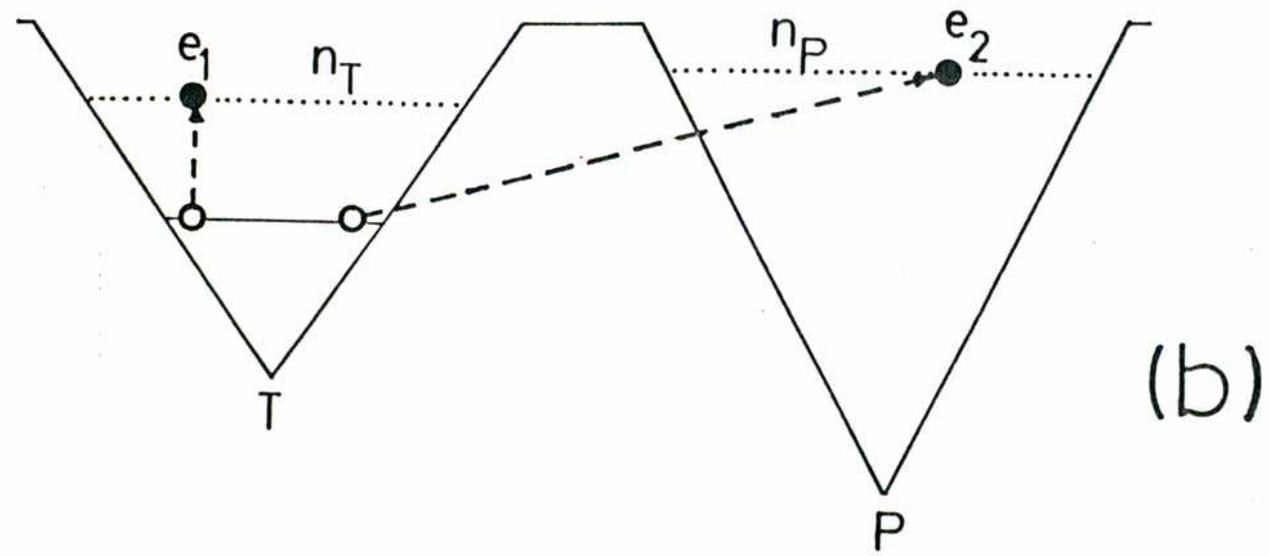


COORDENADAS PARA EL SISTEMA DE
CUATRO PARTICULAS

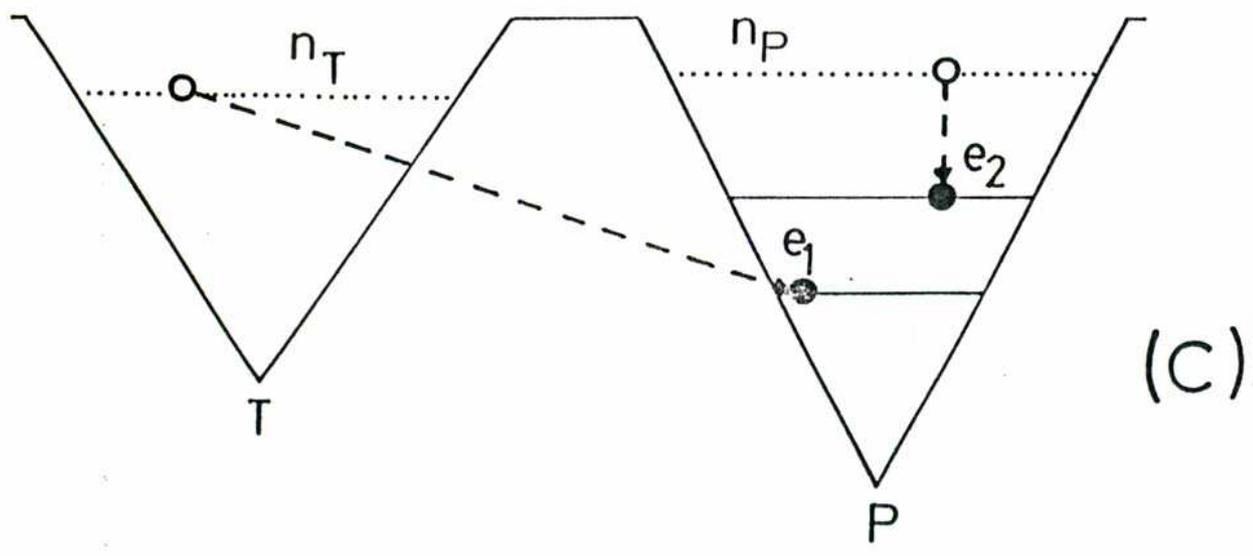
FIGURA 15



(a)



(b)



(c)

FIGURA 16

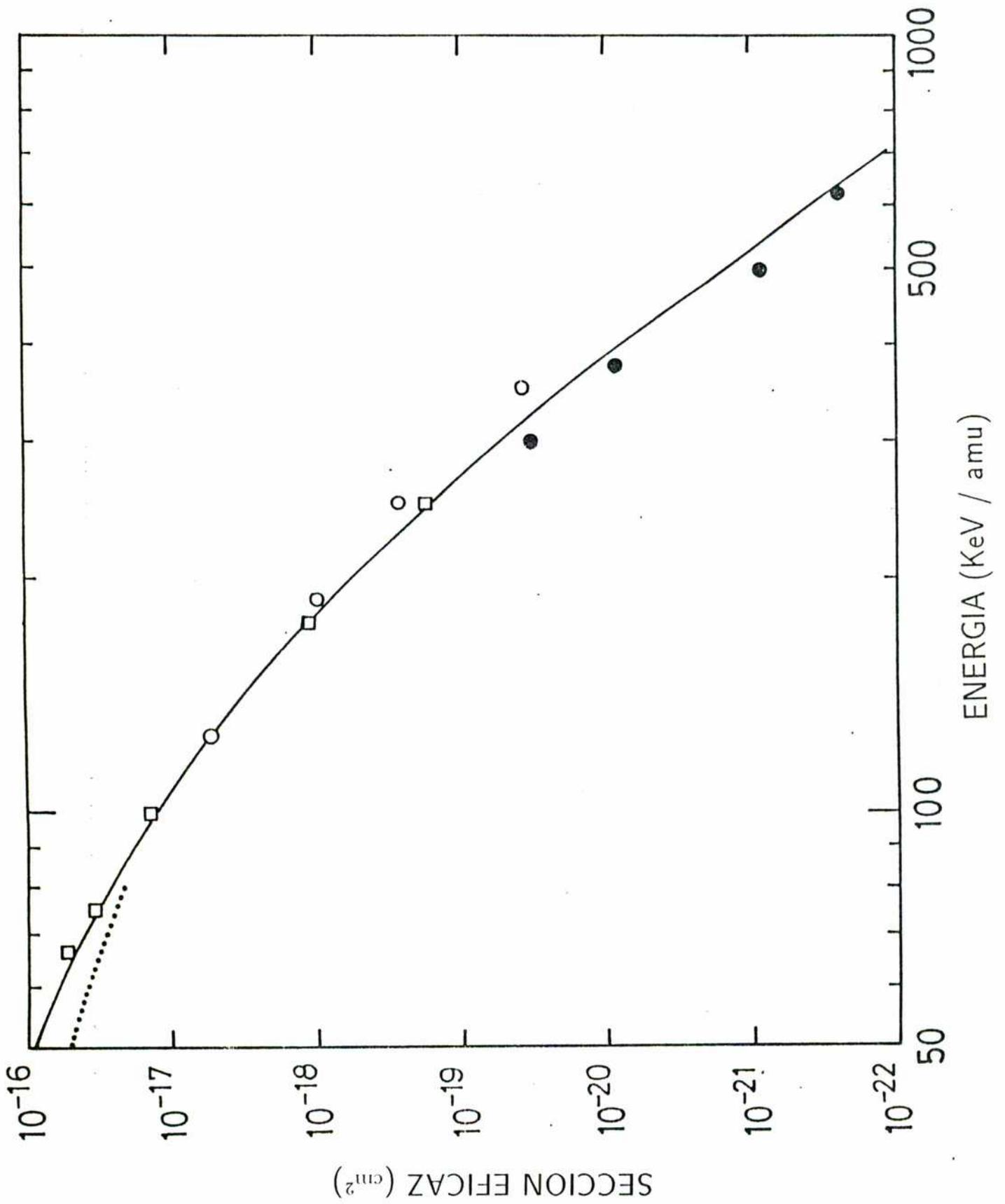


FIGURA 17

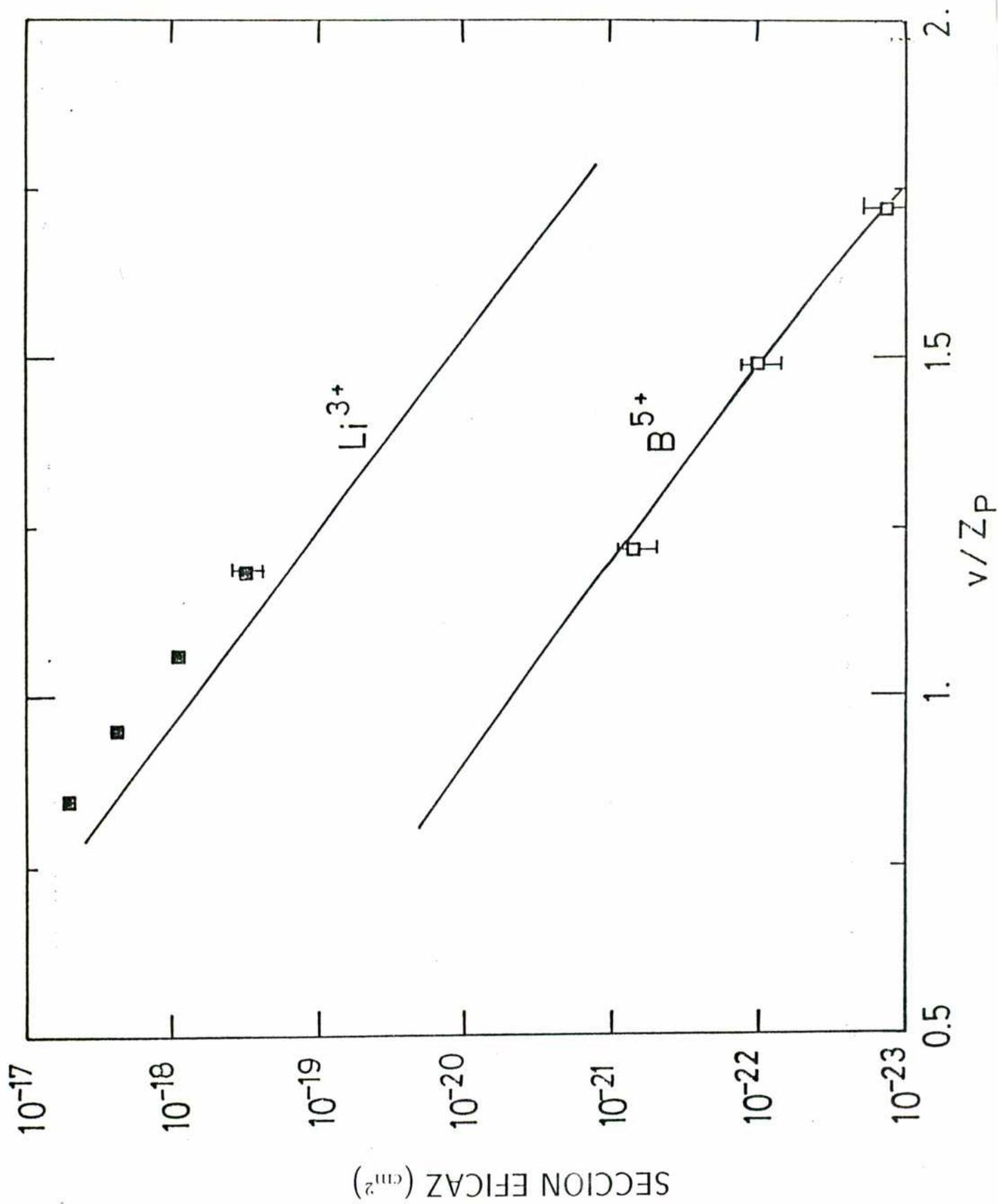


FIGURA 18

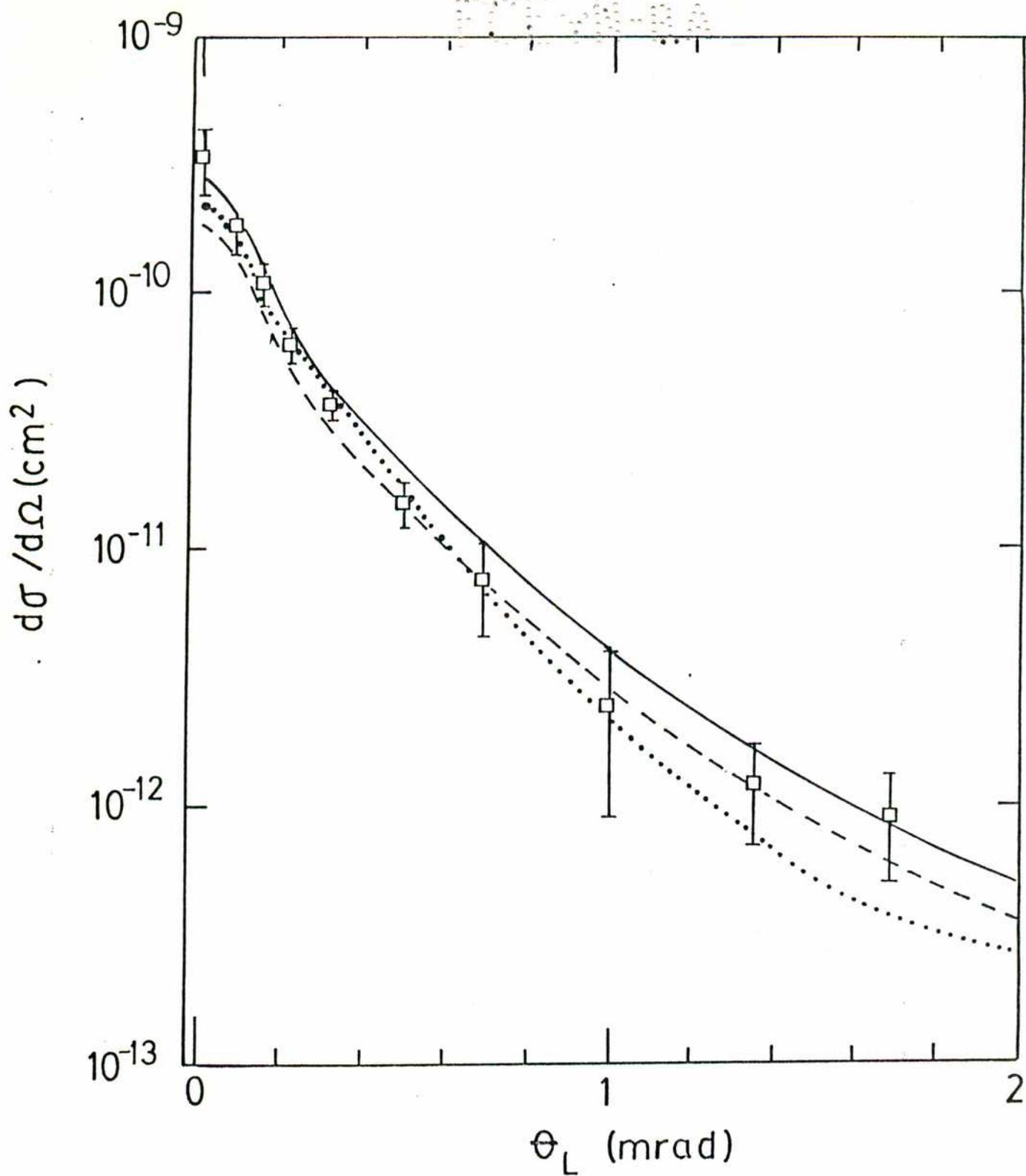


FIGURA 19