



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS



## INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS



Control Escolar de Licenciatura

### VOTOS DE APROBATORIOS

Secretaria Ejecutiva del Instituto de Investigación en Ciencias Básicas Aplicadas de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.  
P r e s e n t e.

Por medio de la presente le informamos que después de revisar la versión escrita de la tesis que realizó el C. **CÉSAR ENRIQUE TERÁN CISNEROS** con número de matrícula **10003162** cuyo título es:

**“Procesos de ionización en colisiones de un antiprotón con un átomo de hidrógeno: Formación de protonio”**

Consideramos que **SI** reúne los méritos que son necesarios para continuar los trámites para obtener el título de **Licenciado Ciencias Área Terminal en Física.**

Cuernavaca, Mor a 17 de mayo de 2022

Atentamente  
Por una universidad culta

Se adiciona página con la e-firma UAEM de los siguientes:

Dr. Alejandro Ramírez Solís	(Presidente).
Dr. Rolando Pérez Álvarez	(Secretario).
Dr. Remigio Cabrera Trujillo	(Vocal).
Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos	(Suplente).
Dr. José Francisco Recamier Angelini	(Suplente).



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

### Sello electrónico

**REMIGIO CABRERA TRUJILLO** | Fecha:2022-05-17 08:52:32 | Firmante

aZ+Sk1r09s+TsA3SVrpj1ikwpQAYqfhl+4UjsCUsbAV/7c94yr3GIGctVIDq3Jafbt22ORUnqjA0PvqQ4bXqf46tUAAtmf7VanqmkzBHicmOz0tqg29uhQgAol76RawAoUR5PHfe67PX6QNX+sO+L3CQA21Tgt+I6WkZJF+I60MPCwxDt8xHSqXSUVteSelxNG2PCoJvnKjXypzyXMZehBi8eo7K0PqeFVE4FP/DGqGmtCzWfaROck+nL7+rw1jRW3N/Ed2AkH0EXnTarXsK1qfH9I+NDOcI6LcBhaug8fie4PaADLnFKuCb5IIGTWIhsnoBHK2oMFmXW3qrqNDdQ==

**ALEJANDRO RAMIREZ SOLIS** | Fecha:2022-05-17 10:22:46 | Firmante

0gRt4QcrXKkuq4G2P7pyBx9ITwVHpm+bxp/NR0m73re/1Sl2ao7P4XqSpn29+r782bd5wZp0F+TLqa3Kx36enzGfkr2sUtQuXdHiQdN411mLzVJer1BGNqSITp+6YnmD5HzWwpUZJ2uqo1VxJoHLyCBmFNbisJV4kiOco5CMBsFtE77IzF8n/mSj41UJp8+LVOYmKn8s4M7+yeiS3jL9v5fdDePaWz5OjGLQyU+uUUVGxb3uoFhR36f2vktKx0RbNk1vOmFmDd0wG/We8s/lqWV0moF9DL5mS7PhMcBZRn8rPTVeOanPC57NgPP2QvcY8MTiinFQEHlLol23JeA==

**ROLANDO PEREZ ALVAREZ** | Fecha:2022-05-17 10:47:59 | Firmante

KVa5U1ah2FabRw2vupVVFY6KsDO3f29W9u2TT0LF/kVUUaWOAvidUJCNsNidUDuYwfpTtNcDnBvbJZJbPZwLBTSA0olynP71oJbotvHAvoVbF7Fqp0ZLVMQyUADDWgX1bFA/ctJPFrNdTKU6R7GW+dyYc3fKT5huRL+FbEs72KY2DRq2pJ7tEMo4TEwYqNtgb1Hn+OJR9m1VnAeRe+TC5me7pPTzwNQ8m3uTEGNPiV2Pz5co0z3rGTt3uzpDmnLJ/EHJiGg/HdigVJSOJup4EqI5QpVsgPpujodNDxE26TxzOOuNcRLwu3vONmF9xcPCb/7AqeWjfr+rmPILVI9YVcRA==

**MIGUEL EDUARDO MORA RAMOS** | Fecha:2022-05-17 13:24:31 | Firmante

xK6xhuOCThS6nDrMJIzqQ5Y3blqa5B2XZCQ5JwWkhjHidGpXIIctbNynrAxI3UebaS0t9jNoUOPrnVPWDVX7OOAMhyh6hwG1rgLeTV55GDmVUtVAllybwWuVRL0OQiSxwggVvxT9NNIYkQsFL4Y4d2Ef0xTGunfr+0cMbK6EIZImZ7GgU584qUKW2SYE2tPwhSRjF9D6qXTiViQ8eo/cNVALjWcZxr8r6O34Ey1gq6ePDtjb3nOiHpMX0VoJxi8dmew4XyXUDBW1XBB8L0rt0lkrksYgbVj2+fga7nXoP6OcyxXqqqFj8ooQsf6U8atbQiUGKBR455DsFnGpR1ttz/g==

**JOSÉ FRANCISCO RÉCAMIER ANGELINI** | Fecha:2022-05-17 16:50:29 | Firmante

OwixWm9utnMJl9ka3JansKsqle8sV6QJ/6syE7L2Uyos2H4xmVFPipuVxbdzQmBI62hVzY/lcewOP24u3foQ8ugFQ2v4SM8dDZLWEnvK9VHmd9U2cV6qVc8Rs7g1g0D+ZDC33HvCXyBaQzE2co+KpL5L6iSjPOgJHRQPbMtI466/IFPS9tukmuiV+c8vms+hgIcwl+EqM9MDR+syUIJvbZsCpn4E8TVZNRpdzhsN1Q94wfo5VtpoELI4Dkhz9rAaQf9/Q5yA/1ScnzIVbfQNGzuHC86p6ubXLx215LAGCjybBzXhBMNktI5iOYyhZDxhJiuyGkljYhO7FXaYRIIdw==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



7cyS61ILa

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/aokRb7JH05YEJnMiZysVDoXer5YkJz>





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

---

---

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

PROCESOS DE IONIZACIÓN EN COLISIONES DE UN  
ANTIPROTÓN CON UN ÁTOMO DE HIDRÓGENO: FORMACIÓN  
DE PROTONIO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADO EN CIENCIAS ÁREA TERMINAL EN FÍSICA

PRESENTA:

CÉSAR ENRIQUE TERÁN CISNEROS

TUTOR:

DR. REMIGIO CABRERA TRUJILLO

Cuernavaca, Morelos, 2022



# Agradecimientos

A mamá Chela por guiarme en todas mis decisiones, motivarme a cumplir mis objetivos, tener fe en mí y enseñarme a ser constante. A mi papá por darme todo el apoyo y cariño que he necesitado. A mi hermano por ser mi ejemplo a seguir. A Marianita por quererme, creer en mí y motivarme a seguir adelante.

A mi familia, mis cuatro abuelos y todos mis tíos, quienes siempre me enseñan cosas nuevas y me apoyan en todo.

Al Dr. Remigio por aceptar ser mi asesor, enseñarme física mediante la disciplina y la constancia; por darme sus consejos y su apoyo, motivarme a plantearme grandes metas y por recordarme que antes de ser un buen científico hay que ser un buen ser humano.

A todos mis maestros de la licenciatura por hacerme disfrutar las clases y apoyarme en mi formación académica.

A mis amigos que han compartido parte de su vida conmigo; a Anayeli, Colver, Francisco, Gerson, Jair y Santiago por mostrarme su apoyo, por explicarme cosas que no entendía y hacerme disfrutar de la carrera. A mis amigas Frida, Bety, Dana y Susana por estar en las buenas y en las malas.

A mis sinodales Dr. Alejandro Ramírez, Dr. Rolando Pérez, Dr. Mora Ramos y Dr. José Recamier, quienes despertaron mi interés por la física. Así como al proyecto PAPIIT IN111820 por el apoyo brindado.

# Índice general

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>5</b>
§1.1	Propósito de este trabajo . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Método de diferencias finitas aplicado a la ecuación de Schrödinger</b>	<b>10</b>
§2.1	Diferencias finitas . . . . .	11
§2.1.1	Funciones . . . . .	11
§2.1.2	Derivadas parciales . . . . .	11
§2.1.3	Integrales . . . . .	13
§2.2	Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con diferencias finitas . . . . .	13
§2.3	Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con diferencias finitas . . . . .	15
§2.4	Método de Crank-Nicolson unidimensional . . . . .	16
§2.5	Método de Crank-Nicolson tridimensional . . . . .	18
§2.6	Ecuación de Schrödinger en tiempo imaginario . . . . .	24
<b>3</b>	<b>Aplicaciones</b>	<b>27</b>
§3.1	Aplicación del método de diferencias finitas y del método de Crank-Nicolson . . . . .	27
§3.1.1	Oscilador armónico . . . . .	27
§3.1.2	Parte radial del átomo de hidrógeno . . . . .	29
§3.1.3	Paquete gaussiano libre (Efecto Ramsauer-Townsend) . . . . .	32
§3.2	Estado base del átomo de hidrógeno a partir del método de Crank-Nicolson con tiempo imaginario . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Colisiones atómicas con trayectorias rectilíneas</b>	<b>43</b>
§4.1	Clasificación de colisiones atómicas . . . . .	43
§4.1.1	Canales . . . . .	44

---

§4.2	Cálculo de la probabilidad de captura electrónica y la sección eficaz de captura . . . . .	45
§4.3	Cálculo de la probabilidad de ionización y la sección eficaz de ionización . . . . .	46
§4.3.1	Potenciales complejos . . . . .	48
§4.3.2	Funciones de enmascaramiento . . . . .	50
§4.4	Colisión entre un protón y un átomo de hidrógeno . . . . .	52
§4.4.1	Probabilidad de captura electrónica . . . . .	55
§4.5	Colisión entre un antiprotón y un átomo de hidrógeno . . . . .	59
§4.5.1	Probabilidad de ionización . . . . .	64
§4.6	Colisión entre un antiprotón y un átomo de positronio . . . . .	68
<b>5</b>	<b>Dinámica electrón-núcleo</b>	<b>70</b>
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>77</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>81</b>

# Índice de figuras

2.1	Red uniforme en el espacio-tiempo con $\Delta x = \Delta x_k$ y $\Delta t = \Delta t^n$ constantes. . . . .	11
3.1	Estado base del oscilador armónico calculado de forma analítica y numérica. . . . .	28
3.2	Estado base de la parte radial del átomo de hidrógeno calculado de forma analítica y numérica. . . . .	31
3.3	Coefficientes de transmisión y de reflexión como función del cuadrado de la velocidad. .	40
3.4	Densidades de probabilidad electrónicas del estado base del átomo de hidrógeno confinado en una malla uniforme $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2 \text{ a.u.}$ ( $\Delta = 0.2 \text{ a.u.}$ ) y en una malla uniforme $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.4 \text{ a.u.}$ ( $\Delta = 0.4 \text{ a.u.}$ ), comparadas con la densidad de probabilidad electrónica analítica del átomo de hidrógeno en dicho estado. . . . .	41
4.1	Dinámica de la colisión $p + H$ para una energía de colisión de $1 \text{ keV}$ y un parámetro de impacto de $b = 2.0 \text{ a.u.}$ . . . . .	53
4.2	Densidad de probabilidad electrónica para la colisión $p+H$ con el parámetro de impacto $b = 2.0 \text{ a.u.}$ y con una energía de colisión de $1 \text{ keV}$ . . . . .	55
4.3	$bP(b)$ en función del parámetro de impacto cuando la energía de colisión es de $1 \text{ keV}$ . . . . .	56
4.4	Mapa de densidad de $bP(b)$ en función del parámetro de impacto y de la energía de colisión para la colisión $p + H$ . . . . .	57
4.5	Sección eficaz total de captura para la colisión $p + H$ a distintas energías de colisión calculada a través de diferencias finitas y comparada con los resultados experimentales: Gealy y Van Zyl, Fite et. al. y McClure. . . . .	58
4.6	Dinámica de la colisión $\bar{p} + H$ para una energía de colisión de $1 \text{ keV}$ y un parámetro de impacto de $b = 1.2 \text{ a.u.}$ en una malla sin paredes absorbentes. . . . .	60
4.7	Densidad de probabilidad electrónica con distintas funciones de enmascaramiento para la colisión $\bar{p} + H$ , donde $q = \left( \frac{\pi z_{max}-z_i }{2L} \right)$ . . . . .	61

---

4.8	Dinámica de la colisión $\bar{p} + H$ para una energía de colisión de 1 $keV$ y un parámetro de impacto de $b = 1.2 a.u.$ en una malla con paredes absorbentes. . . . .	63
4.9	Norma de la función de onda para distintos parámetros de impacto para una energía de colisión de 1 $keV$ para la colisión $\bar{p} + H$ . . . . .	65
4.10	Mapa de densidad de $bP(b)$ para la probabilidad de ionización en función del parámetro de impacto y la energía de colisión para la colisión $\bar{p} + H$ . . . . .	66
4.11	Sección eficaz total de ionización para la colisión $\bar{p} + H$ a distintas energías de colisión calculada con diferencias finitas y comparada con los modelos teóricos de Schultz et. al., Tong et. al., Wells et. al. y el experimento de Knudsen et. al. . . . .	67
4.12	Densidad de probabilidad electrónica del estado base del átomo de positronio en una malla uniforme $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.4 a.u.$ ( $\Delta = 0.4 a.u.$ ) comparada con la densidad de probabilidad electrónica analítica. . . . .	69

# Capítulo 1

## Introducción

El estudio de colisiones atómicas ha presentado grandes avances a la ciencia actual gracias a la teoría cuántica. Los modelos teóricos para estudiar procesos de dispersión entre partículas cargadas y átomos han permitido comprobar que las teorías desarrolladas hasta ahora, son compatibles con los resultados que arrojan los experimentos bajo el marco conceptual de la mecánica cuántica. Para esto, la computación científica ha sido una pieza fundamental en la aceptación de estos modelos; sin esta herramienta no tendríamos forma eficaz de convencer que los cálculos teóricos son correctos.

Debido a que en la segunda mitad del siglo XX las computadoras comenzaron a tener una gran capacidad para hacer cálculos numéricos, los desarrollos teóricos planteados por científicos para resolver problemas actuales han sido concretados con mayor facilidad. En especial, en el área de la física atómica se han estudiado los procesos en los que partículas cargadas interactúan con átomos o moléculas de todo tipo. Los resultados de estas interacciones son procesos de captura electrónica, ionización, fragmentación molecular, etc. Algunos de estos procesos son de gran interés para la medicina y la industria, por lo que tener un modelo teórico que describa procesos de dispersión es de gran importancia para el desarrollo tecnológico y el sector salud.

Tomando en cuenta el sector salud, por ejemplo, se puede estudiar la deposición de energía de la irradiación de hidrógeno neutro en biomoléculas, ya que esto permite comprender el daño celular por iones pesados en radioterapia y dosimetría. Un claro ejemplo de este tipo de trabajos es el estudio realizado por C. Martínez, F. J. Domínguez y R. Cabrera sobre los efectos

rotacionales y vibracionales en la pérdida de energía del hidrógeno colisionando con la glicina a bajas energías de irradiación [1]; colisiones moleculares como las que se menciona anteriormente son desarrollos teóricos que se llevan a cabo con distintas teorías, las cuales a su vez tienen las bases de la mecánica cuántica.

Para comenzar a interactuar con este tipo de procesos, es conveniente trabajar colisiones atómicas que permitan asegurar que los resultados teóricos son compatibles con los resultados experimentales; los experimentos para este tipo de colisiones no son para nada sencillos y los que han sido de gran relevancia para este área son las colisiones entre protones/antiprotones con átomos de hidrógeno. Este tipo de colisiones permiten observar procesos de captura electrónica, de ionización, e incluso de formación de átomos exóticos (en particular, átomos de protonio).

Existen varios modelos teóricos sobre este tipo de colisiones como el realizado por Schultz [2], el cual presenta una descripción de la ionización de hidrógeno e iones hidrogénicos por impacto de antiprotones (antipartícula del protón), basada en soluciones numéricas a muy gran escala de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Posteriormente en 2001, Tong et. al. [3] presenta su trabajo en donde se estudia la ionización de un átomo de hidrógeno por impacto de un antiprotón en un rango de energía de  $0.1 \text{ keV}$  a  $1000 \text{ keV}$  tomando una aproximación semiclásica, en donde la evolución en el tiempo de la función de onda electrónica se propaga mediante el método del operador dividido con un método pseudoespectral generalizado en la representación de energía.

Trabajos más recientes como el realizado por B. J. Killian et. al. [4], emplean el formalismo de Dinámica Electrón-Núcleo (END por sus siglas en inglés) para investigar los procesos de dispersión y transferencia de carga resonante en la colisión de protones en átomos de hidrógeno.

Cada uno de estos modelos teóricos comparan sus resultados con los datos experimentales de Knudsen [5], quien presenta datos experimentales para la ionización de átomos y moléculas por impacto de antiprotones obtenidos a partir del acelerador LEAR en el CERN, durante la colaboración PS194.

Por otro lado, estudiar colisiones atómicas nos permite desarrollar métodos y experimentos para la formación de cierto tipo de átomos, como el átomo exótico de protonio en la colisión de antiprotones con hidrógeno, pero no es el único en el que podemos pensar; además de átomos exóticos, podemos formar antimateria. Un ejemplo es la formación de antihidrógeno, el cual es el átomo de antimateria más simple formado por un antiprotón y un positrón.

La producción experimental del antihidrógeno se logró por primera vez en 1995 en el CERN, donde se produjeron algunos átomos de antihidrógeno. Posteriormente, en 2002, los experimentos ATHENA y ATRAP demostraron que era posible producir átomos de antihidrógeno en grandes cantidades; sin embargo, el experimento ALPHA se ha encargado en los últimos años de generar grandes avances en el estudio de átomos de antihidrógeno, como transiciones electrónicas en estos átomos.

Existen varios procesos para la formación de antihidrógeno, sin embargo, uno de los procesos más simples es mediante la colisión de un antiprotón con un átomo de positronio (un electrón y un positrón ligados entre sí). Este proceso de dispersión teóricamente es posible y se han desarrollado varios modelos desde finales del siglo XX; algunos ejemplos son el método Kohn-variacional de Humberston [6], donde se consideró solo la formación del antihidrógeno en su estado base, o el método de canales acoplados dependiente del tiempo por Yamanaka y Kino [7], quienes presentaron sus resultados teóricos en 2002. Incluso se han utilizado otros métodos como la aproximación de Born a primer orden [8], la simulación de la trayectoria clásica Monte Carlo [9], o el método adiabático de cruce oculto [10].

## 1.1. Propósito de este trabajo

Como primer objetivo, se busca demostrar que el método de diferencias finitas y el método de Crank-Nicolson dan resultados aceptables aplicándolos a problemas conocidos de la mecánica cuántica, por ejemplo, el oscilador armónico cuántico, la parte radial del átomo de hidrógeno y los coeficientes de reflexión y transmisión en el efecto Ramsauer-Townsend. Para obtener estos resultados se utiliza el lenguaje de programación Fortran 95.

Posteriormente, se estudia la colisión de un protón con un átomo de hidrógeno, y la colisión de un antiprotón con un átomo de hidrógeno; estas colisiones nos permitirán estudiar procesos de captura electrónica, de ionización e incluso de formación de protonio. En el capítulo 4 se explica cómo trabajar con el proyectil siguiendo trayectorias rectilíneas y con el núcleo del átomo fijo; además, en este mismo capítulo se implementan las paredes absorbentes para el proceso de ionización en las colisiones. Se presentan los resultados comparados con los datos experimentales.

La posible formación de protonio en la colisión de un antiprotón con un átomo de hidrógeno debe de ser tratada con cuidado porque el átomo de protonio está formado por un protón y un antiprotón, lo que nos puede llevar a procesos de aniquilación entre partícula y antipartícula que deberán de ser estudiados a partir de la ecuación de Dirac, en donde los efectos relativistas son importantes. De hecho, el estado base del átomo de protonio es inestable debido a la aniquilación y el tiempo de vida media para este caso es de  $\tau \sim 5 \times 10^{-19}$  s. Sin embargo, el protonio en estados excitados es estable ya que el tiempo de vida media, considerando aniquilación, es proporcional a  $n^3 (a_0/R_*)^{2l}$ , donde  $n$  es el número cuántico principal,  $a_0$  es el radio de Bohr,  $R_*$  es el rango de la fuerza nuclear fuerte y  $l$  es el momento angular orbital inicial [11].

Si consideramos que la energía se conserva en la colisión antiprotón-hidrógeno, se obtiene que el antiprotón y el protón del átomo de hidrógeno pueden llegar a ligarse (formando protonio) en un estado de Rydberg con  $n \sim 30$ , lo que nos lleva a una vida media de  $\tau \sim 10^{26}$  años cuando  $l = 5$  [11]. De esta manera, será suficiente estudiar la formación de protonio a través de la ecuación de Schrödinger y no de la ecuación de Dirac.

Además, se presentan algunos detalles importantes para estudiar la colisión antiprotón-positronio, y el posible canal de formación de antihidrógeno, y se muestra el desarrollo teórico de la dinámica electrón-núcleo, el cual se pretende utilizar para obtener procesos de dispersión más realistas.

Por último, en el capítulo 6 se presentan las conclusiones de los resultados obtenidos, se discuten las implicaciones y las limitaciones presentes en este trabajo, y se analiza una posible continuación en este tipo de análisis teóricos.

## Capítulo 2

# Método de diferencias finitas aplicado a la ecuación de Schrödinger

La física de muchos problemas dependientes del tiempo se puede describir por sistemas acoplados de ecuaciones diferenciales parciales (generalmente no lineales), complementados por las condiciones iniciales del sistema. Un ejemplo es la ecuación de Schrödinger en una dimensión:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad . \quad (2.1)$$

O en el caso independiente del tiempo

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x) \quad . \quad (2.2)$$

Para resolver esta ecuación utilizaremos el método de diferencias finitas que se explica a continuación.

El concepto de la aproximación en diferencias finitas a sistemas que evolucionan en el tiempo puede ser ilustrado si consideramos un problema en  $1 + 1$  dimensiones  $(x, t)$ .

En la figura 2.1 se muestra un tipo de red de computo que consiste en un sistema de posiciones fijas  $x_k$ , que pueden o no estar espaciadas uniformemente y que se definen en un tiempo discreto  $t^n$ .

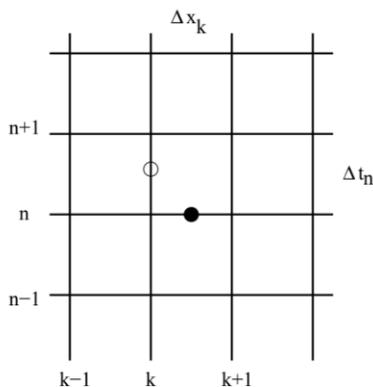


Figura 2.1: Red uniforme en el espacio-tiempo con  $\Delta x = \Delta x_k$  y  $\Delta t = \Delta t^n$  constantes.

## 2.1. Diferencias finitas

### 2.1.1. Funciones

Si el valor de una función  $f(x, t)$  en el punto  $(x, t)$  se asocia a un punto en la red, entonces

$$f(x, t) = f(x_k, t^n) \rightarrow f_k^n \quad . \quad (2.3)$$

Nótese que utilizaremos subíndices para representar dependencia espacial y superíndices para dependencia temporal.

### 2.1.2. Derivadas parciales

La aproximación en diferencias finitas de las derivadas parciales de  $f(x, t)$  se puede construir del desarrollo en series de Taylor alrededor de  $x_0$ . Esto da

$$f(x_0 + \Delta x, t) = f(x_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_0} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_0} \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \quad (2.4)$$

y

$$f(x_0 - \Delta x, t) = f(x_0) - \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_0} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_0} \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \quad . \quad (2.5)$$

De la ecuación (2.4) obtenemos lo que se conoce como una diferencia hacia adelante:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad . \quad (2.6)$$

Y de la ecuación (2.5) obtenemos lo que se define como una diferencia hacia atrás:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_0} = \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad . \quad (2.7)$$

Una aproximación para la segunda derivada se obtiene del desarrollo en series de Taylor sumando la ecuación (2.4) y de la ecuación (2.5):

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^3) \quad . \quad (2.8)$$

Supóngase que  $f(x, t)$  corresponde a un punto de la red espacial:  $x_0 \rightarrow x_k$ ,  $x_0 + \Delta x \rightarrow x_{k+1}$ ,  $x_0 - \Delta x \rightarrow x_{k-1}$  y  $f(x, t) \rightarrow f_k^n$ . Entonces, la ecuación (2.6) que describe una diferencia hacia adelante se convierte en

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_k} = \frac{f_{k+1} - f_k}{x_{k+1} - x_k} + O(\Delta x^2) \quad , \quad (2.9)$$

la cual representa una primera aproximación de la diferenciación hacia adelante (en el espacio) a  $\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_k}$  en el punto de la red  $k$ .

De la misma manera, la ecuación (2.7) nos da la aproximación hacia atrás de la diferencia

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_k} = \frac{f_k - f_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} + O(\Delta x^2) \quad . \quad (2.10)$$

Y para la segunda derivada parcial de  $f(x, t)$  en el punto de la red  $x_k$  de una red uniforme, se obtiene

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_k} = \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^3) \quad . \quad (2.11)$$

### 2.1.3. Integrales

Para la integración, utilizaremos la definición de Riemann de una integral, es decir

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{N-1} f_k(x_{k+1} - x_k) \quad , \quad (2.12)$$

donde  $a = x_1$  y  $b = x_N$ , que para una red uniforme nos da

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{N-1} f_k \Delta x \quad . \quad (2.13)$$

## 2.2. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con diferencias finitas

En el caso de resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial  $V(x)$ , la aproximación a la ecuación diferencial en diferencias finitas se obtiene sustituyendo la expresión para la segunda derivada (2.11) en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (2.2); así, para una red uniforme con  $x_{k+1} - x_k = \Delta x$ , se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\Psi_{k+1} - 2\Psi_k + \Psi_{k-1}}{\Delta x^2} \right] + V_k \Psi_k = E \Psi_k \quad . \quad (2.14)$$

Como  $k = \{1, \dots, N\}$ , entonces la ecuación (2.14) tiene una solución completa cuando se especifican las condiciones iniciales o de frontera.

En nuestro caso,  $\Psi(x, t) \in \mathcal{L}^2$  (de cuadrado integrable), tal que en infinito la función se anula. Como no podemos representar fronteras infinitas en una computadora, estas estarán truncadas tal que  $\Psi_{k=0} = 0$  y  $\Psi_{k=N+1} = 0$ . Así, tenemos para  $k = 1$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu\Delta x^2} \{\Psi_2 - 2\Psi_1\} + V_1 \Psi_1 = E \Psi_1 \quad (2.15)$$

y para  $k = N + 1$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu\Delta x^2} \{-2\Psi_N + \Psi_{N-1}\} + V_N \Psi_N = E \Psi_N \quad . \quad (2.16)$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en diferencias finitas (2.14) junto con

la condición de frontera se puede escribir en forma de matriz haciendo un arreglo del vector  $\tilde{\Psi} = \{\Psi_k\}$ , así

$$\mathbf{H}\tilde{\Psi} = E\tilde{\Psi} \quad . \quad (2.17)$$

Donde  $\mathbf{H}$  tiene los elementos dados por

$$H_{i,i} = \frac{\hbar^2}{\mu\Delta x^2} + V_i \quad , \quad (2.18)$$

$$H_{i,i+1} = -\frac{\hbar^2}{2\mu\Delta x^2} \quad , \quad (2.19)$$

$$H_{i,i-1} = -\frac{\hbar^2}{2\mu\Delta x^2} \quad . \quad (2.20)$$

La cual es una matriz hermitiana tridiagonal de la forma

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & H_{32} & H_{33} & H_{34} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & H_{N-1,N-2} & H_{N-1,N-1} & H_{N-1,N} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & H_{N,N-1} & H_{N,N} \end{pmatrix} \quad . \quad (2.21)$$

La ecuación de Schrödinger (2.17) representa así un problema de eigenvalores en álgebra matricial con la ventaja de tener una matriz tridiagonal. El número de eigenvectores y de eigenvalores depende así del número de puntos en la red.

## 2.3. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con diferencias finitas

Para el caso dependiente del tiempo, utilizamos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (2.1) y aplicando la aproximación de diferencias finitas, tenemos que

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\Psi_{k+1}^n - 2\Psi_k^n + \Psi_{k-1}^n}{\Delta x^2} \right] + V_k \Psi_k = i\hbar \left( \frac{\Psi_k^{n+1} - \Psi_k^n}{t^{n+1} - t^n} \right) . \quad (2.22)$$

Así, para el incremento en el tiempo  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  tenemos que la función de onda al tiempo  $t = t^n + \Delta t$  está dada por

$$\Psi_k^{n+1} = -\frac{\hbar^2 \Delta t}{i2\mu \Delta x^2} [\Psi_{k+1}^n - 2\Psi_k^n + \Psi_{k-1}^n] - \frac{i\Delta t}{\hbar} V_k \Psi_k^n + \Psi_k^n . \quad (2.23)$$

La ecuación (2.23) representa un ejemplo del método explícito, puesto que la solución a un tiempo posterior, depende de la solución a un tiempo anterior. Esta última ecuación se puede reescribir como

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = \left[ 1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{H} \right] \tilde{\Psi}^n , \quad (2.24)$$

donde

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu \Delta x^2} (\Psi_{k+1}^n - 2\Psi_k^n + \Psi_{k-1}^n) + V_k .$$

Más aún, sabemos que la solución a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (2.1) para el hamiltoniano independiente del tiempo  $\hat{\mathbf{H}}$  es

$$\Psi(x, t) = e^{-i\frac{(t-t_0)}{\hbar} \hat{\mathbf{H}}} \Psi(x, t_0) . \quad (2.25)$$

De aquí vemos que la ecuación (2.24) obtenida de aplicar diferencias finitas es el término a primer orden de la solución general (2.25). Así podemos usar la ecuación anterior junto con el método de diferencias finitas para obtener una mejor evolución en el tiempo de la función de onda que pueda ser implementada computacionalmente.

## 2.4. Método de Crank-Nicolson unidimensional

Utilizando la técnica de separación de operadores, podemos escribir la solución a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (2.25) como

$$\Psi(x, t) = e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}(\hat{T}+V(x))}\Psi(x, t_0) \quad , \quad (2.26)$$

donde  $\Delta t = t - t_0$ . Suponiendo que  $[T, V]\Delta t$  es muy pequeño, separemos el operador de energía cinética de la siguiente manera

$$\Psi(x, t) \simeq e^{-i\frac{\Delta t}{2\hbar}\hat{T}}e^{-i\frac{\Delta t}{2\hbar}\hat{T}}e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}V(x)}\Psi(x, t_0) \quad . \quad (2.27)$$

Por lo que

$$e^{i\frac{\Delta t}{2\hbar}\hat{T}}\Psi(x, t) \simeq e^{-i\frac{\Delta t}{2\hbar}\hat{T}}e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}V(x)}\Psi(x, t_0) \quad . \quad (2.28)$$

Ahora, si definimos

$$f(x, t, t_0) = e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}V(x)}\Psi(x, t_0) \quad (2.29)$$

obtenemos, a primer orden en la exponencial, lo siguiente:

$$\left[1 + i\frac{\Delta t}{2\hbar}\hat{T}\right]\Psi(x, t) = \left[1 - i\frac{\Delta t}{2\hbar}\hat{T}\right]f(x, t, t_0) \quad . \quad (2.30)$$

En la ecuación (2.30) solo se realizó un desarrollo en series de Taylor para la exponencial y nos quedamos a primer orden. Además, como el operador de energía cinética es  $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ , entonces, aplicando el método de diferencias finitas a la ecuación (2.30), obtenemos

$$\left\{\Psi_k^{n+1} - i\frac{\hbar\Delta t}{4\mu\Delta x^2}(\Psi_{k+1}^{n+1} - 2\Psi_k^{n+1} + \Psi_{k-1}^{n+1})\right\} = \left\{f_k + i\frac{\hbar\Delta t}{4\mu\Delta x^2}(f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1})\right\} \quad , \quad (2.31)$$

lo cual se representa de la siguiente manera en forma matricial

$$\mathbf{A}^+\tilde{\Psi}^{n+1} = \mathbf{A}^-\vec{f} \quad . \quad (2.32)$$

Por lo tanto

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = (\mathbf{A}^+)^{-1}\mathbf{A}^-\vec{f} \quad . \quad (2.33)$$

Este es el método implícito de Crank-Nicolson, en donde ambos lados de la ecuación dependen del tiempo final de evolución. Las matrices  $\mathbf{A}^+$  y  $\mathbf{A}^-$  son matrices tridiagonales con elementos

$$A_{i,i}^{\pm} = 1 \pm 2\nu \quad , \quad (2.34)$$

$$A_{i,i+1}^{\pm} = \mp\nu \quad , \quad (2.35)$$

$$A_{i,i-1}^{\pm} = \mp\nu \quad , \quad (2.36)$$

donde  $\nu = \frac{i\hbar\Delta t}{4\mu\Delta x^2}$ . De esta manera, se tiene que

$$\mathbf{A}^{\pm} = \begin{pmatrix} 1 \pm 2\nu & \mp\nu & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \mp\nu & 1 \pm 2\nu \end{pmatrix} . \quad (2.37)$$

Así, la evolución del sistema se puede resolver a partir de métodos de algebra lineal, como por ejemplo, la descomposición LU de matrices [12].

Es importante aclarar que este método requiere que  $\nu < 1$  para que la propagación de solución sea estable, en caso contrario la propagación de la función de onda es inestable y con ello, se pueden obtener errores numéricos considerables.

## 2.5. Método de Crank-Nicolson tridimensional

Ya se ha descrito el modelo de Crank-Nicolson en una dimensión, pero para tener un modelo más realista del sistema que se estará trabajando, generalizaremos el método a tres dimensiones; así, el estudio de colisiones atómicas para este trabajo será más formal y se obtendrán resultados más interesantes.

Lo primero es identificar que el operador de energía cinética en tres dimensiones no es más que la suma de operadores de energía cinética para cada coordenada espacial, es decir

$$\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{T}}_x + \hat{\mathbf{T}}_y + \hat{\mathbf{T}}_z \quad . \quad (2.38)$$

Ahora, recordemos que la función de onda en una dimensión para cualquier tiempo  $t > t_0$  se puede escribir en términos del operador temporal de la siguiente forma:

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}\right)\Psi(x, t_0) \quad . \quad (2.39)$$

Entonces, para el caso tridimensional, se tendrá:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \exp\left[-i\frac{\Delta t}{\hbar}\left(\hat{\mathbf{T}} + \hat{\mathbf{V}}\right)\right]\Psi(x, y, z, t_0) \\ &\simeq \exp\left[-i\frac{\Delta t}{\hbar}\left(\hat{\mathbf{T}}_x + \hat{\mathbf{T}}_y + \hat{\mathbf{T}}_z\right)\right]\exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{\mathbf{V}}\right)\Psi(x, y, z, t_0) \quad . \end{aligned} \quad (2.40)$$

Para lo que sigue, definamos la función

$$f(x, y, z, t_0) = \exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{\mathbf{V}}\right)\Psi(x, y, z, t_0) \quad . \quad (2.41)$$

Debido a que el operador de energía cinética de cada componente espacial conmuta con cada una de las otras componentes, se tiene que  $[\hat{\mathbf{T}}_i, \hat{\mathbf{T}}_j] = 0$ . De esta manera, se pueden despejar los términos de la energía cinética por medio de la técnica de separación de variables,

obteniendo lo siguiente

$$\begin{aligned} & \exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right] \exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_y\right] \exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_x\right] \Psi(x, y, z, t) \\ & \simeq \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right] \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_y\right] \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_x\right] f(x, y, z, t_0) \quad . \end{aligned} \quad (2.42)$$

Necesitamos ahora discretizar la ecuación (2.42), por lo que tomaremos la aproximación en diferencias finitas para una función en tres dimensiones como se sigue

$$f(x, y, z, t) = f(x_i, y_j, z_k, t^n) \rightarrow f_{i,j,k}^n \quad . \quad (2.43)$$

De esta manera, definamos al vector  $\vec{\Psi}^n = \Psi_{i,j,k}^n$ , donde los índices  $i, j, k$  corresponden a puntos en la red de las coordenadas  $x, y, z$  respectivamente. Por ejemplo, restringiéndonos al caso donde  $N_x = N_y = N_z$ , tendremos que nuestro vector  $\vec{\Psi}^n$  será como una matriz cúbica con elementos  $\Psi_{i,j,k}$ .

De la ecuación (2.42) se expande en un desarrollo en serie de Taylor las exponenciales correspondientes a la coordenada  $x$ , y al aplicar el método de diferencias finitas al operador de energía cinética en  $x$ , obtenemos

$$\begin{aligned} & \exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right] \exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_y\right] \left\{ \Psi_{i,j,k}^{n+1} - \nu_x (\Psi_{i+1,j,k}^{n+1} - 2\Psi_{i,j,k}^{n+1} + \Psi_{i-1,j,k}^{n+1}) \right\} \\ & = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right] \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_y\right] \left\{ f_{i,j,k} + \nu_x (f_{i+1,j,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i-1,j,k}) \right\} \quad , \end{aligned} \quad (2.44)$$

donde  $\nu_x = i\hbar\Delta t/4\mu\Delta x^2$ .

Aquí es importante notar que los índices  $j$  y  $k$  no cambian, por lo que es conveniente definir

los vectores  $\vec{\Phi} = \mathbf{A}^+ \vec{\Psi}^{n+1}$  y  $\vec{g} = \mathbf{A}^- \vec{f}^n$ , donde

$$A_{i,i}^{\pm} = 1 \pm 2\nu_x \quad , \quad (2.45)$$

$$A_{i,i+1}^{\pm} = \mp \nu_x \quad , \quad (2.46)$$

$$A_{i,i-1}^{\pm} = \mp \nu_x \quad , \quad (2.47)$$

con el resto de componentes igual a cero. De esta manera, la ecuación (2.44) se convierte en

$$\exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right]\exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_y\right]\vec{\Phi}^{n+1} = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right]\exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_y\right]\vec{g} \quad . \quad (2.48)$$

Ahora, realicemos el mismo desarrollo en series de Taylor y apliquemos nuevamente el método de diferencias finitas, pero ahora sobre el operador de energía cinética en  $y$ , obteniendo de la ecuación (2.48) lo siguiente:

$$\begin{aligned} \exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right]\left\{\Phi_{i,j,k}^{n+1} - \nu_y(\Phi_{i,j+1,k}^{n+1} - 2\Phi_{i,j,k}^{n+1} + \Phi_{i,j-1,k}^{n+1})\right\} \\ = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right]\left\{g_{i,j,k} + \nu_y(g_{i,j+1,k} - 2g_{i,j,k} + g_{i,j-1,k})\right\} \quad . \quad (2.49) \end{aligned}$$

Aquí  $\nu_y = i\hbar\Delta t/4\mu\Delta y^2$ .

Notemos que en este caso, el índice que cambia es solo el índice  $j$ , es decir, el índice relacionado con la coordenada  $y$ ; por ello, definamos los vectores  $\vec{\xi} = \mathbf{B}^+ \vec{\Phi}^{n+1}$  y  $\vec{h} = \mathbf{B}^- \vec{g}$ , donde

$$B_{i,i}^{\pm} = 1 \pm 2\nu_y \quad , \quad (2.50)$$

$$B_{i,i+1}^{\pm} = \mp \nu_y \quad , \quad (2.51)$$

$$B_{i,i-1}^{\pm} = \mp \nu_y \quad . \quad (2.52)$$

Así, la ecuación (2.49) se convierte en

$$\exp\left[\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right]\vec{\xi}^{n+1} = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{\mathbf{T}}_z\right]\vec{h} \quad . \quad (2.53)$$

Finalmente, volvamos a realizar el desarrollo en series de Taylor y apliquemos el método de diferencias finitas, pero ahora sobre el operador de energía cinética en  $z$ , obteniendo de la ecuación (2.53) lo siguiente:

$$\xi_{i,j,k}^{n+1} - \nu_z (\xi_{i,j,k+1}^{n+1} - 2\xi_{i,j,k}^{n+1} + \xi_{i,j,k-1}^{n+1}) = h_{i,j,k} + \nu_z (h_{i,j,k+1} - 2h_{i,j,k} + h_{i,j,k-1}) \quad , \quad (2.54)$$

donde  $\nu_z = i\hbar\Delta t/4\mu\Delta z^2$ .

Reescribiendo la ecuación (2.54) en forma matricial, se tiene

$$\mathbf{C}^+ \vec{\xi}^{n+1} = \mathbf{C}^- \vec{h} \quad . \quad (2.55)$$

Aquí  $\mathbf{C}^+$  y  $\mathbf{C}^-$  son matrices tridiagonales con la misma estructura que las matrices  $\mathbf{A}^+$ ,  $\mathbf{A}^-$ ,  $\mathbf{B}^+$  y  $\mathbf{B}^-$ . Es decir

$$C_{i,i}^{\pm} = 1 \pm 2\nu_z \quad , \quad (2.56)$$

$$C_{i,i+1}^{\pm} = \mp\nu_z \quad , \quad (2.57)$$

$$C_{i,i-1}^{\pm} = \mp\nu_z \quad . \quad (2.58)$$

Este es el método implícito de Crank-Nicholson en tres dimensiones. Es claro que las matrices  $\mathbf{C}^+$  y  $\mathbf{C}^-$  actúan solo en las componentes de la coordenada  $z$ , por lo que al implementar este método se tendrá un ciclo para la solución en  $z$ , anidado con los dos ciclos anidados para la solución en  $y$  y en  $x$ , respectivamente, para cada paso de tiempo.

De esta manera, para obtener la evolución de nuestro sistema se tendrá que resolver la ecuación

$$\mathbf{C}^+ \mathbf{B}^+ \mathbf{A}^+ \vec{\Psi}^{n+1} = \mathbf{C}^- \mathbf{B}^- \mathbf{A}^- \vec{f} \quad . \quad (2.59)$$

Por lo tanto

$$\vec{\Psi}^{n+1} = (\mathbf{A}^+)^{-1} (\mathbf{B}^+)^{-1} (\mathbf{C}^+)^{-1} \mathbf{C}^- \mathbf{B}^- \mathbf{A}^- \vec{f} \quad . \quad (2.60)$$

Ahora que conocemos la función de onda a un tiempo  $n + 1$ , es importante también obtener la energía total del sistema tratado. Es por ello que necesitamos una expresión discretizada

para el operador hamiltoniano  $\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{T}} + \hat{\mathbf{V}}$ . En particular, nos interesa el valor esperado del hamiltoniano, por lo que será necesario calcular el valor esperado del operador de energía cinética y de la energía potencial. Para la energía cinética se tiene que

$$\langle T \rangle = \iiint_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, y, z) \hat{\mathbf{T}} \Psi(x, y, z) dx dy dz \quad . \quad (2.61)$$

Siguiendo el método de diferencias finitas, podemos expresar la segunda derivada de  $\Psi$  respecto de la coordenada  $x$ , por ejemplo, de la siguiente manera:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, y, z)}{\partial x^2} \approx \frac{\Psi_{i+1,j,k} - 2\Psi_{i,j,k} + \Psi_{i-1,j,k}}{\Delta x^2} \quad . \quad (2.62)$$

De esta manera, la segunda derivada respecto de  $x$  en su forma matricial, considerando el método de diferencias finitas, es

$$D_x = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.63)$$

Así mismo, las segundas derivadas para  $y$  y  $z$  serían

$$D_y = \frac{1}{\Delta y^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad , \quad (2.64)$$

$$D_z = \frac{1}{\Delta z^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} . \quad (2.65)$$

La segunda derivada de la función de onda en tres dimensiones, en su forma matricial, puede ser considerada como la suma de las tres matrices anteriores, es decir

$$D_{x,y,z} = D_x + D_y + D_z . \quad (2.66)$$

Teniendo esto en consideración, el valor esperado de la energía cinética en la malla que utilizaremos para nuestro sistema, considerando la definición de suma de Riemann, es

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{i=1}^{N_x-1} \sum_{j=1}^{N_y-1} \sum_{k=1}^{N_z-1} \Psi_{i,j,k}^* (D_{x,y,z} \Psi)_{i,j,k} \Delta x \Delta y \Delta z . \quad (2.67)$$

Por otro lado, el valor esperado de la energía potencial será

$$\langle V \rangle = \sum_{i=1}^{N_x-1} \sum_{j=1}^{N_y-1} \sum_{k=1}^{N_z-1} \Psi_{i,j,k}^* V_{i,j,k} \Psi_{i,j,k} \Delta x \Delta y \Delta z . \quad (2.68)$$

Con este planteamiento, podemos comenzar a diseñar los códigos correspondientes para resolver la ecuación de Schrödinger para distintos problemas.

## 2.6. Ecuación de Schrödinger en tiempo imaginario

Numéricamente, conocemos muy bien las soluciones a la ecuación de Schrödinger para el caso independiente del tiempo

$$H\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2.69)$$

mediante la aplicación del método de diferencias finitas. Además, para la solución a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$H\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (2.70)$$

también conocemos las soluciones numéricas de cualquier sistema cuántico a partir del método de Crank-Nicolson.

Sin embargo, si nosotros hacemos un cambio de variable en la parte temporal, con la intención de trabajar con tiempos imaginarios, se tendrá que

$$\tau = it \quad , \quad (2.71)$$

de donde se sigue

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} = i \frac{\partial}{\partial \tau} \quad . \quad (2.72)$$

Entonces, la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se convierte en

$$H\Psi = i\hbar \left[ i \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \right] = -\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \quad .$$

Es decir

$$- \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi = \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \quad . \quad (2.73)$$

Esta transformación reemplaza el problema original de la mecánica cuántica con un proceso difusivo, en donde el término entre corchetes, se convierte, según el signo, en un término de absorción o fuente.

Si consideramos  $V(x) = 0$ , obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial \Psi(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, \tau)}{\partial x^2} \quad . \quad (2.74)$$

Ahora, recordemos que la ecuación de difusión en una dimensión es

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad . \quad (2.75)$$

Comparando las ecuaciones (2.74) y (2.75), notamos que, bajo ciertas modificaciones, la ecuación de Schrödinger para tiempo imaginario es semejante a la ecuación de difusión, con una constante de difusión  $D = \hbar/2m$ .

Por otra parte, si ignoramos el término de la energía cinética en la ecuación (2.73), se obtiene

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\frac{V(x)}{\hbar} \Psi \quad . \quad (2.76)$$

Esta es una ecuación diferencial de primer orden que describe procesos de decaimiento o de crecimiento, dependiendo del signo del potencial  $V(x)$ .

En general, la solución a la ecuación de Schrödinger con el tiempo imaginario (2.73) es de la forma:

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-E_n \tau} \quad . \quad (2.77)$$

Para  $\tau$  suficientemente grande, el término dominante en la suma de la ecuación (2.77) es para  $n = 0$ , es decir, obtenemos el estado base

$$\Psi(x, \tau \rightarrow \infty) = c_0 \psi_0 e^{-E_0 \tau} \quad . \quad (2.78)$$

Con esta función de onda, podemos calcular la energía asociada calculando el valor esperado del hamiltoniano de la siguiente manera

$$E = \langle H \rangle = \int \Psi^*(x, \tau \rightarrow \infty) H \Psi(x, \tau \rightarrow \infty) dx \quad . \quad (2.79)$$

Resulta interesante que, una vez hayamos implementado un código que resuelva la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un cierto potencial  $V(x)$  mediante los métodos de diferencias finitas y Crank-Nicolson, podemos hacer el tiempo imaginario y obtener la función de onda del estado base para el sistema deseado en cierta malla numérica que nosotros definamos.

De esta manera, ya no es necesario hacer el cálculo de los eigenvalores. Con empezar la dinámica con una función de onda prueba convergeremos al estado base, el cual será utilizado como función de onda inicial para la evolución con la interacción adecuada.

# Capítulo 3

## Aplicaciones

### 3.1. Aplicación del método de diferencias finitas y del método de Crank-Nicolson

Con la finalidad de verificar la eficacia y precisión de los métodos vistos en el capítulo anterior, a continuación se presentan algunos ejemplos de sistemas cuánticos que son estudiados en un curso básico de mecánica cuántica. La solución de estos problemas será obtenida desde un punto de vista computacional utilizando el método de diferencias finitas y el método de Crank-Nicolson.

#### 3.1.1. Oscilador armónico

El oscilador armónico es uno de los sistemas cuánticos más importantes en la física porque cualquier potencial que trabajemos lo podemos aproximar a un potencial armónico en las proximidades del punto de equilibrio, con ayuda de un desarrollo en series de Taylor para el potencial tratado. Además, podemos resolver la ecuación de Schrödinger para este sistema de manera analítica a partir de dos distintos métodos; uno de estos hace uso de operadores de creación y aniquilación, y el otro conlleva resolver dicha ecuación a partir de un método de serie de potencias. Ambos nos dan las mismas funciones de onda normalizadas, las cuales son:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad , \quad (3.1)$$

donde  $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$  y  $H(\xi)$  son los polinomios de Hermite.

Más aún, los niveles de energía vienen dados por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2)$$

A continuación se representa el cuadrado de la función de onda del estado base del oscilador armónico calculado numéricamente a partir del método de diferencias finitas y el método de Crank-Nicolson implementados a través de un código realizado en Fortran 95.

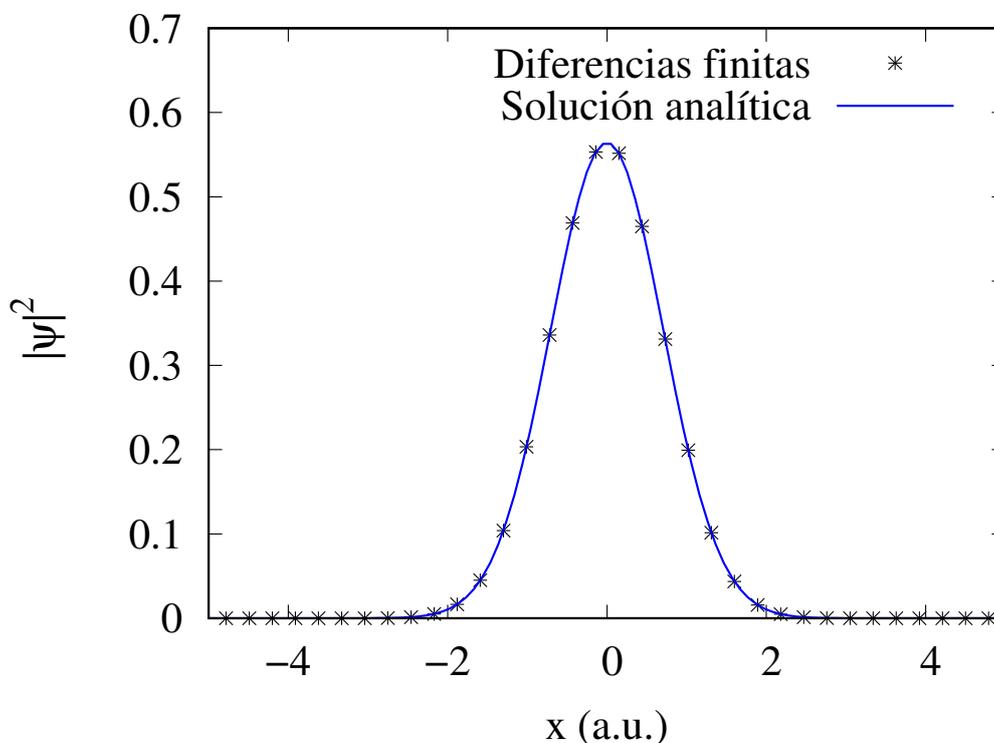


Figura 3.1: Estado base del oscilador armónico calculado de forma analítica y numérica.

Para la solución numérica del estado base del oscilador armónico se tomó un  $\Delta x = 0.01$  *a.u.*, una masa de  $m = 1.0$  *a.u.* y una frecuencia angular de  $\omega = 1.0$  *a.u.* con lo que se obtuvo un eigenvalor de  $0.49999687497890555$  *u.a.*, teniendo así un error relativo de  $0.00062499055\%$  respecto del valor analítico, el cual es  $0.5$  *a.u.* La solución obtenida a partir de diferencias finitas presentada en la figura 3.1 son puntos representativos que nos permiten diferenciar y comparar la solución analítica de la numérica.

### 3.1.2. Parte radial del átomo de hidrógeno

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en tres dimensiones se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \quad . \quad (3.3)$$

Si queremos trabajar con un átomo de hidrógeno, es conveniente usar coordenadas esféricas, donde el operador laplaciano está dado por

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \quad . \quad (3.4)$$

De esta manera, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en coordenadas esféricas es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right)\right] + V\psi = E\psi \quad . \quad (3.5)$$

Dicha ecuación puede ser resuelta a partir del método de separación de variables, donde buscaremos una solución del tipo  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ . Entonces, sustituyendo esta propuesta de solución en la ecuación (3.5), obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{Y}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{R}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{R}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right)\right] + VRY = ERY \quad .$$

Dividiendo por  $RY$  y multiplicando por  $-2mr^2/\hbar^2$ , se tiene

$$\left\{\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d^2R}{dr^2}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r) - E]\right\} + \frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right)\right\} = 0 \quad . \quad (3.6)$$

El primer término en corchetes solo depende de  $r$ , mientras que el segundo solo depende de  $\theta$  y de  $\phi$ , y como su suma es igual a cero, necesariamente cada uno debe de ser igual a una constante con signos opuestos que, por comodidad, llamaremos  $l(l+1)$ . De esta manera, obtenemos las dos ecuaciones:

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d^2R}{dr^2}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r) - E] = l(l+1) \quad , \quad (3.7)$$

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right\} = -l(l+1) \quad . \quad (3.8)$$

Consideremos un potencial coulombiano entre el protón y el electrón del átomo de hidrógeno de la forma

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{r} \quad . \quad (3.9)$$

Si nos centramos en estudiar la parte radial del átomo hidrogenoide de forma numérica, podemos trabajar con la ecuación (3.7), de donde tenemos que

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = l(l+1)R \quad . \quad (3.10)$$

Si hacemos el cambio de variable  $u(r) = rR(r)$ , obtenemos la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[ V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu \quad . \quad (3.11)$$

Esta última ecuación es llamada la ecuación radial, la cual es idéntica a la ecuación de Schrödinger unidimensional, con el potencial efectivo dado por

$$V_{eff} = V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad . \quad (3.12)$$

Así, la ecuación que resolveremos de manera numérica será la ecuación (3.11).

Las soluciones a las ecuaciones (3.7) y (3.8) son:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+1)!}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na) \quad , \quad (3.13)$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)!(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \quad , \quad (3.14)$$

donde  $L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)$  son los polinomios asociados de Laguerre,  $P_l^m(\cos \theta)$  son los polinomios asociados de Legendre y  $a = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$  es el radio de Bohr.

Más aún, las energías permitidas son

$$E_n = - \left[ \frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.15)$$

A continuación, se presenta el cuadrado de la función de onda del estado base para la parte radial del átomo de hidrógeno obtenida a partir del método de diferencias finitas y el método de Crank-Nicolson, y comparada con la solución analítica.

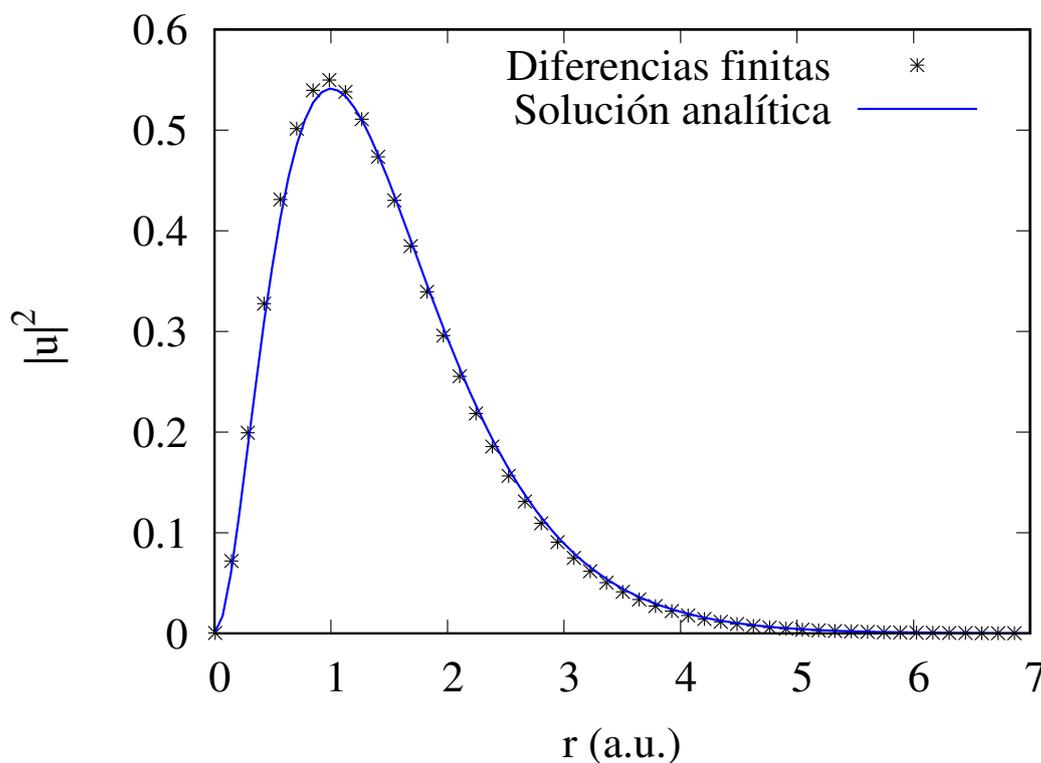


Figura 3.2: Estado base de la parte radial del átomo de hidrógeno calculado de forma analítica y numérica.

Para la solución numérica del estado base de la parte radial del átomo de hidrógeno se tomó  $\Delta x = 0.01 \text{ u.a.}$  y una masa de  $m = 1.0 \text{ a.u.}$  con lo que se obtuvo un eigenvalor de  $-0.51071167775199400 \text{ u.a.}$ , teniendo así un error de 2.142% respecto del valor analítico, el cual es  $-0.5 \text{ u.a.}$  La solución obtenida a partir de diferencias finitas presentada en la figura 3.2 son puntos representativos que nos permiten diferenciar y comparar la solución analítica de la numérica.

### 3.1.3. Paquete gaussiano libre (Efecto Ramsauer-Townsend)

El efecto Ramsauer-Townsend es un fenómeno físico que resulta de la dispersión de electrones de baja energía por átomos de un gas noble y que consiste en que para ciertas energías del electrón la transmitancia es total.

Si se intenta predecir la probabilidad de colisión con un modelo clásico que trata al electrón y al átomo como esferas duras, se encuentra que la probabilidad de colisión debería ser independiente de la energía incidente del electrón. Sin embargo, Ramsauer y Townsend observaron que para los electrones de movimiento lento en argón, kriptón o xenón, la probabilidad de colisión entre los electrones y los átomos de gas obtiene un valor mínimo para los electrones con una cierta cantidad de energía cinética.

Un modelo simple de una colisión que hace uso de la teoría ondulatoria puede predecir la existencia del mínimo de Ramsauer-Townsend. Se presenta un modelo que considera al átomo como un pozo de potencial cuadrado finito. Dicho pozo de potencial cuadrado finito puede ser descrito por el potencial

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{si } |x| > a \end{cases}, \quad (3.16)$$

donde  $V_0 > 0$ . Aquí tendremos dos tipos de estados: estados ligados ( $E < 0$ ) y estados dispersivos ( $E > 0$ ).

Recordemos que si la energía cinética  $T$  es positiva, las soluciones para este problema deberán de ser soluciones oscilantes; mientras que si la energía cinética es negativa, las soluciones deberán de ser decayentes. Además, si  $E > 0$ , entonces  $T > V_0$ ; en tal caso, el momento lineal en la zona  $-a \leq x \leq a$  aumentará, por lo que la longitud de onda disminuirá (recordar la fórmula de De Broglie  $p = h/\lambda$ ).

Para empezar, trabajemos con los estados ligados  $E < 0$ . En especial, consideremos la región  $x < -a$  (que llamaremos region I), donde el potencial es cero; de esta manera, la ecuación de

Schrödinger para esta zona será:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \Longrightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi \quad ,$$

donde  $\kappa \equiv \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar}}$ . Así, la solución para la región I será de la forma:

$$\psi_I(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad . \quad (3.17)$$

Es necesario que la primera exponencial no aparezca en la solución pues cuando  $x \rightarrow -\infty$ , dicha exponencial diverge y no queremos que suceda esto. Por ello, la solución para la región I será

$$\psi_I(x) = Be^{\kappa x} \quad . \quad (3.18)$$

Ahora, para la región  $-a \leq x \leq a$ , que denotaremos por región II, tenemos que el potencial es  $V(x) = -V_0$ , por lo que la ecuación de Schrödinger queda como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \quad \Longrightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi \quad ,$$

donde  $l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ . De esta manera, la solución en la región II se convierte en

$$\psi_{II}(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx) \quad . \quad (3.19)$$

Por otra parte, para la región  $x > a$  (región III), nuevamente se tendrá que el potencial es cero, por lo que la solución lucirá semejante a la solución de la región I; solo que aquí, la segunda exponencial de la solución (3.19) será la que divergerá cuando  $x \rightarrow \infty$ , por lo que la solución tendrá que ser

$$\psi_{III}(x) = Fe^{-\kappa x} \quad . \quad (3.20)$$

El siguiente paso a tratar será imponer las condiciones de frontera en

$$\begin{array}{ll} \psi|_{+a} \text{ y } \psi|_{-a} & \text{Condiciones de Dirichlet} \\ \frac{d\psi}{dx}\Big|_{+a} \text{ y } \frac{d\psi}{dx}\Big|_{-a} & \text{Condiciones de Neumann} \end{array}$$

Notemos que el potencial es una función par, por lo que podemos asumir, sin pérdida de generalidad, que las soluciones son funciones pares o impares. Esto nos será útil porque bastará con imponer condiciones de frontera en  $+a$ , pues en  $-a$  se obtendrán inmediatamente ya que  $\psi(-x) = \pm\psi(x)$ .

Debido a lo anterior, nos podemos quedar solo con las soluciones pares (como lo es el coseno para la solución de la región II), y de esta manera tendremos

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x} & -a \leq x \leq a \\ D \cos(lx) & 0 < x < a \\ \psi(-x) & x < 0 \end{cases} . \quad (3.21)$$

Entonces, trabajando con la continuidad en  $x = a$  de  $\psi(x)$ , se tiene

$$Fe^{-\kappa a} = D \cos(la) . \quad (3.22)$$

Y por continuidad para  $\frac{d\psi}{dx}$  en  $x = a$ , obtenemos

$$-\kappa Fe^{-\kappa a} = -lD \cos(la) . \quad (3.23)$$

Dividiendo la ecuación (3.22) entre la ecuación (5.23) se obtiene la siguiente expresión:

$$\kappa = l \tan(la) . \quad (3.24)$$

Ahora, notemos que

$$\kappa^2 + l^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2(E + V_0)}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} .$$

Más aún, definamos las siguientes variables dependientes de la energía  $E$ :

$$z \equiv la \quad , \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \quad (3.25)$$

De esta manera

$$\begin{aligned} z_0^2 - z^2 &= a^2 \left( \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) - l^2 a^2 \\ &= a^2 (\kappa^2 + l^2) - l^2 a^2 \\ &= a^2 \kappa^2 \quad . \end{aligned}$$

De aquí se sigue que

$$\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2} \quad . \quad (3.26)$$

Siguiendo la ecuación (5.24) se tiene que

$$\tan(la) = \tan z = \frac{\kappa}{l} = \frac{\sqrt{z_0^2 - z^2}}{la} = \frac{\sqrt{z_0^2}}{z} \quad .$$

Por lo tanto

$$\tan z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} \quad . \quad (3.27)$$

La ecuación (3.27) es una ecuación trascendental para  $z$  (y, por lo tanto, para  $E$ ) como función de  $z_0$  (que es una medida del tamaño del pozo).

Un método para resolver esta ecuación trascendental es graficando  $\tan z$  y  $\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$  simultáneamente y ubicar los puntos de intersección.

Si consideramos los estados dispersivos  $E > 0$ , en la región I ( $V(x) = 0$ ), obtenemos

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad , \quad (3.28)$$

donde  $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ .

Por otra parte, dentro del pozo se tiene que  $V(x) = V_0$ , por lo que la solución será de la forma

$$\psi_{II}(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx) \quad , \quad (3.29)$$

donde  $l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ .

Finalmente, para la región III, asumiendo que no vienen ondas de esa región hacia el lado izquierdo, tomemos

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx} \quad . \quad (3.30)$$

Nuevamente,  $A$  es la amplitud de incidencia,  $B$  es la amplitud reflejada y  $F$  es la amplitud transmitida.

Notemos que tendremos cuatro ecuaciones de las condiciones de frontera:

1. Continuidad de  $\psi(x)$  en  $-a$ :

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(la) + D \cos(la) \quad . \quad (3.31)$$

2. Continuidad de  $d\psi/dx$  en  $-a$ :

$$ik [Ae^{-ika} - Be^{ika}] = l [C \cos(la) + D \sin(la)] \quad . \quad (3.32)$$

3. Continuidad de  $\psi(x)$  en  $+a$ :

$$C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{ika} \quad . \quad (3.33)$$

4. Continuidad de  $d\psi/dx$  en  $+a$ :

$$l [C \cos(la) - D \sin(la)] = ikFe^{ika} \quad . \quad (3.34)$$

Multipliquemos por  $\sin(la)$  a la ecuación (3.33) y por  $\frac{1}{l} \cos(la)$  a la ecuación (3.34), y luego sumémoslas. Así, obtendremos lo siguiente

$$C = Fe^{ika} \left[ \sin(la) + \frac{ik}{l} \cos(la) \right] \quad . \quad (3.35)$$

Multiplicando por  $\cos(la)$  a (3.33) y por  $\frac{1}{l} \sin(la)$  a (3.34), y restémoslas. Tendremos en-

tonces que

$$D = Fe^{ika} \left[ \cos(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \right] . \quad (3.36)$$

Sustituyendo (3.35) y (3.36) en la ecuación (3.31), se tiene que

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{ika} &= -Fe^{ika} \left[ \sin(la) + \frac{ik}{l} \cos(la) \right] \sin(la) + Fe^{ika} \left[ \cos(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \right] \cos(la) \\ &= Fe^{ika} \left[ \cos^2(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \cos(la) - \sin^2(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \cos(la) \right] \\ &= Fe^{ika} \left[ \cos(2la) - \frac{ik}{l} \sin(2la) \right] . \end{aligned} \quad (3.37)$$

De la misma forma, para la ecuación (3.32), sustituyamos las expresiones (3.35) y (3.36), obteniendo lo siguiente:

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} - Be^{ika} &= -\frac{il}{k} Fe^{ika} \left[ \left( \sin(la) + \frac{ik}{l} \cos(la) \right) \cos(la) + \left( \cos(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \right) \sin(la) \right] \\ &= -\frac{il}{k} Fe^{ika} \left[ \sin(la) \cos(la) + \frac{ik}{l} \cos^2(la) + \sin(la) \cos(la) - \frac{ik}{l} \sin^2(la) \right] \\ &= -\frac{il}{k} Fe^{ika} \left[ \sin(2la) + \frac{ik}{l} \cos(2la) \right] \\ &= Fe^{ika} \left[ \cos(2la) - \frac{il}{k} \sin(2la) \right] . \end{aligned} \quad (3.38)$$

Sumando la ecuación (3.37) y la ecuación (3.38) que se obtuvieron anteriormente, se obtiene

$$2Ae^{-ika} = Fe^{ika} \left[ 2 \cos(2la) - i \left( \frac{k}{l} + \frac{l}{k} \right) \sin(2la) \right] ,$$

de donde se sigue que

$$F = A \left[ \frac{e^{-2ika}}{\cos(2la) - i \frac{(k^2+l^2)}{2kl} \sin(2la)} \right] . \quad (3.39)$$

Ahora, restando la ecuación (3.38) de la ecuación (3.37), obtenemos:

$$2Be^{ika} = Fe^{ika} \left[ i \left( \frac{l}{k} - \frac{k}{l} \right) \sin(2la) \right] .$$

Por lo tanto

$$B = F \left[ i \frac{\sin(2la)}{2kl} (l^2 - k^2) \right] . \quad (3.40)$$

Recordemos que el coeficiente de transmisión está dado por  $T = |F/A|^2$ . De hecho, para simplificar los cálculos, notemos que el inverso del coeficiente de transmisión es

$$\begin{aligned} T^{-1} &= \left| \frac{A}{F} \right|^2 \\ &= \cos^2(2la) + \frac{\sin^2(2la)}{(2lk)^2} (k^2 + l^2)^2 \quad , \end{aligned} \quad (3.41)$$

pero  $\cos^2(2la) = 1 - \sin^2(2la)$ , de esta manera

$$T^{-1} = 1 + \sin^2(2la) \left[ \frac{(k^2 - l^2)^2}{4l^2k^2} \right] \quad . \quad (3.42)$$

Además, recordemos que  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  y  $l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ , entonces

$$2la = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \quad . \quad (3.43)$$

Más aún,  $k^2 - l^2 = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}$ , de donde se sigue que

$$\frac{(k^2 - l^2)^2}{(2kl)^2} = \frac{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 V_0^2}{4 \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 E(E + V_0)} = \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \quad . \quad (3.44)$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.43) y (3.44) en la ecuación (3.42), tenemos finalmente que

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left( \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right) \quad . \quad (3.45)$$

Notemos que el coeficiente de transmisión es  $T = 1$  (el pozo es transparente) cuando el seno es cero. Para ello, se necesita que el argumento de esta función sea múltiplo entero de  $\pi$ , es decir

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} = n\pi \quad , \quad (3.46)$$

con  $n$  algún entero. Por lo tanto, las energías para transmisión perfecta está dada por

$$E_n + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2} \quad , \quad (3.47)$$

que son precisamente las energías permitidas para un pozo cuadrado infinito.

Hay que recordar que el coeficiente de reflexión y de transmisión debe de cumplir que  $R + T = 1$ , por lo que una vez que tenemos  $T$ , podemos calcular facilmente  $R$ .

Considerando que  $E = \frac{mv^2}{2}$ , podemos dejar el coeficiente de transmisión en términos de la velocidad al cuadrado de la función de onda gaussiana, hecho que nos permitirá desarrollar un código más eficiente a la hora de buscar las soluciones numéricas. De esta manera, el coeficiente de transmisión será

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4(mv^2/2)((mv^2/2) + V_0)} \sin^2 \left( \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m((mv^2/2) + V_0)} \right) .$$

Si además consideramos unidades atómicas y tomamos  $m = \hbar = V_0 = 1$ , obtenemos la expresión

$$\begin{aligned} T^{-1} &= 1 + \frac{1}{2v^2((v^2/2) + 1)} \sin^2 \left( 2a\sqrt{2((v^2/2) + 1)} \right) \\ &= 1 + \frac{1}{v^2(v^2 + 2)} \sin^2 \left( 2a\sqrt{v^2 + 2} \right) . \end{aligned}$$

Por lo tanto, para las soluciones analíticas de los coeficientes de transmisión y reflexión en función de  $v^2$ , nos queda

$$\begin{aligned} T &= \left[ 1 + \frac{1}{v^2(v^2 + 2)} \sin^2 \left( 2a\sqrt{v^2 + 2} \right) \right]^{-1} . \\ R &= 1 - \left[ 1 + \frac{1}{v^2(v^2 + 2)} \sin^2 \left( 2a\sqrt{v^2 + 2} \right) \right]^{-1} . \end{aligned}$$

Ahora, para comparar las soluciones exactas con las soluciones numéricas que se obtienen al implementar el método de Crank-Nicolson, se tomará una onda plana incidente que será modulada por una gaussiana, la cual interactúa con un pozo de potencial de ancho  $2a = 10.0$  *a.u.* y con una profundidad  $V_0 = 1.0$  *a.u.* La malla unidimensional va desde  $-150$  *a.u.* hasta  $150$  *a.u.*, con  $\Delta x = 0.2$ ,  $\Delta t = 0.1$  *a.u.* y  $\Delta v = 0.1$  *a.u.*

A continuación se presenta una gráfica de los coeficientes de transmisión y reflexión en términos del cuadrado de la velocidad  $v^2 = \frac{2E}{m}$  calculados de forma analítica y de forma numérica

a partir del método de diferencias finitas y el método de Crank-Nicolson implementados a través de un código realizado en Fortran 95. Se presentan los resultados para distintos valores de  $\sigma$ , es decir, para varios anchos del paquete de ondas gaussiano.

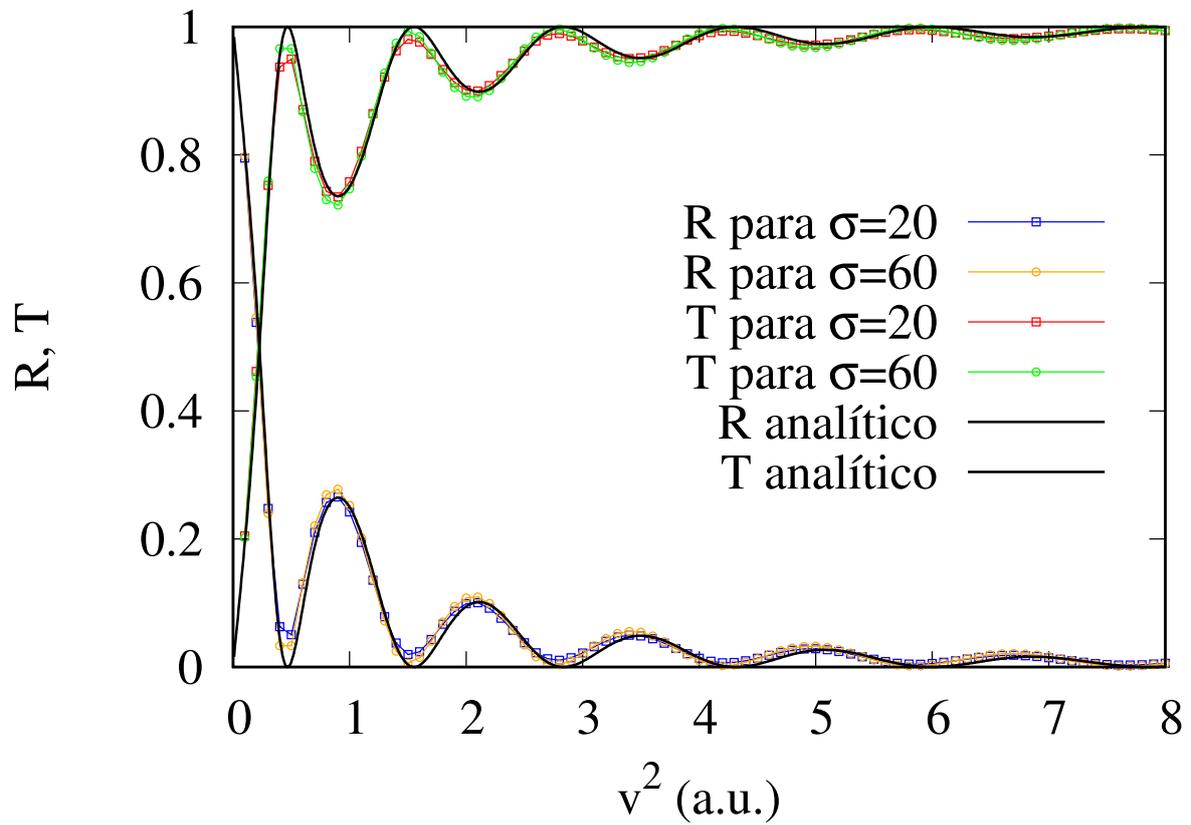


Figura 3.3: Coeficientes de transmisión y de reflexión como función del cuadrado de la velocidad.

### 3.2. Estado base del átomo de hidrógeno a partir del método de Crank-Nicolson con tiempo imaginario

Usando el método del tiempo imaginario, se calculó la función de onda del estado base del átomo de hidrógeno. La figura 3.4 presenta la densidad de probabilidad electrónica proyectada sobre el eje  $z$  del estado base haciendo el tiempo imaginario en una malla de  $[-14.2, 14.2]_x \times [-14.2, 14.2]_y \times [-30.2, 30.2]_z$ , con un número de puntos en la red de 70 en  $x$ , 70 en  $y$  y 150 en  $z$ ; es decir, se tiene un tamaño de paso en la malla de  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.4 \text{ a.u.}$  Aquí, la energía del átomo de hidrógeno en su estado base calculada a partir de la malla anteriormente mencionada es de  $-0.48236020 \text{ a.u.}$  Comparada con la energía del átomo de hidrógeno que se conoce de manera analítica (la cual es de  $-0.5 \text{ a.u.}$ ), se obtiene un error de 3.5%. Además, en la misma figura se presenta también la densidad de probabilidad electrónica del estado base proyectada sobre el eje  $z$ , pero con un tamaño de paso en las coordenadas de  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2 \text{ a.u.}$  En este caso, la energía total del átomo de hidrógeno en el estado base calculada de forma numérica es de  $-0.49509919 \text{ a.u.}$ , obteniéndose un error de 0.98%.

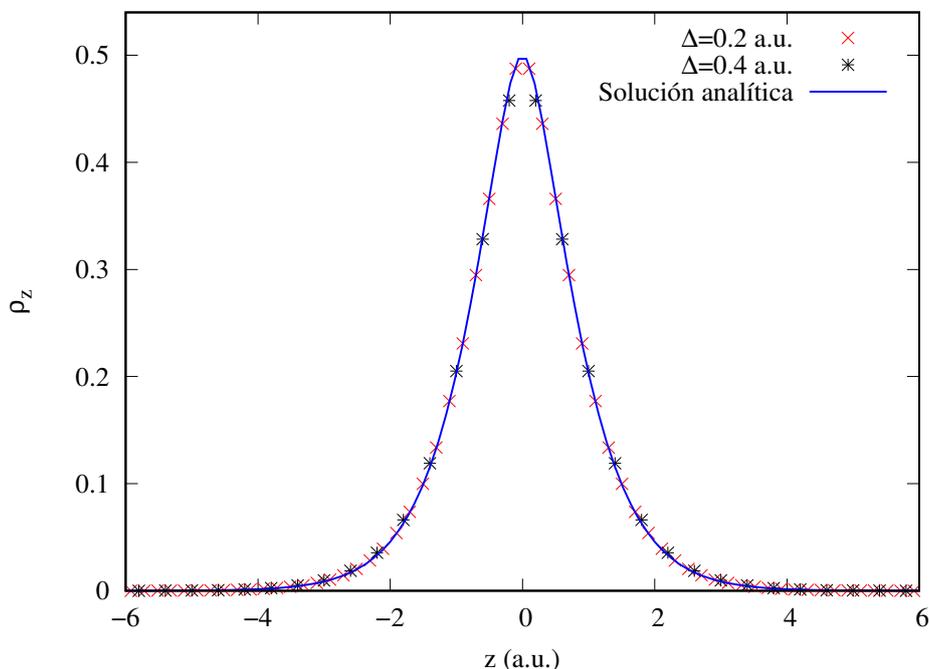


Figura 3.4: Densidades de probabilidad electrónicas del estado base del átomo de hidrógeno confinado en una malla uniforme  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2 \text{ a.u.}$  ( $\Delta = 0.2 \text{ a.u.}$ ) y en una malla uniforme  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.4 \text{ a.u.}$  ( $\Delta = 0.4 \text{ a.u.}$ ), comparadas con la densidad de probabilidad electrónica analítica del átomo de hidrógeno en dicho estado.

Ambas densidades de probabilidad electrónicas obtenidas con distintos tamaños de paso se comparan con la densidad de probabilidad electrónica analítica y se observa que dichas densidades son bastante semejantes.

Es claro que entre más fina sea la malla, la energía asociada al estado base del átomo de hidrógeno se acerca más al valor teórico. Sin embargo, el error presente en las energías del estado base del átomo de hidrógeno calculadas a través del método de diferencias finitas y el método de Crank-Nicolson para ambos tamaños de paso utilizados son pequeños. Así, considerando que necesitamos soluciones numéricas precisas ahorrando el mayor tiempo de cómputo posible, basta con trabajar el estado base del átomo de hidrógeno cuando se define una malla numérica con un tamaño de paso de  $0.4 \text{ a.u.}$

# Capítulo 4

## Colisiones atómicas con trayectorias rectilíneas

### 4.1. Clasificación de colisiones atómicas

Si se considera la colisión entre iones  $A$  y átomos  $B$ , podemos clasificar el tipo de colisión a partir de los productos finales de la reacción. En general, existen tres categorías que se explican a continuación.

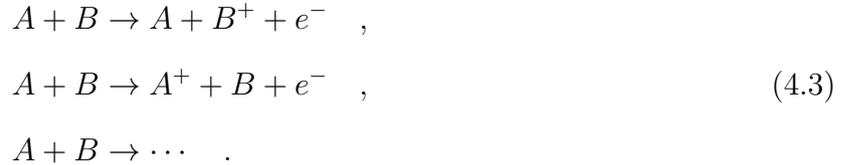
La primer categoría es el de colisiones que describen procesos de dispersión elástica en la que las energías internas de  $A$  y  $B$  y, en consecuencia, la energía cinética total no cambian, pero las partículas incidentes se desvían a través de un cierto ángulo  $\theta$ . Esto se describe a partir del siguiente esquema



La segunda categoría es el de las reacciones inelásticas en las que el ión o el átomo  $A$  o  $B$  (o ambos), se excitan a un nivel de energía diferente. Este tipo de procesos puede ser descrito a través de



donde el asterisco significa que el ión o átomo se encuentra en un estado distinto al estado inicial. En esta categoría se incluye a las reacciones en las que uno o ambos átomos se ionizan y uno o más electrones son expulsados, dejando un ión positivo o iones, es decir



Finalmente, la tercera categoría es la que describe reacciones en las que se transfieren uno o más electrones entre  $A$  y  $B$ . Estas son las reacciones de intercambio de carga o captura electrónica, es decir



La clasificación de las colisiones dependerá de la carga del ión proyectil, del tipo de átomo blanco que se estudie y, especialmente, de la energía de colisión.

#### 4.1.1. Canales

Al estudiar colisiones atómicas surge un término que se utiliza comúnmente para trabajar este tipo de procesos; dicho término es el de canal. Un canal es un posible modo del sistema compuesto  $A+B$  durante la colisión [13]. Se caracteriza por el número y la naturaleza de los estados en los que se puede describir el sistema  $A+B$ . En las colisiones elásticas, las dos partículas  $A$  y  $B$  que chocan permanecen en el canal inicial, mientras que las colisiones inelásticas son procesos que conducen desde un canal inicial dado a un canal final diferente.

Además, se dice que un canal es abierto si la colisión correspondiente está permitida por leyes de conservación conocidas (como la conservación de energía o del momento); de lo contrario, se dice que es un canal cerrado.

En el presente trabajo se estudian colisiones atómicas en donde habrá reacciones de ioniza-

ción y de captura electrónica, por lo que a continuación se presentan los métodos para calcular probabilidades de ionización y de captura electrónica para distintas colisiones.

## 4.2. Cálculo de la probabilidad de captura electrónica y la sección eficaz de captura

Considerando la colisión de una partícula con carga positiva, la cual es el proyectil, y un átomo neutro (por ejemplo, un átomo de hidrógeno), el potencial que describirá este sistema será

$$V(\mathbf{r}, t) = -\frac{Z_t}{|\mathbf{r}|} - \frac{Z_p}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_p(t)|} \quad , \quad (4.5)$$

donde  $|\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ,  $Z_t$  es la carga del blanco (el núcleo del átomo de hidrógeno),  $Z_p$  es la carga del proyectil (por ejemplo, un protón) y  $\mathbf{R}_p(t)$  es la trayectoria del proyectil definida como

$$\mathbf{R}_p(t) = b\hat{\mathbf{x}} + vt\hat{\mathbf{z}} \quad , \quad (4.6)$$

donde  $b > 0$  es el parámetro de impacto y  $v$  es la velocidad del proyectil, además,  $\hat{\mathbf{x}}$  y  $\hat{\mathbf{z}}$  son los vectores unitarios en dirección del eje  $x$  y  $z$  respectivamente.

Es importante resaltar que el potencial no incluye la interacción núcleo-núcleo. Si así fuera, como este término no corresponde a la interacción de la nube electrónica, al resolver la ecuación de Schrödinger obtendríamos una función de onda con un término de fase relacionado a esta interacción; sin embargo, esta fase desaparece al obtener la probabilidad del sistema, por lo que no es necesario en un principio considerar dicha interacción.

Por otro lado, para calcular la probabilidad de captura, se integra la densidad de probabilidad del electrón sobre una caja numérica  $\Omega$  dentro de toda la red numérica al tiempo final de propagación  $t_f$  de la siguiente forma:

$$P(b) = \int_{\Omega} |\Psi(x, y, z, t_f)|^2 dx dy dz = \int_{z_0}^{z_{max}} \rho_z(z, t_f) dz \quad , \quad (4.7)$$

donde  $z_0$  es el valor en  $z$  que divide las regiones donde se encuentran bien diferenciadas la probabilidad de excitación del átomo de hidrógeno y la probabilidad de captura electrónica, y  $z_{max}$  es el punto máximo de la red en el eje  $z$ . Así, la función de densidad está dado por

$$\rho_z(z, t) = \int_{x_{min}}^{x_{max}} \int_{y_{min}}^{y_{max}} |\Psi(x, y, z, t_f)|^2 dx dy \quad . \quad (4.8)$$

Al implementar la ecuación (4.7), es importante que las contribuciones de la función de onda del proyectil y del blanco estén claramente separadas en la red numérica. Así las contribuciones en la frontera de la región  $\Omega$  son pequeñas y no afectarán el resultado numérico.

Más aún, podemos hacer una proyección de la magnitud de la función de onda sobre el eje  $z$  de la siguiente manera

$$|\Psi(z)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, y, z) \Psi(x, y, z) dx dy \approx \sum_{i,j=1}^{N-1} \Psi_{i,j} \Psi_{i,j} \Delta x \Delta y \quad . \quad (4.9)$$

De esta manera, la sección eficaz se calcula como

$$\sigma = 2\pi \int_0^{b_{max}} bP(b) db \quad . \quad (4.10)$$

Cabe destacar que las probabilidades de captura dependerán del parámetro de impacto, pero la sección eficaz de captura dependerá de la velocidad del proyectil o de la energía de la colisión.

### 4.3. Cálculo de la probabilidad de ionización y la sección eficaz de ionización

La ionización de cierto átomo puede ser inducida si hacemos colisionar algún tipo de partícula con dicho átomo; en particular, en mecánica cuántica, existe cierta probabilidad de que un átomo se ionice tras una colisión. El cálculo de este tipo de probabilidad no se puede realizar de la forma en la que se calcula la probabilidad de captura.

Notemos que como estamos considerando trayectorias rectilíneas, podemos localizar la partícula proyectil, ya que esta es tratada como una partícula clásica; la probabilidad de captura no es más que el área bajo la curva del cuadrado de la función de onda que describe a la nube electrónica que es arrastrada por el proyectil. Así, es fácil definir una región sobre la cuál se integrará el cuadrado de dicha función de onda.

Sin embargo, la probabilidad de ionización corresponde a la función de onda que se desprende del núcleo del blanco y que no se adhiere al proyectil. Dicha nube electrónica que describirá a la ionización puede salir en cualquier dirección en las tres dimensiones de nuestra malla numérica. Ahora, como nuestra malla es finita, la nube electrónica que salga dispersada (en principio) en todas las direcciones, llegará al borde de la malla y rebotará hacia adentro. Esto provocará que se generen modos normales dentro de la malla que generarán errores numéricos.

Para estudiar procesos de ionización, conviene dividir nuestra malla en dos regiones: una región interna que contiene el sistema atómico o molecular en estudio y una región externa definida como su complemento en dicha malla. En la región interna, la ecuación de Schrödinger se puede resolver numéricamente con herramientas computacionales apropiadas para configuraciones electrónicas ligadas, como lo es el tratamiento que le hemos dado hasta ahora con el método de Crank-Nicolson.

Como no necesitamos describir los estados del sistema en el continuo, podemos hacer uso de la técnica de fronteras absorbentes. Su simplicidad de implementación y costo computacional limitado los hacen, en muchas situaciones, preferibles a otros enfoques más laboriosos.

De esta manera, nos podemos centrar en tres familias distintas de fronteras absorbentes (conocidas también como absorbentes) [14]:

1. Potenciales absorbentes complejos.
2. Absorbentes de función de enmascaramiento.
3. Absorbentes derivados de escalamientos complejos de exterior liso.

El método de la implementación de potenciales complejos absorbentes consiste en alterar el hamiltoniano de un sistema agregando un potencial complejo artificial que no es cero en una pequeña porción de la malla cerca de los límites. La propagación en el tiempo con este hamiltoniano modificado da como resultado la absorción o inyección de paquetes de ondas desde los límites, dependiendo de la forma de dicho potencial [14].

Los absorbentes con función de enmascaramiento son el tipo de absorbente más simple. En cada paso de tiempo uno multiplica la función de onda por una función de enmascaramiento, que tiene valores entre cero y uno dependiendo de la región en el espacio. La función generalmente se elige de tal forma que sea 1 dentro de una región interna, luego decaiga a cero cerca de la frontera de la malla de simulación para amortiguar cualquier parte de la función de onda que se extienda hacia los límites de la malla [14].

Por otra parte, el método de escalado complejo se desarrolló originalmente para calcular las propiedades de estados metaestables o resonancias [14]. Este método funciona mediante un escalado de la variable de posición del hamiltoniano por un factor complejo. Esto hace que los estados que representan ondas salientes extendidas o resonancias se vuelvan normalizables y, por lo tanto, accesibles computacionalmente.

### 4.3.1. Potenciales complejos

El primer tipo de paredes absorbentes se puede describir considerando la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}}\Psi(x, t) \quad . \quad (4.11)$$

Esta ecuación tiene como solución

$$\Psi(x, t) = e^{-i\hat{\mathbf{H}}t/\hbar} \Psi(x, t = 0) \quad . \quad (4.12)$$

la cual es la función de onda al tiempo  $t$  en términos de dicha función al tiempo inicial  $t = 0$ .

Si consideramos que el operador del potencial tiene una parte real y una parte imaginaria, tendremos que

$$V = V_r + iV_i \quad , \quad (4.13)$$

donde

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} &= \hat{\mathbf{T}} + V \\ &= \left( \hat{\mathbf{T}} + V_r \right) + iV_i \\ &= \hat{\mathbf{H}}_0 + iV_i \quad . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Sustituyendo el nuevo hamiltoniano (4.14) en la solución a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (4.12) obtenemos una expresión para la función de onda al tiempo  $t$ , la cual muestra el papel del término imaginario en el potencial. Así, dicha función de onda queda como

$$\Psi(x, t) = e^{V_i t/\hbar} e^{-i\hat{\mathbf{H}}_0 t/\hbar} \Psi(x, t = 0) \quad . \quad (4.15)$$

De aquí se observa que si  $V_i$  es negativa, entonces la amplitud de la función de onda se atenuará gradualmente a medida que incremente el tiempo.

Los potenciales complejos que se usan serán distintos de cero solo en una región predefinida cerca de los bordes de las mallas espaciales utilizadas; todos estos potenciales serán potenciales imaginarios negativos. Este tipo de potenciales tienen una gran historia en la teoría de colisiones independientes del tiempo, donde generalmente se conocen como "potenciales ópticos"[15].

Notemos que al hacer este cambio, el nuevo hamiltoniano  $H$  ya no es hermitiano y el operador de propagación de tiempo asociado

$$U_{CAP}(t + \Delta t, t) = e^{-i\mathbf{H}\Delta t} = e^{-i[\mathbf{H}_0 + iV_i]\Delta t} \quad (4.16)$$

se vuelve no unitario. Cuando se elige que  $V_i(x)$  sea distinto de cero solo en la región de absorción  $[0, L]$ , esta no unitaridad se localiza y, durante la propagación del tiempo, las funciones de onda tienen su norma alterada (aumentada o disminuida) cuando se superponen con esa región.

Para absorber, la parte imaginaria de  $V(x)$  debe tomar valores negativos ya que la presencia de un potencial imaginario negativo en el exponente del operador de propagación de (4.16) induce un amortiguamiento exponencial de los paquetes de ondas.

Se han propuesto una gran variedad de potenciales complejos, pero uno de los más utilizados es de la forma

$$V_i(x) = \begin{cases} 0 & , \text{ si } x < 0 \\ i\alpha x^b & , \text{ si } 0 \leq x \leq L \end{cases} . \quad (4.17)$$

Para actuar como absorbente, este tipo de potencial complejo debe tener  $\alpha < 0$ , mientras que  $b$  puede ser cualquier número mayor que uno. La fuerza de la amortiguación inducida depende de la energía cinética del paquete de ondas en colisión y del ancho de la región de absorción.

### 4.3.2. Funciones de enmascaramiento

Por otra parte, las funciones de enmascaramiento se utilizan comúnmente en sistemas que se propagan de forma numérica donde el operador de evolución temporal infinitesimal  $U(t + \Delta t, t)$ , que conecta  $t$  con  $t + \Delta t$ , se aplica repetidamente a una función de onda inicial. Usualmente, se elige una función de enmascaramiento  $0 \leq M(x) \leq 1$  y se aplica multiplicativamente en cada paso de tiempo, es decir

$$\psi(x, t + \Delta t) = M(x)U(t + \Delta t, t)\psi_0(x, t) \quad . \quad (4.18)$$

Si se define la función  $M(x)$  para que decaiga suavemente a partir de la región  $[0, L]$ , la aplicación iterativa de (4.18) da como resultado una amortiguación de cualquier parte de la onda que se extiende hacia esta región. Para absorber, la función de enmascaramiento debe ser menor que 1, pero puede asumir cualquier valor de 0 a 1 en la frontera  $x = L$ . Las propiedades de absorción resultantes dependen de la forma funcional específica de  $M(x)$ .

Funciones de enmascaramiento muy comunes son las siguientes:

$$M(z) = \begin{cases} \cos^{1/8} \left( \frac{\pi |z_i - z_{max} + L|}{2L} \right) & , \text{ si } |z_{max} - z_i| \leq L \\ 1 & , \text{ en otra parte de la región} \end{cases} \quad (4.19)$$

$$M(z) = \begin{cases} \sin^{1/4} \left( \frac{\pi |z_{max} - z_i|}{2L} \right) & , \text{ si } |z_{max} - z_i| \leq L \\ 1 & , \text{ en otra parte de la región} \end{cases} \quad (4.20)$$

Aquí se está considerando que estas funciones estarán definidas sobre el eje  $z$  con contrapartes similares para el eje  $x$  y  $y$ . Cabe mencionar que, en general, las funciones de enmascaramiento son senos y cosenos que están elevados a alguna fracción entre 0 y 1. Esto es lo que permite que el decaimiento de la función de onda sea rápido en la región de absorción.

## 4.4. Colisión entre un protón y un átomo de hidrógeno

A partir del método de Crank-Nicolson podemos empezar a estudiar la dinámica de colisiones atómicas. En particular, si consideramos un átomo de hidrógeno colisionando con un protón, el electrón del átomo podrá ser capturado por el protón proyectil, por lo que existirá una probabilidad de capturar dicho electrón.

Una vez que se tiene la función de onda numérica del estado base del átomo de hidrógeno en la malla que hayamos definido, se puede realizar la dinámica de la colisión de un protón proyectil con el átomo de hidrógeno. La función de onda inicial se modificará a cada paso de tiempo y de ésta se podrá obtener la información de la colisión.

Para la colisión de un protón con el átomo de hidrógeno, se emplea un código en Fortran 90 que implementa el método de diferencias finitas y el método de Crank-Nicolson. Aquí se trata con trayectorias rectilíneas, por lo que el proyectil lleva una velocidad constante y el protón del núcleo del átomo de hidrógeno está fijo en el origen.

Se utiliza una malla de  $[-14.2, 14.2]_x \times [-14.2, 14.2]_y \times [-30.2, 30.2]_z$ , con un tamaño de paso de  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.4 \text{ a.u.}$ , por lo que la función de onda inicial que se debe de utilizar para el estado base del átomo de hidrógeno será la que es solución para la misma malla antes mencionada, con el mismo tamaño de paso.

En la figura 4.1 se presenta la dinámica de la colisión  $p + H$  cuando se elige una energía de colisión de  $1 \text{ keV}$ , correspondiente a una velocidad del protón de  $v = 0.2 \text{ a.u.}$ , y donde el parámetro de impacto es  $b = 2.0 \text{ a.u.}$  La dinámica se llevó a cabo en 200 unidades atómicas de tiempo y se presentan seis fotogramas para  $t_1 = 0.0 \text{ a.u.}$ ,  $t_2 = 100 \text{ a.u.}$ ,  $t_3 = 115 \text{ a.u.}$ ,  $t_4 = 125 \text{ a.u.}$ ,  $t_5 = 152 \text{ a.u.}$  y  $t_6 = 200 \text{ a.u.}$

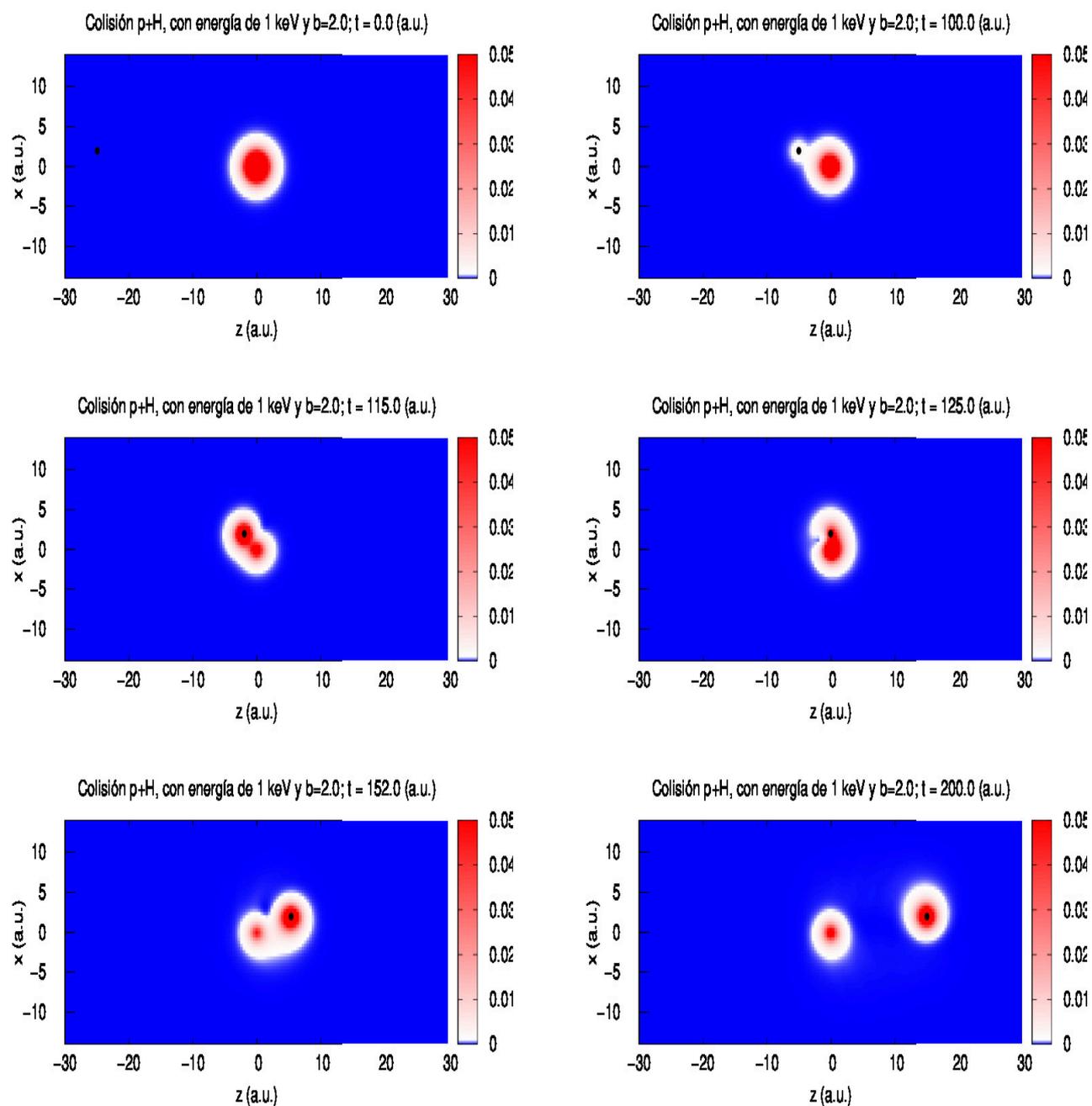


Figura 4.1: Dinámica de la colisión  $p + H$  para una energía de colisión de 1 keV y un parámetro de impacto de  $b = 2.0$  a.u.

El protón proyectil lanzado inicialmente de  $z = -25 \text{ a.u.}$  sigue una trayectoria recta de izquierda a derecha, empieza a interactuar con la nube electrónica del átomo de hidrógeno y la comienza a capturar. Una vez alcanza los valores positivos de  $z$ , el momento angular  $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ , el cuál apunta hacia adentro de la página, hace que la nube electrónica gire en dirección de las manecillas del reloj.

Finalmente, se detiene al protón proyectil en  $z = 15 \text{ a.u.}$  Aquí, la nube electrónica que describe a la probabilidad de que el átomo de hidrógeno quede excitado después de la colisión y la nube electrónica que describe a la probabilidad de captura electrónica se logran diferenciar correctamente. Esto permitirá definir una región  $\Omega$  en donde será posible calcular la probabilidad de captura electrónica sin correr el riesgo de que falte o sobre parte de la función de onda que describa dicho proceso. Para calcular dicha probabilidad de captura electrónica será necesario calcular el área bajo la curva que describe a la densidad electrónica  $\rho_z$  en dicha región  $\Omega$ . A continuación se presentan los resultados obtenidos.

#### 4.4.1. Probabilidad de captura electrónica

Para el cálculo de la probabilidad de captura electrónica, se colocó al átomo de hidrógeno en el origen, y el protón proyectil se lanzó desde  $z_{min} = -25 a.u.$ . La dinámica se desarrolló hasta que el proyectil llegara a  $z_{max} = 15 a.u.$ , en donde se puede diferenciar la densidad de probabilidad del átomo de hidrógeno excitado por la colisión, y la densidad de probabilidad debida a la captura electrónica. En la figura 4.2 se muestra la densidad electrónica en función de la variable  $z$  donde se lleva a cabo la dinámica.

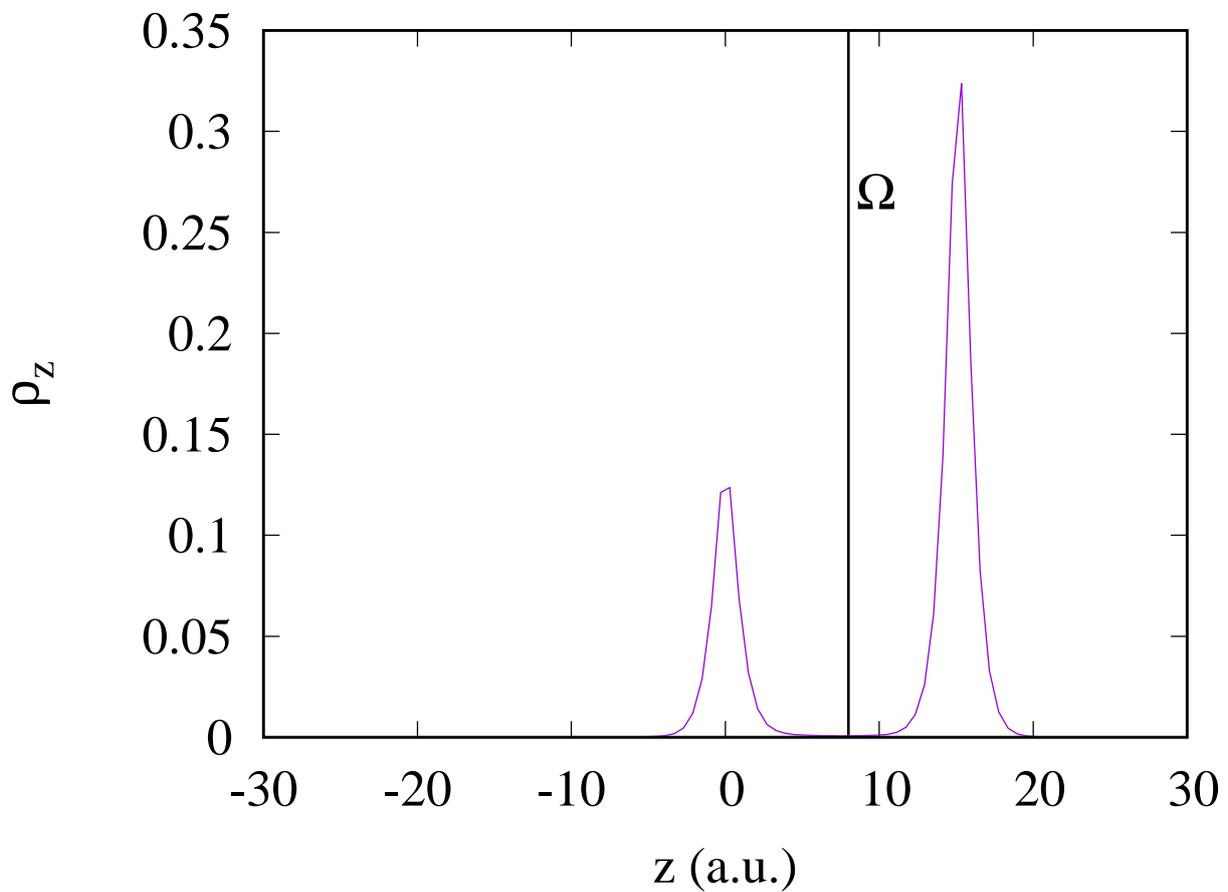


Figura 4.2: Densidad de probabilidad electrónica para la colisión  $p + H$  con el parámetro de impacto  $b = 2.0 a.u.$  y con una energía de colisión de  $1 keV$ .

La probabilidad de captura electrónica obtenida en la colisión  $p + H$  cuando la energía de colisión es de  $1 keV$  y el parámetro de impacto es de  $b = 2.0 a.u.$  es de  $0.704062$ ; la región  $\Omega$  donde se llevó a cabo la integración fue  $\Omega = [8, 30]$  en unidades atómicas sobre el eje  $z$ .

Se obtuvieron las densidades de probabilidad de captura electrónica desde  $b = 0.4 \text{ a.u.}$  hasta  $b = 10.0 \text{ a.u.}$ , realizando un paso en el parámetro de impacto de  $\Delta b = 0.4 \text{ a.u.}$ , por lo que la dinámica se realizó para 25 parámetros distintos, considerando la energía de colisión fija.

Para la energía de colisión de  $1 \text{ keV}$ , se presenta la cantidad  $bP(b)$  en función del parámetro de impacto  $b$  en la figura 4.3.

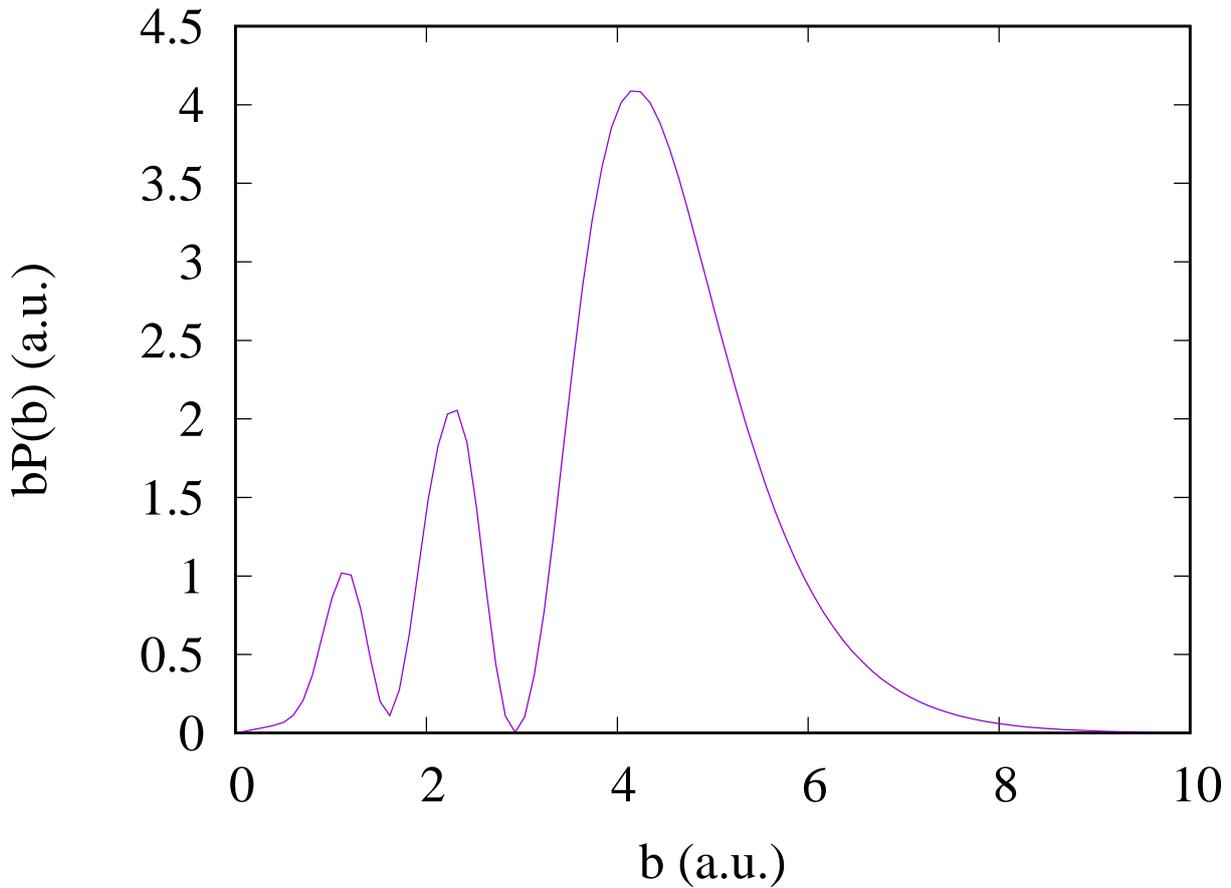


Figura 4.3:  $bP(b)$  en función del parámetro de impacto cuando la energía de colisión es de  $1 \text{ keV}$ .

Más aún, se hicieron estos mismos cálculos para distintas energías de colisión:  $90 \text{ eV}$ ,  $202.5 \text{ eV}$ ,  $360 \text{ eV}$ ,  $640 \text{ eV}$ ,  $1 \text{ keV}$ ,  $1.56 \text{ keV}$ ,  $3.06 \text{ keV}$ ,  $5.06 \text{ keV}$ ,  $10.56 \text{ keV}$ ,  $18.06 \text{ keV}$ ,  $25 \text{ keV}$ ,  $50 \text{ keV}$  y  $100 \text{ keV}$ .

La figura 4.4 muestra una relación entre la energía de colisión, el parámetro de impacto y la cantidad  $bP(b)$  relacionada a la sección transversal diferencial. En esta figura se logra apre-

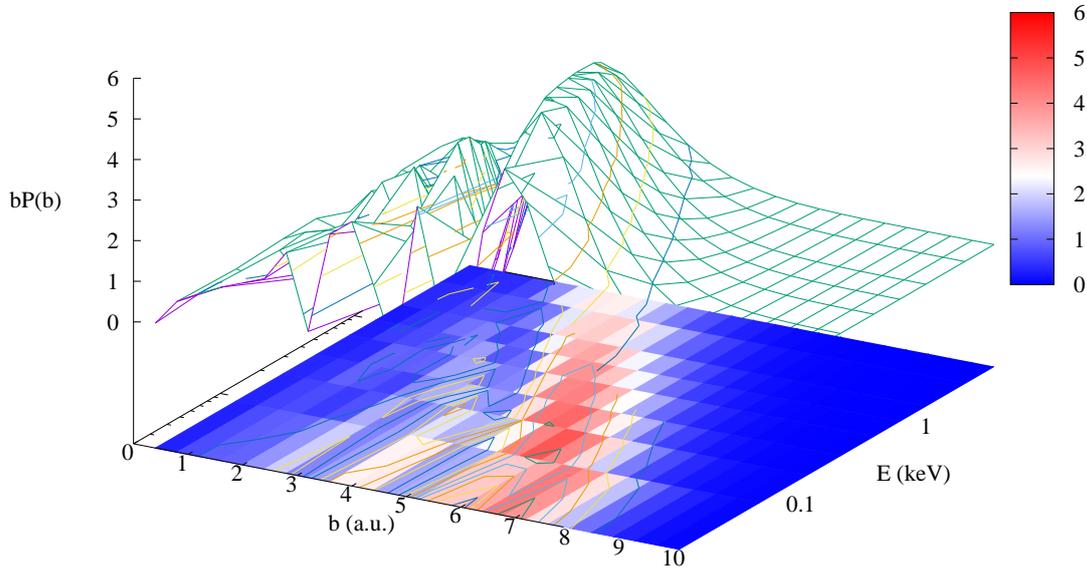


Figura 4.4: Mapa de densidad de  $bP(b)$  en función del parámetro de impacto y de la energía de colisión para la colisión  $p + H$ .

ciar como para las energías más bajas, hay tres máximos que se presentan para parámetros de impacto mayores a  $b = 2.0 \text{ a.u.}$ . De hecho, para parámetros de impacto menores, la cantidad  $bP(b)$  es casi prácticamente cero, al llegar alrededor de  $b = 2.5 \text{ a.u.}$  dicha cantidad crece, vuelve a decrecer entre  $b = 3.0 \text{ a.u.}$  y  $b = 3.5 \text{ a.u.}$ , crece de nuevo alrededor de  $b = 4.0 \text{ a.u.}$  y decae al llegar a  $b = 5.0 \text{ a.u.}$ ; pero una vez pasa el parámetro de impacto  $b = 5.0 \text{ a.u.}$ , existe un máximo aún más considerable que es alcanzado entre  $b = 6.0 \text{ a.u.}$  y  $b = 7.0 \text{ a.u.}$  aproximadamente. Estos máximos para parámetros de impacto grandes surgen debido a que las energías de colisión (y por ende, las velocidades del proyectil) son lo suficientemente pequeñas para que el proyectil y el átomo blanco interactúen aún cuando se encuentran bastante lejos el uno del otro. Este efecto comienza a perderse cuando las energías de colisión comienzan a crecer; en la figura 4.4 se aprecia como para las energías más grandes los máximos de la cantidad  $bP(b)$  comienzan a acercarse cada vez más a los parámetros de impacto más pequeños. Esto sucede porque cuando las energías de colisión son grandes, el proyectil y el átomo apenas interactúan, generando que la probabilidad de captura sea notable solo cuando átomo y proyectil pasan muy cerca uno del

otro.

Finalmente, en la figura 4.5 se presenta la sección eficaz total de captura para la colisión del protón con el átomo de hidrógeno, en donde podemos comparar con los resultados experimentales de Gealy y Van Zyl [16], Fite et. al. [17] y McClure [18].

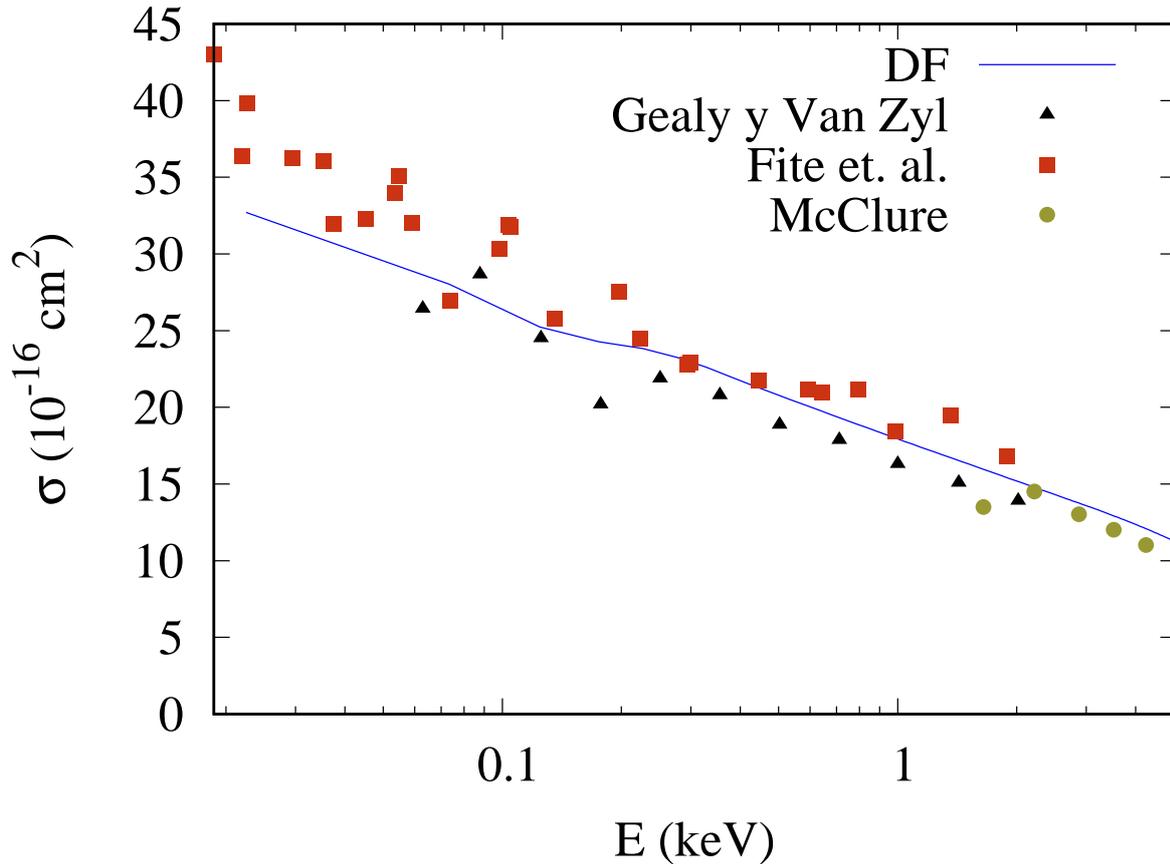


Figura 4.5: Sección eficaz total de captura para la colisión  $p + H$  a distintas energías de colisión calculada a través de diferencias finitas (DF), y comparada con los resultados experimentales: Gealy y Van Zyl [16], Fite et. al. [17] y McClure [18].

Además del proceso de captura electrónica que se presenta en la colisión  $p + H$ , existe la posibilidad de que el átomo se ionice debido a la interacción entre el protón proyectil y el protón del núcleo (el blanco que en estamos considerando fijo en nuestra malla). Esta probabilidad de ionización debe de ser muy pequeña, pero existe ya que estamos considerando al electrón cuántico. Sin embargo, hay que agregar paredes absorbentes; es por ello que a continuación tratamos la colisión de un antiprotón con un átomo de hidrógeno, en donde la ionización es más evidente.

## 4.5. Colisión entre un antiprotón y un átomo de hidrógeno

Como ya se mencionó anteriormente, la probabilidad de que un átomo se ionice tras una colisión no puede ser calculada de la forma en que calculamos la probabilidad de captura electrónica debido a que la función de onda que describe al electrón expulsado hacia el continuo, en principio, sale hacia cualquier dirección; es por ello que en el código que se utilizó para describir la dinámica de la colisión  $p + H$ , se agregará una subrutina en la que se implementan las funciones de enmascaramiento cerca de la frontera de nuestra malla numérica.

Una vez más, la malla utilizada para esta colisión será de  $[-14.2, 14.2]_x \times [-14.2, 14.2]_y \times [-30.2, 30.2]_z$ , con un tamaño de paso de  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.4 \text{ a.u.}$ , por lo que la función de onda inicial para el estado base del átomo de hidrógeno (el blanco de la colisión), será el que se calcula cuando el tamaño de paso en la malla es de  $0.4 \text{ a.u.}$  en la parte espacial.

Cuando no se implementa la función de enmascaramiento en este tipo de colisión, la función de onda que es expulsada debido a la ionización, llega a las fronteras de la malla y rebota, generando modos normales semejantes a los que se forma cuando tenemos una onda estacionaria. Las paredes de la malla, cuando no se tienen funciones de enmascaramiento o potenciales complejos, se comportan como una barrera de potencial infinito.

La figura 4.6 muestra la dinámica de la colisión  $\bar{p} + H$  cuando no se implementa función de enmascaramiento. Aquí la energía de colisión es de  $1 \text{ keV}$  y el parámetro de impacto es de  $b = 1.2 \text{ a.u.}$  La dinámica se llevó a cabo en 667 unidades atómicas de tiempo y se presentan seis fotogramas para  $t_1 = 0.0 \text{ a.u.}$ ,  $t_2 = 125 \text{ a.u.}$ ,  $t_3 = 150 \text{ a.u.}$ ,  $t_4 = 186 \text{ a.u.}$ ,  $t_5 = 400 \text{ a.u.}$  y  $t_6 = 667 \text{ a.u.}$  Notemos que los modos normales no desaparecen, solo se van mezclando; las paredes de la malla, en este caso, obligan a la función de onda electrónica que describe el proceso de ionización a quedarse rebotando dentro de la malla el tiempo que se defina para realizar la dinámica.

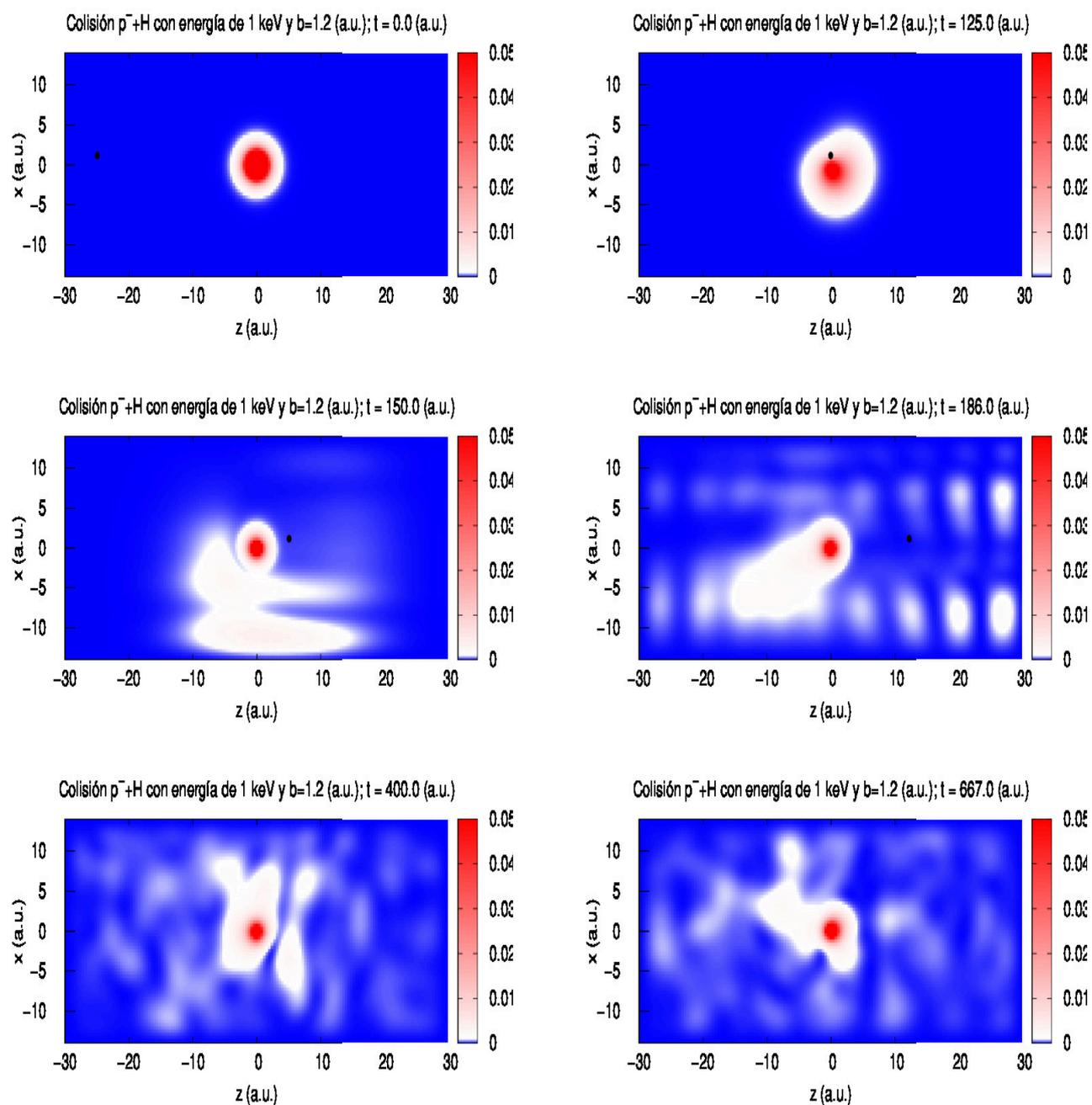


Figura 4.6: Dinámica de la colisión  $\bar{p} + H$  para una energía de colisión de 1 keV y un parámetro de impacto de  $b = 1.2$  a.u. en una malla sin paredes absorbentes.

Para observar cómo trabajan las paredes absorbentes, se emplearon las funciones de enmascaramiento (4.19) y (4.20) que comúnmente se trabajan en este tipo de problemas. Se definió una zona de absorción en las fronteras de dos unidades atómicas de longitud, es decir,  $L = 2.0$  *a.u.*

En la figura 4.7 se comparan las densidades de probabilidad electrónica al tiempo final  $t = 667$  *a.u.* para la colisión  $\bar{p} + H$  con dos funciones de enmascaramiento distintas definidas por (4.19) y (4.20), cuando la energía de colisión es de  $1$  *keV* y el parámetro de impacto es de  $b = 1.2$  *a.u.*; además, se presenta la densidad de probabilidad electrónica cuando la función de enmascaramiento es  $M = 1$  en toda la malla numérica, lo que es equivalente a no implementar paredes absorbentes, dejando inalterada a la función de onda en las fronteras.

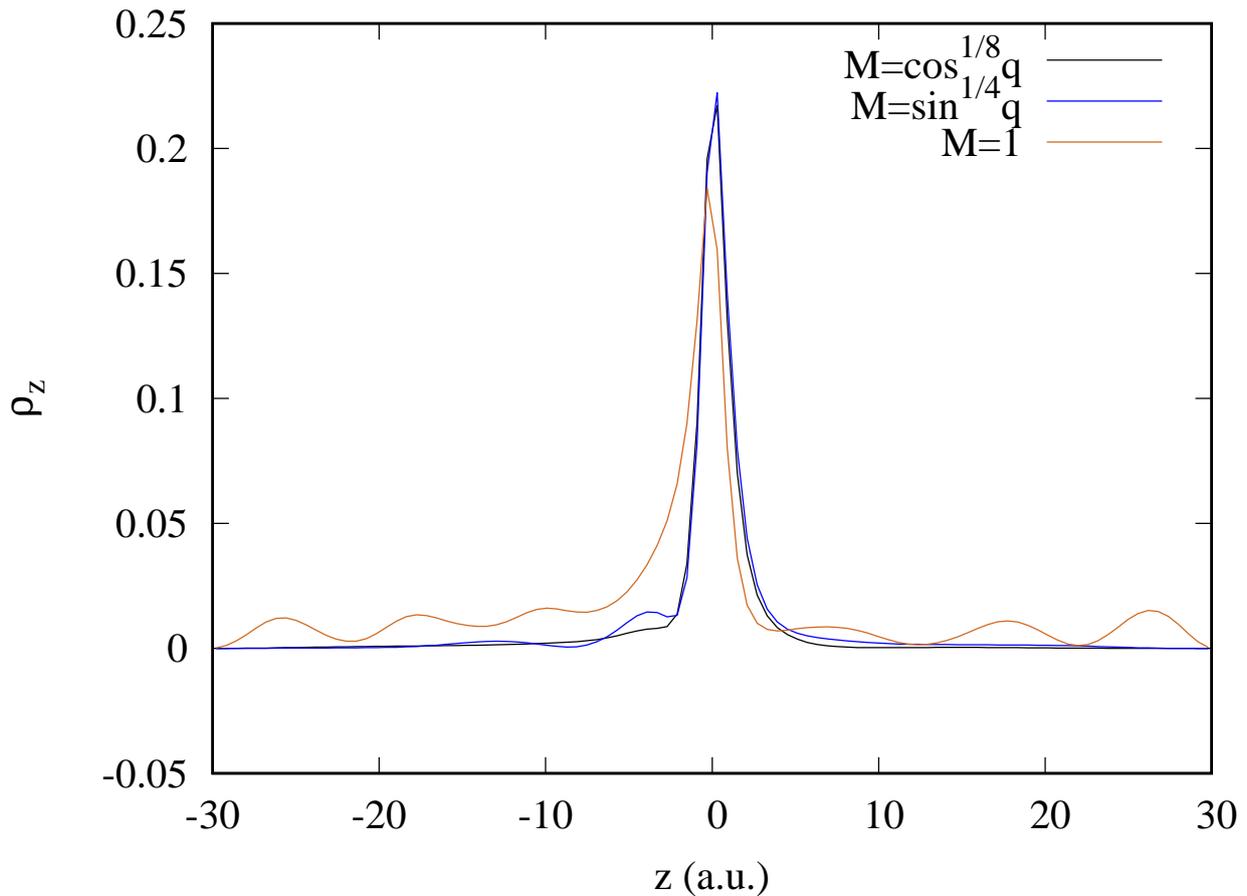


Figura 4.7: Densidad de probabilidad electrónica con distintas funciones de enmascaramiento para la colisión  $\bar{p} + H$ , donde  $q = \left( \frac{\pi |z_{max} - z_i|}{2L} \right)$ .

Notemos que la función de enmascaramiento que mejor elimina los modos normales en la malla y, por ende, la que mejor absorbe, es la función de enmascaramiento (4.19). De esta manera, en lo que sigue se trabajará con esta función de enmascaramiento.

Con la intención de mostrar la evolución de la función de onda electrónica durante la colisión  $\bar{p} + H$  cuando se implementan las paredes absorbentes, en la figura 4.8 se presenta la dinámica de la colisión  $\bar{p} + H$  cuando se elige una energía de colisión de  $1 \text{ keV}$ , correspondiente a una velocidad del antiprotón de  $v = 0.2 \text{ a.u.}$ , y donde el parámetro de impacto es  $b = 1.2 \text{ a.u.}$ . Nuevamente, la dinámica se llevó a cabo en 667 unidades atómicas de tiempo y se presentan seis fotogramas para  $t_1 = 0.0 \text{ a.u.}$ ,  $t_2 = 125 \text{ a.u.}$ ,  $t_3 = 150 \text{ a.u.}$ ,  $t_4 = 186 \text{ a.u.}$ ,  $t_5 = 400 \text{ a.u.}$  y  $t_6 = 667 \text{ a.u.}$

Una vez más, el proyectil es lanzado desde  $z = -25 \text{ a.u.}$  como lo fue en la colisión  $p + H$ , sin embargo, lo que provoca el proceso de ionización (y no el proceso de captura electrónica) es el hecho de cambiar la carga del proyectil; en este caso, dicha carga es de  $+1$  en unidades atómicas, por lo que se está tratando con un antiprotón proyectil.

Comparando las figuras 4.6 y 4.8 se observa que los modos normales cuando se introduce la función de enmascaramiento desaparecen, quedando dentro de la malla solo la función de onda que describe al átomo de hidrógeno excitado y absorbiendo la función de onda que describe al proceso de ionización.

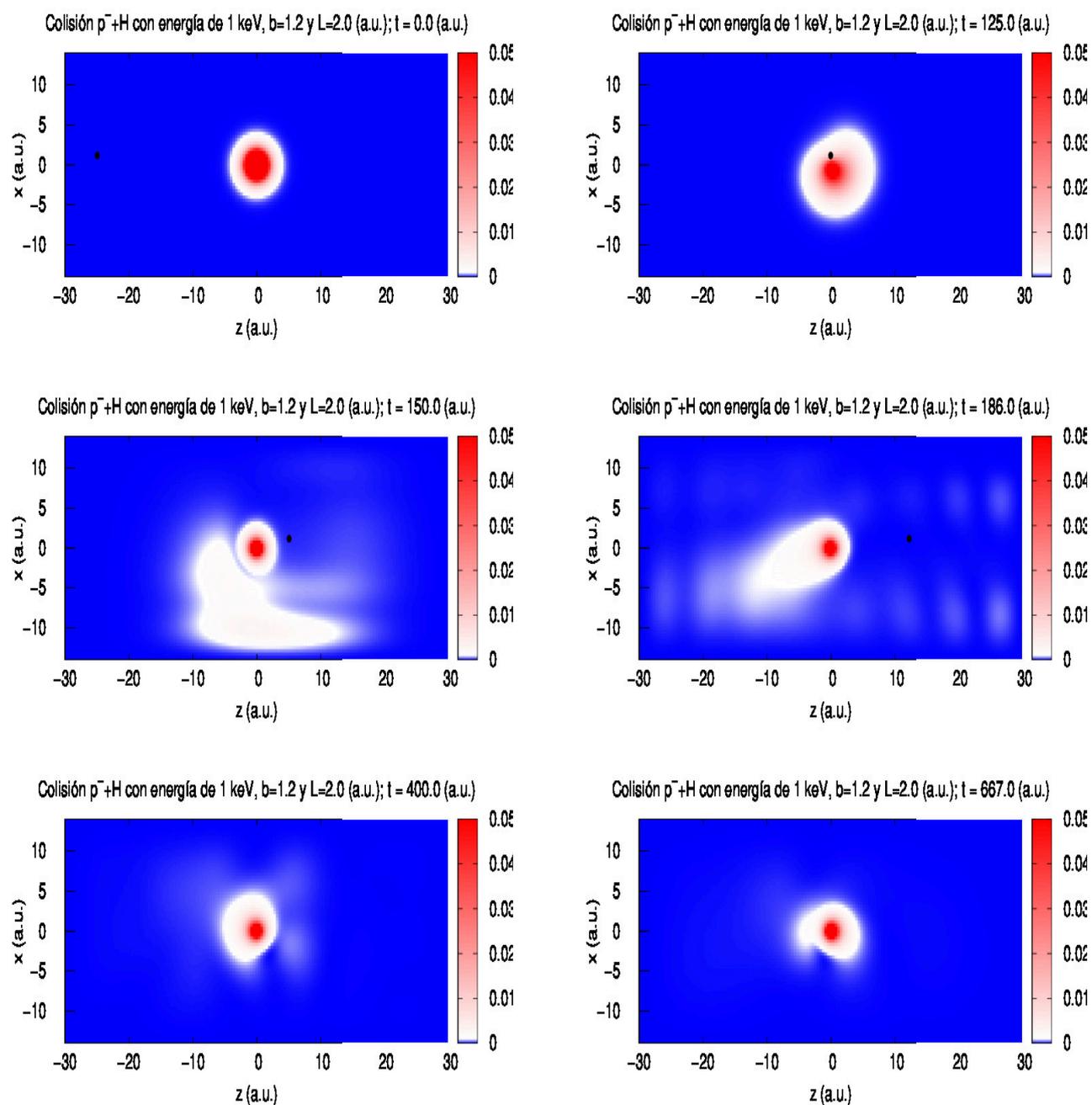


Figura 4.8: Dinámica de la colisión  $\bar{p} + H$  para una energía de colisión de 1 keV y un parámetro de impacto de  $b = 1.2$  a.u. en una malla con paredes absorbentes.

### 4.5.1. Probabilidad de ionización

Cuando se calcula la norma de la función de onda en la colisión  $p + H$ , el método de Crank-Nicolson asegura que ésta permanece inalterada, es decir, siempre vale 1; sin embargo, al trabajar con la colisión  $\bar{p} + H$  e implementar funciones de enmascaramiento para tener paredes absorbentes, la norma de la función de onda irá decreciendo a medida que la nube electrónica procedente del proceso de ionización llega a las fronteras.

Dependiendo de la energía de la colisión (y por ende, de la velocidad del proyectil), la densidad de probabilidad para la ionización será absorbida por las paredes absorbentes en un rango de tiempo distinto; entre más lento se mueva el proyectil, más tardará en ser absorbida la densidad de probabilidad de ionización. Es por ello que se busca que la norma disminuya hasta un valor en donde casi se vuelve constante. Puede que dicha norma siga presentando una disminución muy pequeña a pesar de que el tiempo se haga muy grande, pero bastará con que se mantenga constante en los primeros tres dígitos. De esta manera, para cada energía de colisión, habrá que tomar en cuenta que nuestra norma disminuida se debe de mantener después de cierto tiempo en un valor constante en, por lo menos, los primeros tres decimales.

Una vez se haya estabilizado la norma de la función de onda electrónica, ya podemos calcular la probabilidad de ionización. Como la nueva norma disminuida de la función de onda que sobrevive dentro de nuestra malla representa a la nube electrónica que no llegó a las fronteras absorbentes, se puede entender que esta es la probabilidad de que el proceso de ionización no ocurra; por ello, basta con restarle a 1 esta norma disminuida para obtener la probabilidad de que el proceso de ionización suceda.

Es importante aclarar que el tiempo que se define para que la dinámica se lleve a cabo, puede ser lo suficientemente grande como para que nuestro proyectil se salga de la malla. Por ejemplo, en la figura 4.9 se muestra como la norma decae de 1 a un cierto valor que se vuelve casi constante cuando la energía de colisión es de  $1 \text{ keV}$ . Aquí se utilizó una malla que va desde  $-30.2 \text{ a.u.}$  hasta  $30.2 \text{ a.u.}$  en el eje  $z$ , por lo que hay un total de  $60.4 \text{ a.u.}$  para que el proyectil se mueva dentro de la malla, pero el tiempo que se corrió la dinámica fue de  $t = 666.67 \text{ a.u.}$ ,

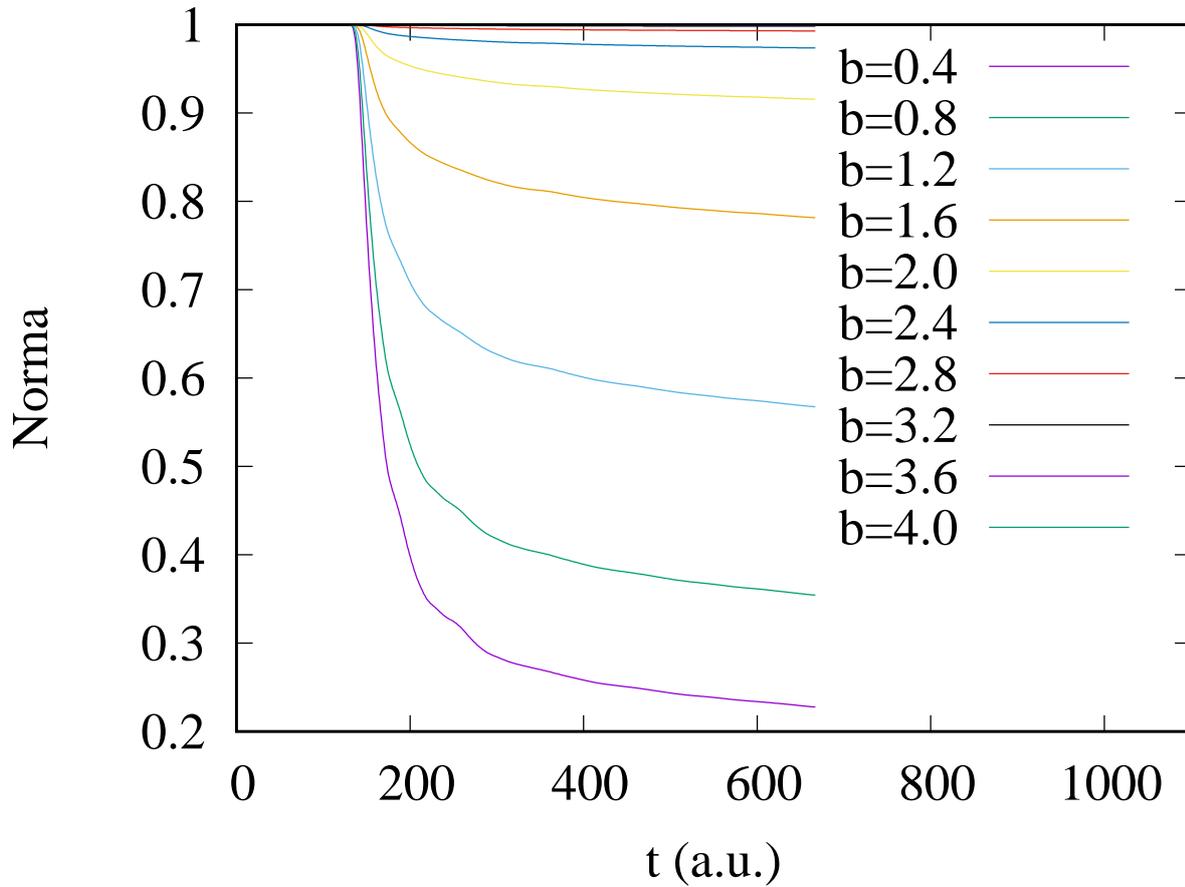


Figura 4.9: Norma de la función de onda para distintos parámetros de impacto para una energía de colisión de  $1 \text{ keV}$  para la colisión  $\bar{p} + H$ .

por lo que si la energía de colisión fue de  $1 \text{ keV}$  (equivalente a una velocidad del antiprotón de  $v = 0.2 \text{ a.u.}$ ), entonces la distancia que recorre es de  $d = 133.33 \text{ a.u.}$ . Es claro que el proyectil saldrá de la malla, pero esto no altera en nada a la función de onda electrónica, por lo que esto será una buena forma de asegurar que nuestras paredes absorbentes cumplen con su función.

Por otra parte, en la figura 4.10 se muestran los rangos del parámetro de impacto y de las energías de colisión en donde se alcanza un máximo para el valor de  $bP(b)$ . En este caso,  $[0, 3]_b \times [0.1, 100]_E$  es la región que presenta la mayor probabilidad de ionización.

En especial, se observa un máximo alrededor de  $b = 1.0 \text{ a.u.}$ , con una energía de aproximadamente  $E = 1 \text{ keV}$ . Este máximo se localiza alrededor de  $b = 1.0 \text{ a.u.}$  porque el antiprotón está colisionando de forma completamente frontal al electrón, el cuál se encuentra con mayor

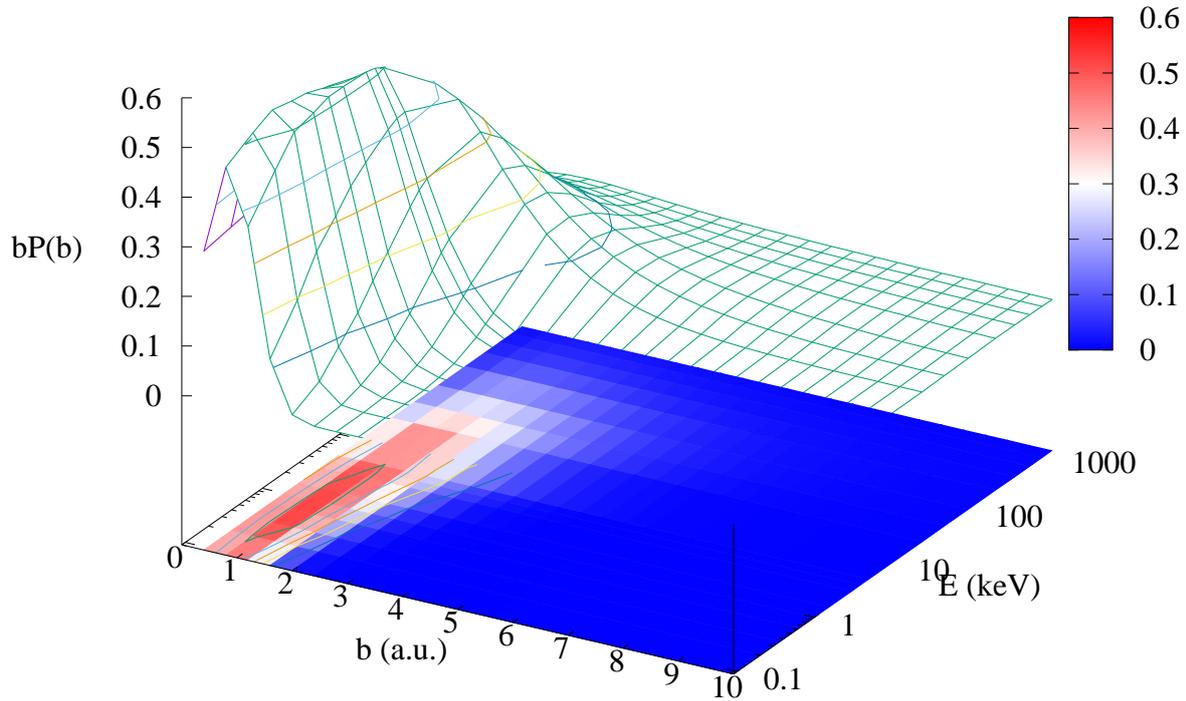


Figura 4.10: Mapa de densidad de  $bP(b)$  para la probabilidad de ionización en función del parámetro de impacto y la energía de colisión para la colisión  $\bar{p} + H$ .

probabilidad a un radio de Bohr del núcleo, es decir, a  $a_0 = b = 1.0 \text{ a.u.}$ ; cuánticamente el electrón debe de ser descrito como una nube electrónica la cuál tiene su máximo a una unidad atómica del núcleo; por ello, si el antiprotón es lanzado con un parámetro de impacto igual a una unidad atómica, es más probable que el antiprotón y el electrón del átomo de hidrógeno choquen frontalmente y se genere una ionización más notable.

Por último, la sección eficaz total de ionización calculada con el método de diferencias finitas se compara con resultados experimentales de Knudsen et. al. [19] y con los modelos teóricos de Schutz et. al. [2], Tong et. al. [3] y Wells et. al. [20] en la figura 4.11. La sección eficaz total de ionización comienza a crecer a medida que aumenta la energía de colisión, alcanza un máximo a  $25 \text{ keV}$  y después decae exponencialmente. Esta sección eficaz total de ionización, que representa la sección transversal efectiva vista por el proyectil al aproximarse al blanco en donde se genera la ionización, nos permite inferir que a muy bajas energías, el antiprotón no

lleva la suficiente energía como para mandar al electrón del átomo de hidrógeno al continuo, pero conforme la energía empieza a crecer y llega a  $25 \text{ keV}$ , el antiprotón alcanza la energía óptima para provocar ionización en el átomo de hidrógeno; después de esta energía de colisión, el antiprotón alcanza una velocidad muy grande y la interacción entre este y el átomo de hidrógeno es tan rápida que la ionización comienza a decrecer exponencialmente a medida que aumenta la energía.

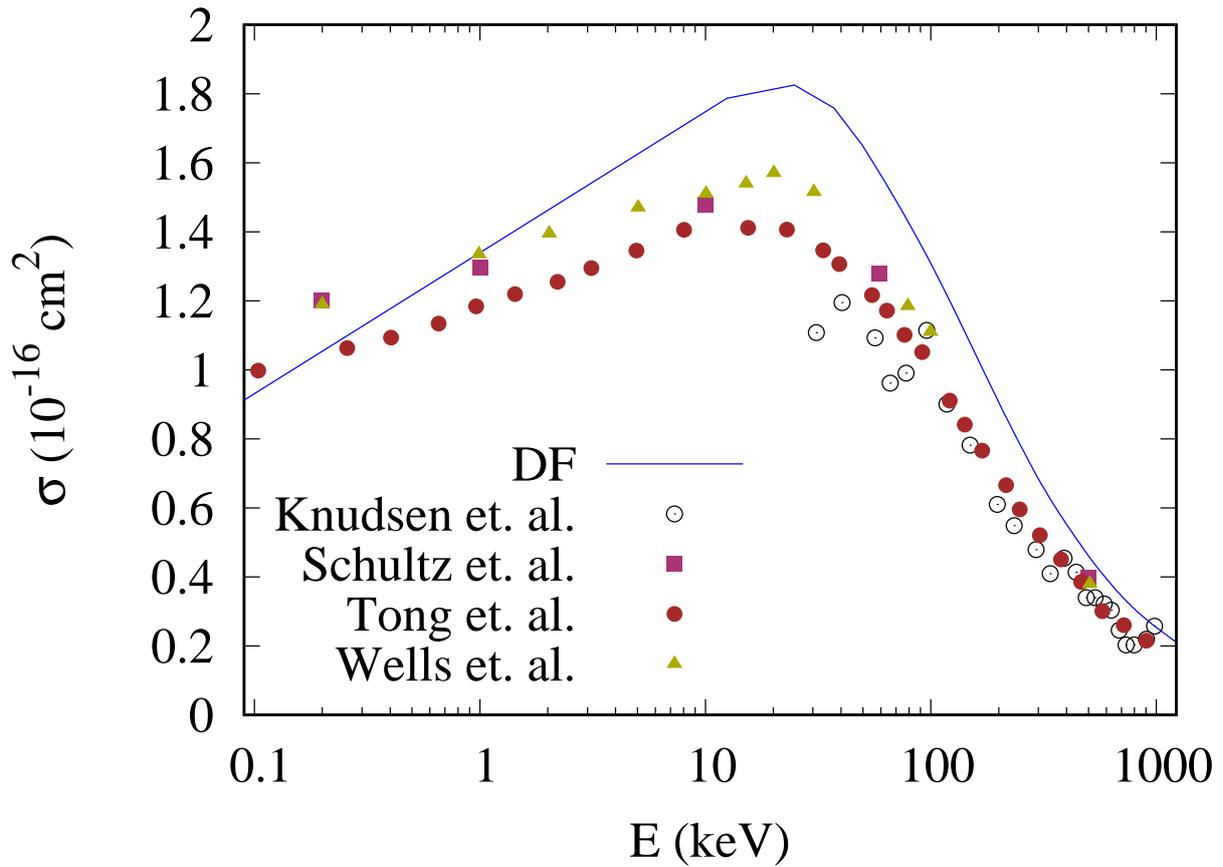


Figura 4.11: Sección eficaz total de ionización para la colisión  $\bar{p} + H$  a distintas energías de colisión calculada con diferencias finitas (DF) y comparada con los modelos teóricos de Schultz et. al. [2], Tong et. al. [3], Wells et. al. [20] y el experimento de Knudsen et. al. [19]

## 4.6. Colisión entre un antiprotón y un átomo de positronio

La colisión entre un antiprotón y un átomo de positronio puede resultar en tres canales posibles

$\bar{p} + Ps \rightarrow \bar{p} + Ps$	El sistema no se transforma
$\bar{p} + Ps \rightarrow \bar{p} + e^+ + e^-$	Fragmentación o ionización
$\bar{p} + Ps \rightarrow \bar{H} + e^-$	Captura

Utilizando trayectorias rectilíneas, el antiprotón proyectil lleva una velocidad constante, el núcleo del átomo de positronio se encuentra fijo en el origen del sistema y dicho átomo será tratado como un átomo hidrogenoide con ciertas limitaciones.

El hecho de que nuestro átomo blanco sea un átomo exótico formado por un electrón y un positrón nos obliga a trabajar con la masa reducida de este sistema, el cual es  $m_e/2$  (o 0.5 en unidades atómicas); debido a que ambas partículas tienen la misma masa, lo conveniente es trabajar a ambas como partículas cuánticas, sin embargo, omitamos este detalle por el momento (se hablará más de esto en las conclusiones).

Inicialmente, sabemos que el radio de Bohr para un átomo hidrogenoide va como el inverso de la masa de dicho átomo, por lo que para este caso, el radio para la primera órbita de Bohr será el doble del radio del átomo de hidrógeno. Es por ello que se trabajará con una malla más grande que la utilizada en las colisiones anteriores.

Tomando una malla de  $[-30.2, 30.2]_x \times [-30.2, 30.2]_y \times [-70.2, 70.2]_z$ , con un tamaño de paso de  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.4 \text{ a.u.}$ , se obtuvo la densidad de probabilidad electrónica proyectada sobre el eje  $z$  que se muestra en la figura 4.12; dicha densidad electrónica se compara con la densidad electrónica que se espera teóricamente para el átomo de positronio, considerando a este como un átomo hidrogenoide con masa reducida  $m_e/2$ . Aquí, la energía del estado base obtenida con el método de tiempo imaginario para dicho átomo fue de  $-0.24756643 \text{ a.u.}$

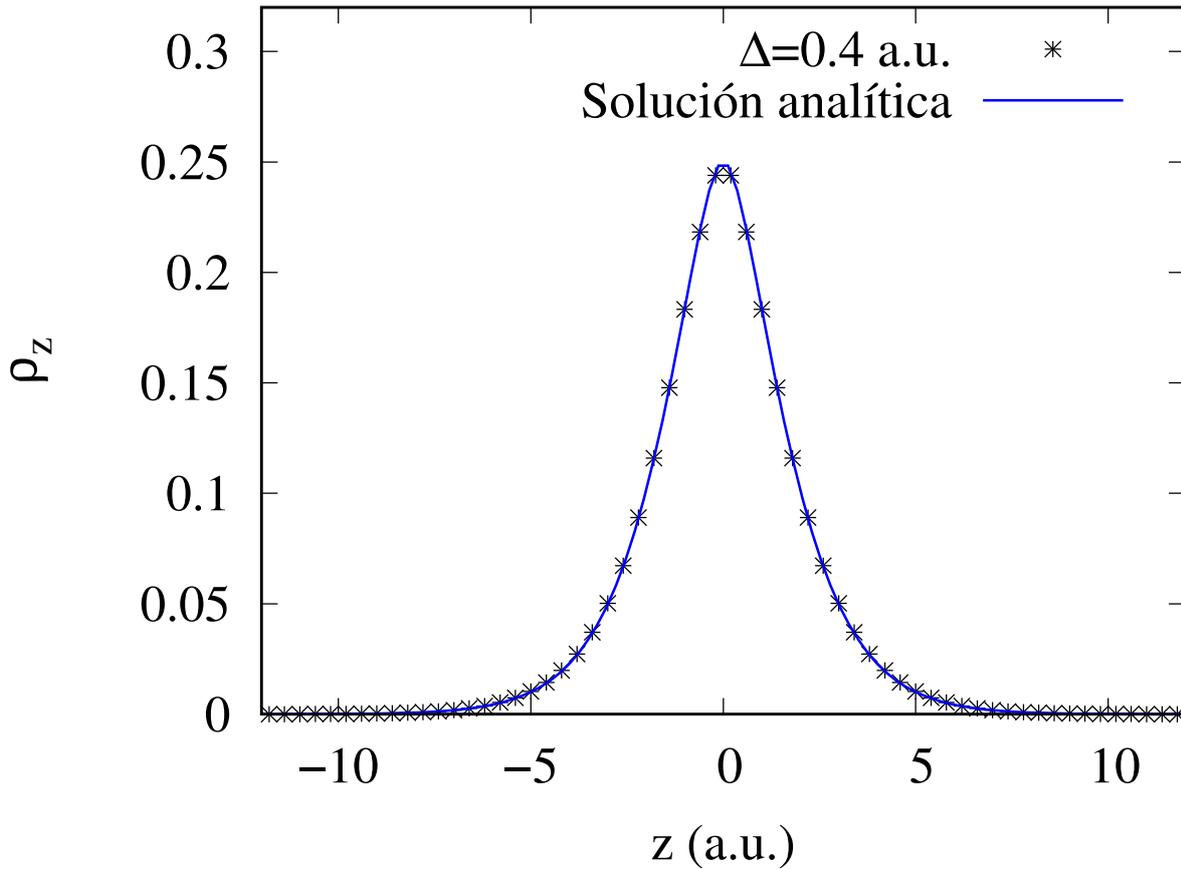


Figura 4.12: Densidad de probabilidad electrónica del estado base del átomo de positronio en una malla uniforme  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.4$  a.u. ( $\Delta = 0.4$  a.u.) comparada con la densidad de probabilidad electrónica analítica.

La energía del estado base del átomo de positronio con esta malla es muy cercana a la energía esperada teóricamente ( $E_{Ps} = -0.25$  a.u.), obteniéndose un error de 0.97%.

Es importante notar que para la formación de antihidrógeno, el positrón debe de poder ligarse con el antiprotón proyectil. Como el objetivo es la formación de antihidrógeno, se debe de tener en mente que las investigaciones relacionadas con la antimateria se realizan típicamente a bajas energías [21], pero con trayectorias rectilíneas no es posible la formación de este tipo de átomo debido a que el núcleo (el positrón) del átomo inicial se mantiene fijo en el origen; este proceso no es viable usando trayectorias rectilíneas. De esta manera, conviene implementar una teoría más completa para obtener trayectorias más realistas.

# Capítulo 5

## Dinámica electrón-núcleo

Describir la dinámica de una colisión usando trayectorias rectilíneas, como se ha presentado hasta ahora, da buenos resultados para altas energías de colisión; sin embargo, para bajas energías, dicho tipo de trayectorias ya no son tan buena aproximación para un tratamiento cuántico. Es por ello que en lo que sigue, se trabajará con la dinámica de nuestro sistema considerando un electrón puramente cuántico interactuando con  $N$  núcleos con cierta carga cada uno, que generarán un campo promedio con el que dicho electrón estará interactuando. Los núcleos serán tratados como un paquete de ondas gaussiano, pero dichas partículas serán clásicas.

Vamos a proponer una función de onda que sea un producto entre la función de onda electrónica y la función de onda nuclear

$$|\Psi\rangle = |\Psi_e\rangle|\phi_n\rangle \quad , \quad (5.1)$$

donde la parte nuclear estará descrita por

$$|\phi_n\rangle = \prod_{i=1}^N e^{-\frac{M_i\omega}{2\hbar}(\mathbf{x}_i-\mathbf{R}_i)^2 + \frac{i}{\hbar}\mathbf{P}_i\cdot(\mathbf{x}_i-\mathbf{R}_i)} \quad . \quad (5.2)$$

Aquí  $\mathbf{R}_i$  es el vector de posición del  $i$ -ésimo núcleo y  $\mathbf{P}_i$  es el momento del  $i$ -ésimo núcleo.

Para describir la dinámica del sistema, vamos a emplear el principio de mínima acción

$\delta A = 0$ , donde la acción viene dada por

$$A = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\Psi, \Psi^*, t) dt \quad (5.3)$$

y donde el lagrangiano cuántico viene dado por

$$\mathcal{L} = \langle \Psi | \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H} \right) | \Psi \rangle \quad (5.4)$$

Entonces, como queremos obtener el lagrangiano cuántico, lo primero que hay que calcular es

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \frac{\partial |\Psi_e\rangle}{\partial t} |\phi_n\rangle + |\Psi_e\rangle \frac{\partial |\phi_n\rangle}{\partial t} \quad (5.5)$$

De esta manera, al proyectar el ket de la derivada parcial de la función de onda respecto del tiempo sobre el bra de esta misma función de onda, se tiene que

$$\begin{aligned} \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right. \right\rangle &= \langle \phi_n | \phi_n \rangle \left\langle \Psi_e \left| \frac{\partial \Psi_e}{\partial t} \right. \right\rangle + \langle \Psi_e | \Psi_e \rangle \left\langle \phi_n \left| \frac{\partial \phi_n}{\partial t} \right. \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi_e \left| \frac{\partial \Psi_e}{\partial t} \right. \right\rangle + \left\langle \phi_n \left| \frac{\partial \phi_n}{\partial t} \right. \right\rangle \quad (5.6) \end{aligned}$$

Notemos que, si tomamos  $\alpha_i = -\frac{M_i\omega}{2\hbar} (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i)^2 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i)$ , tendremos que la derivada parcial respecto del tiempo de la función de onda nuclear es

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\phi_n\rangle}{\partial t} &= \left| \frac{\partial \phi_n}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \prod_{i=1}^N e^{-\frac{M_i\omega}{2\hbar} (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i)^2 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i)} \right\} \\ &= \frac{1}{\hbar} \left[ M_1\omega (\mathbf{x}_1 - \mathbf{R}_1) \cdot \dot{\mathbf{R}}_1 + i\dot{\mathbf{P}}_1 \cdot (\mathbf{x}_1 - \mathbf{R}_1) - i\mathbf{P}_1 \cdot \dot{\mathbf{R}}_1 \right] e^{\alpha_1} \prod_{i=2}^N e^{\alpha_i} \\ &\quad + e^{\alpha_1} \frac{\partial}{\partial t} \left[ \prod_{i=2}^N e^{\alpha_i} \right] \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{\hbar} \left[ M_i\omega (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) \cdot \dot{\mathbf{R}}_i + i\dot{\mathbf{P}}_i \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) - i\mathbf{P}_i \cdot \dot{\mathbf{R}}_i \right] |\phi_n\rangle \quad , \end{aligned}$$

es decir

$$\frac{\partial |\phi_n\rangle}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left[ M_i\omega (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) \cdot \dot{\mathbf{R}}_i + i\dot{\mathbf{P}}_i \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) - i\mathbf{P}_i \cdot \dot{\mathbf{R}}_i \right] |\phi_n\rangle \quad (5.7)$$

Más aún, el valor esperado de la variable cuántica del  $i$ -ésimo núcleo  $\mathbf{x}_i$  para los estados nucleares es  $\mathbf{R}_i$ , por lo que  $\langle \phi_n | \mathbf{x}_i | \phi_n \rangle = \mathbf{R}_i$ , de donde se sigue que

$$\begin{aligned} \left\langle \phi_n \left| \frac{\partial \phi_n}{\partial t} \right. \right\rangle &= \frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^N \langle \phi_n | \left[ M_i \omega (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) \cdot \dot{\mathbf{R}}_i + i \dot{\mathbf{P}}_i \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) - i \mathbf{P}_i \cdot \dot{\mathbf{R}}_i \right] | \phi_n \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left[ M_i \omega \langle \phi_n | (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) \cdot \dot{\mathbf{R}}_i | \phi_n \rangle + i \langle \phi_n | \dot{\mathbf{P}}_i \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) | \phi_n \rangle - i \langle \phi_n | \mathbf{P}_i \cdot \dot{\mathbf{R}}_i | \phi_n \rangle \right] \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left[ M_i \omega \dot{\mathbf{R}}_i \cdot \underbrace{(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_i)}_{=1} + i \dot{\mathbf{P}}_i \cdot \underbrace{(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_i)}_{=1} - i \mathbf{P}_i \cdot \dot{\mathbf{R}}_i \underbrace{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}_{=1} \right] . \end{aligned}$$

Por lo tanto, la proyección del ket de la derivada parcial de la función de onda nuclear respecto del tiempo sobre el bra de la misma función de onda nuclear nos da

$$\left\langle \phi_n \left| \frac{\partial \phi_n}{\partial t} \right. \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \mathbf{P}_i \cdot \dot{\mathbf{R}}_i . \quad (5.8)$$

De esta manera, el lagrangiano cuántico nos queda

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= i\hbar \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right. \right\rangle - \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle \\ &= i\hbar \left\langle \Psi_e \left| \frac{\partial \Psi_e}{\partial t} \right. \right\rangle + \sum_{i=1}^N \mathbf{P}_i \cdot \dot{\mathbf{R}}_i - \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle . \end{aligned} \quad (5.9)$$

Por otra parte, el hamiltoniano de nuestro sistema debe de considerar la energía cinética del electrón, la energía cinética de los  $N$  núcleos, el potencial coulombiano entre el electrón y cada uno de los núcleos, y el potencial coulombiano entre los núcleos; es decir

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_{\mathbf{x}_i}^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i>j}^N \frac{Z_i Z_j e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} . \quad (5.10)$$

Entonces, calculando el valor esperado del hamiltoniano de nuestro sistema, se tiene

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle &= \langle \Psi_e | \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} \right) | \Psi_e \rangle \\
 &\quad + \langle \phi_n | \left( -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_{\mathbf{x}_i}^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i>j}^N \frac{Z_i Z_j e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \right) | \phi_n \rangle \\
 &= \langle \Psi_e | \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} \right) | \Psi_e \rangle \\
 &\quad + \langle \phi_n | \left( -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_{\mathbf{x}_i}^2 \right) | \phi_n \rangle + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i>j}^N \frac{Z_i Z_j e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} . \quad (5.11)
 \end{aligned}$$

Así, calculemos el valor esperado de la energía cinética de los núcleos sobre los estados nucleares:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_n | \left( -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_{\mathbf{x}_i}^2 \right) | \phi_n \rangle &= -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \langle \phi_n | \nabla_{\mathbf{x}_i}^2 | \phi_n \rangle \\
 &= -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \left[ \langle \phi_n | \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i^2} \prod_{j=1}^N e^{\alpha_j} \right] \\
 &= -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \left\{ \langle \phi_n | \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \left[ \left( -\frac{M_i \omega}{\hbar} (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_i \right) \prod_{j=1}^N e^{\alpha_j} \right] \right\} \\
 &= -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \left\{ \langle \phi_n | \left[ -\frac{M_i \omega}{\hbar} | \phi_n \rangle + \left( -\frac{M_i \omega}{\hbar} (\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i) + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_i \right)^2 | \phi_n \rangle \right] \right\} \\
 &= -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \left[ -\frac{M_i \omega}{\hbar} - \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{P}_i^2 \right] .
 \end{aligned}$$

De donde se sigue que

$$\langle \phi_n | \left( -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_{\mathbf{x}_i}^2 \right) | \phi_n \rangle = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i} + \frac{\hbar\omega}{2} \right] . \quad (5.12)$$

Notemos que nos queda la energía cinética clásica de cada uno de los núcleos con masa  $M_i$ , más un término de energía cuántica que es específicamente la energía del estado base del oscilador armónico cuántico. Sin embargo, como queremos que los núcleos sean partículas clásicas, ignoremos el término de la energía del oscilador armónico cuántico, lo que equivale a considerar  $\omega \rightarrow 0$ , es decir, consideremos un paquete de ondas con una anchura muy pequeña, de tal forma que los núcleos queden descritos por una función delta.

Con esta aproximación, tenemos finalmente que

$$\langle \phi_n | \left( - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_{\mathbf{x}_i}^2 \right) | \phi_n \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i} . \quad (5.13)$$

Sustituyendo el valor esperado de la energía cinética de los  $N$  núcleos clásicos (5.13) en el valor esperado del hamiltoniano (5.11), tenemos:

$$\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi_e | \left( - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} \right) | \Psi_e \rangle + \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i>j}^N \frac{Z_i Z_j e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} . \quad (5.14)$$

Así, el lagrangiano descrito por la ecuación (5.9) está dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & i\hbar \left\langle \Psi_e \left| \frac{\partial \Psi_e}{\partial t} \right. \right\rangle + \sum_{i=1}^N \mathbf{P}_i \cdot \dot{\mathbf{R}}_i - \langle \Psi_e | \left( - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} \right) | \Psi_e \rangle \\ & - \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i>j}^N \frac{Z_i Z_j e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} . \end{aligned} \quad (5.15)$$

El siguiente paso es construir las ecuaciones de movimiento a partir de la ecuación de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0 , \quad (5.16)$$

donde las coordenadas generalizadas  $q$  para nuestro caso serán  $q = \langle \Psi_e |, \mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i$ .

Primero, calculemos la ecuación de movimiento para la parte electrónica  $q = \langle \Psi_e |$  notando que

$$\dot{q} = \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi_e | = \left\langle \frac{\partial \Psi_e}{\partial t} \right| . \quad (5.17)$$

Pero  $\mathcal{L}$  para nuestro caso, no contiene al bra  $\langle \frac{\partial \Psi_e}{\partial t} |$ . Entonces

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \langle \frac{\partial \Psi_e}{\partial t} |} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \langle \Psi_e |} = 0 \quad \implies \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \langle \Psi_e |} = 0 . \quad (5.18)$$

Derivando el lagrangiano parcialmente respecto de  $\langle \Psi_e |$ , obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_e\rangle - \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} \right] |\Psi_e\rangle = 0 \quad .$$

Es decir

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} \right] |\Psi_e\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_e\rangle \quad , \quad (5.19)$$

la cual es la ecuación de Schrödinger del electrón interactuando con los  $N$  núcleos.

Por otro lado, para la coordenada  $q = \mathbf{R}_i$ , se tiene que  $\dot{q} = \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial t} = \dot{\mathbf{R}}_i$ , pero

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{R}}_i} = \mathbf{P}_i \quad \Longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{R}}_i} \right) = \dot{\mathbf{P}}_i \quad . \quad (5.20)$$

Más aún

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{R}_i} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_i} \left[ -\langle \Psi_e | \left( -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k=1}^N \frac{Z_k e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{R}_k|} \right) | \Psi_e \rangle - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k>j}^N \frac{Z_k Z_j e^2}{|\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j|} \right] \\ &= -\langle \Psi_e | \left( -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k=1}^N Z_k e^2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_i} \frac{1}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{R}_k|} \right) | \Psi_e \rangle - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k>j}^N Z_k Z_j e^2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_i} \frac{1}{|\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j|} \\ &= \langle \Psi_e | \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Z_i e^2 \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|^3} \right) | \Psi_e \rangle + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k>j}^N \frac{Z_k Z_j e^2}{|\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j|^3} \left[ (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j) \delta_{ik} - (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j) \delta_{ij} \right] \quad . \end{aligned} \quad (5.21)$$

De donde se sigue que

$$\dot{\mathbf{P}}_i = \langle \Psi_e | \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Z_i e^2 \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|^3} \right) | \Psi_e \rangle + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k>j}^N \frac{Z_k Z_j e^2}{|\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j|^3} \left[ (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j) \delta_{ik} - (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j) \delta_{ij} \right] \quad . \quad (5.22)$$

Esta segunda ecuación de movimiento describe la fuerza del  $i$ -ésimo núcleo que hay entre el electrón y dicho núcleo (es decir, la interacción del  $i$ -ésimo núcleo interactuando con el campo promedio generado por el electrón cuántico), así como las fuerzas entre dicho núcleo con los demás.

Por último, cuando  $q = \mathbf{P}_i$ , se tiene que  $\dot{q} = \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{P}_i}{\partial t} = \dot{\mathbf{P}}_i$ , pero el lagrangiano no depende de  $\dot{\mathbf{P}}_i$ , por lo que

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{P}}_i} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{P}_i} = 0 \quad . \quad (5.23)$$

Además

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{P}_i} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_i} \left[ \sum_{k=1}^N \mathbf{P}_k \cdot \dot{\mathbf{R}}_k - \sum_{k=1}^N \frac{\mathbf{P}_k^2}{2M_k} \right] \\ &= \dot{\mathbf{R}}_i - \frac{\mathbf{P}_i}{M_i} \quad . \end{aligned} \quad (5.24)$$

Entonces, comparando las ecuaciones (5.23) y (5.24), obtenemos

$$\mathbf{P}_i = M_i \dot{\mathbf{R}}_i \quad . \quad (5.25)$$

Esta última ecuación de movimiento es simplemente el momento lineal del  $i$ -ésimo núcleo.

De esta manera, se tienen las siguientes ecuaciones de movimiento para la dinámica de un sistema de un electrón cuántico con  $N$  núcleos clásicos:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} \right] |\Psi_e\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_e\rangle \quad (5.26)$$

$$\mathbf{P}_i = M_i \dot{\mathbf{R}}_i \quad (5.27)$$

$$\dot{\mathbf{P}}_i = \langle \Psi_e | \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Z_i e^2 \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^3} \right) | \Psi_e \rangle + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k>j}^N Z_k Z_j e^2 \frac{(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j)}{|\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j|^3} (\delta_{ik} - \delta_{ij}) \quad (5.28)$$

Estas tres ecuaciones de movimiento están acopladas, por lo que se tendrán que resolver simultáneamente con algún método computacional que permita resolver sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas, como lo es el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

# Capítulo 6

## Conclusiones

En la presente tesis se utilizó el método de diferencias finitas y el método de Crank-Nicolson como método computacional para resolver la ecuación de Schrödinger en diferentes problemas de mecánica cuántica, como lo es el oscilador armónico, la parte radial del átomo de hidrógeno y los coeficientes de reflexión y transmisión en el efecto Ramsauer-Townsend; este tipo de problemas que tienen soluciones analíticas permitieron comparar estas con los resultados numéricos, obteniendo una muy buena precisión que dependía del tamaño de paso en la malla; entre mayor sea  $\Delta x$ , mayor será el error obtenido en los resultados numéricos. Así mismo, entre más pequeño sea  $\Delta x$ , los resultados numéricos se aproximarán más a los analíticos.

Por otra parte, al implementar estos métodos para la dinámica de las colisiones  $p + H$  y  $\bar{p} + H$ , se obtuvieron muchos resultados importantes y que estuvieron de acuerdo con los datos experimentales. En primer lugar, al obtener el estado  $1s$  del átomo de hidrógeno mediante la ecuación de Schrödinger en tiempo imaginario, se observó la misma dependencia en el tamaño de paso  $\Delta x$ ; además, al cambiar el tamaño de paso en la parte temporal, se observa que este cambio solo hará que la función de onda converja más rápido al estado base siempre que  $\Delta t$  no sean bastante grande. Más aún, la condición de que  $\Delta t/4\Delta x^2$  sea menor que uno nos permite asegurar que la propagación de la función de onda no sea inestable. Para obtener los mejores resultados, se debe de cumplir esta condición de estabilidad, pero también se debe de considerar si vale la pena tener un tiempo de cómputo muy grande; así que a la hora de definir la malla, es importante analizar qué tanta precisión se quiere tener, y cual es el tiempo de cómputo aceptable para nuestras corridas, considerando que el tiempo de cómputo crece como  $N^5$ , donde  $N$

es el número de puntos que hay en la malla.

Para las colisiones planteadas, se decidió correr energías de colisión que estén en los rangos de los datos experimentales, y se notó que para bajas energías de colisión, los resultados obtenidos para trayectorias rectilíneas no son tan buena aproximación ya que, desde un punto de vista más realista, el proyectil debe de reajustar su trayectoria debido a que este último y el blanco tienen más tiempo para interactuar, y entonces la interacción entre partículas genera más efectos unas sobre otras. Como el proyectil, para trayectorias rectilíneas, lo estamos forzando a viajar a una velocidad constante, estamos agregando fuerzas físicamente inexistentes que neutralizan a las fuerzas de repulsión o atracción coulombiana que surgen de la interacción entre proyectil y blanco. La aceleración que sufrirá el proyectil dependerá de la energía de colisión (y por ende, de la velocidad del proyectil en estos casos donde el blanco está fijo), pero al obligar al proyectil a viajar con velocidad constante, estamos insertando fuerzas en el sistema de tal forma que la fuerza total sobre el proyectil sea cero, generando una aceleración nula.

Además, el hecho de que supongamos que el núcleo esté fijo, no permite que para bajas energías dicho átomo sea desplazado debido a la interacciones de repulsión entre núcleo y proyectil, o entre electrón y proyectil, dependiendo de qué tipo de colisión se esté tratando. A bajas energías en la colisión antiprotón-hidrógeno es donde se presenta la formación de protonio, por lo que se tiene que recurrir a la dinámica electrón-núcleo para permitirle a todas las partículas moverse desde un enfoque semiclásico.

Otro punto importante que se debe de mencionar es que las colisiones protón-hidrógeno tienen como canal dominante al proceso de captura electrónica, sin embargo, como la mecánica cuántica nos impone un enfoque probabilístico, los procesos de ionización también son posibles. Aquí habrá que decidir el tamaño de la malla adecuado para que en ella estén incluidos los estados resultantes después de la colisión; por ejemplo, para ciertas energías de colisión se observa que un posible canal después de la colisión  $p + H$  es un átomo excitado descrito por orbitales  $p$ , lo que nos lleva a definir una malla más grande que la utilizada cuando solo se tiene el estado base; una vez más, será importante decidir qué tan grande se hace la malla para que los canales resultantes estén dentro de la malla, pero que esta no alargue el tiempo de cómputo

demasiado.

A pesar de que el código empleado para las colisiones con trayectorias rectilíneas funciona para cualquier átomo hidrogenoide como blanco y cualquier partícula cargada como proyectil, se decidió no trabajar con esta dinámica de la colisión entre un átomo de positronio con un antiprotón por varias razones. La primera es que, al tener al núcleo fijo, la formación de antihidrógeno no sería posible, a menos que el proyectil (el antiprotón) se detenga completamente y se mantenga ligado al positrón (el cual podríamos considerar, en primera instancia, como el núcleo del átomo de positronio), pero esto no podría ser posible a menos que se trabajara a muy bajas energías de colisión (incluso así se tendría problemas con la conservación del momento); sin embargo, esto nos trae de vuelta al problema de que en realidad, ninguno de estos procesos cuánticos pueden ser tratados con partículas clásicas fijas. De hecho, la dificultad fundamental de este proceso es el hecho de que el átomo de positronio que debe de ser colocado inicialmente, es un átomo exótico que consiste de dos partículas de masas iguales; dichas partículas deberán ser tratadas como partículas cuánticas, por lo que el estado del átomo tendrá que ser descrito a través de dos funciones de onda, una para el electrón y otra para el positrón.

En el capítulo 4 se trabajó al positronio a través de una sola función de onda, suponiendo una masa reducida de  $m_e/2$ , y se omitió el hecho de que ambas partículas deben de ser tratadas cuánticamente. Sin embargo, utilizar la masa reducida nos permite trabajar el problema de dos cuerpos como si fuese un solo cuerpo orbitando un sistema de referencia anclado en el centro de masas de los dos cuerpos iniciales. Esto tiene la limitación de que los cuerpos tratados deben de ser clásicos, pero nuestras dos partículas que componen el átomo de positronio forzosamente tienen que describirse desde un punto de vista cuántico.

Incluso con el formalismo de la dinámica electrón-núcleo mostrado en el capítulo 5, la formación de antihidrógeno no podría ser tratada con una precisión aceptable ya que las ecuaciones de movimiento de DEN mostradas anteriormente suponen núcleos clásicos que se pueden mover bajo las reglas de la mecánica clásica, es decir, no son núcleos cuánticos; pero el positronio debe de ser tratado como un sistema de dos partículas cuánticas ligadas con cargas de signos opuestos.

Debido a lo anterior, la formación de antihidrógeno no es conveniente trabajarla bajo estos métodos, a menos de que desarrollemos las ecuaciones de movimiento de DEN para el antiprotón proyectil (considerando a este una partícula clásica) y el positronio de manera simultánea, pero considerando al electrón y al positrón como partículas cuánticas. Es por ello que se optó por obtener primero resultados teóricos de las colisiones  $p + H$  y  $\bar{p} + H$  con trayectorias rectilíneas, y así comparar estos con los datos experimentales. Gracias a esto, se concluye que los métodos utilizados son de gran utilidad en procesos cuánticos como lo son las colisiones anteriormente mencionadas, además de que conllevan a una buena precisión, siempre y cuando se respeten las condiciones de convergencia. En el futuro se intentará implementar la dinámica electrón-núcleo en los códigos trabajados hasta ahora para describir trayectorias más realistas y, con ello, poder obtener la formación de antihidrógeno que se planteó inicialmente.

# Bibliografía

- [1] C. Martínez-Flores, F.J. Domínguez-Gutiérrez, and R. Cabrera-Trujillo. Rotational and vibrational effects on the energy loss of hydrogen colliding on glycine at low irradiation energies. *Radiation Physics and Chemistry*, 166:108513, 2020.
- [2] D. R. Schultz, P. S. Krstić, C. O. Reinhold, and J. C. Wells. Ionization of hydrogen and hydrogenic ions by antiprotons. *Phys. Rev. Lett.*, 76:2882–2885, Apr 1996.
- [3] Xiao-Min Tong, Tsutomu Watanabe, Daiji Kato, and Shunsuke Ohtani. Ionization of atomic hydrogen by antiproton impact: A direct solution of the time-dependent schrödinger equation. *Phys. Rev. A*, 64:022711, Jul 2001.
- [4] Benjamin J Killian, Remigio Cabrera-Trujillo, Erik Deumens, and Yngve Öhrn. Resonant charge transfer between  $H^+$  and  $H$  from 1 to 5000 eV. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(24):4733–4747, dec 2004.
- [5] Helge Knudsen. Ionization of atoms and molecules by antiproton impact. *Hyperfine Interactions*, 109:133–143, Aug 1997.
- [6] J W Humberston, M Charlton, F M Jacobson, and B I Deutch. On antihydrogen formation in collisions of antiprotons with positronium. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 20(1):L25–L29, jan 1987.
- [7] Nobuhiro Yamanaka and Yasushi Kino. Antihydrogen-formation cross sections in antiproton-positronium collisions with a time-dependent coupled-channel method. *Phys. Rev. A*, 65:062709, Jun 2002.
- [8] J W Darewych. Formation of antihydrogen in excited states in antiproton-positronium collisions. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 20(21):5917–5924, nov 1987.
- [9] R. J. Whitehead, J. F. McCann, and I. Shimamura. Laser-assisted formation of antihydrogen. *Phys. Rev. A*, 64:023401, Jun 2001.
- [10] J S Briggs and E A Solov'ev. Antihydrogen formation in antiproton collisions with positronium: the adiabatic approach. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 34(7):1337–1342, mar 2001.
- [11] R. Cabrera-Trujillo and B. D. Esry. Protonium formation in collisions of antiprotons with atomic and molecular hydrogen: a semiclassical study. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 166(5):346–356, 2011.

- 
- [12] William T Vetterling, William T Vetterling, William H Press, William H Press, Saul A Teukolsky, Brian P Flannery, and Brian P Flannery. *Numerical Recipes: Example Book C*. Cambridge University Press, 1992.
- [13] Armin Lühr. *Collisions of low-energy antiprotons and protons with atoms and molecules*. PhD thesis, Humboldt-Universität zu Berlin, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät I, 2010.
- [14] Umberto De Giovannini, Ask Hjorth Larsen, and Angel Rubio. Modeling electron dynamics coupled to continuum states in finite volumes with absorbing boundaries. *The European Physical Journal B*, 88:56, Mar 2015.
- [15] GG Balint-Kurti and A Vibok. Complex absorbing potentials in time dependent quantum dynamics. In *Numerical Grid Methods and Their Application to Schrödingers Equation*, pages 195–205. Springer, 1993.
- [16] M. W. Gealy and B. Van Zyl. Cross sections for electron capture and loss. i.  $H^+$  and  $H^-$  impact on H and  $H_2$ . *Phys. Rev. A*, 36:3091–3099, Oct 1987.
- [17] W. L. Fite, A. C. H. Smith, R. F. Stebbings, and David Robert Bates. Charge transfer in collisions involving symmetric and asymmetric resonance. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 268(1335):527–536, 1962.
- [18] GW McClure. Electron transfer in proton-hydrogen-atom collisions: 2-117 keV. *Physical Review*, 148(1):47, 1966.
- [19] H. Knudsen, U. Mikkelsen, K. Paludan, K. Kirsebom, S. P. Møller, E. Uggerhøj, J. Slevin, M. Charlton, and E. Morenzoni. Ionization of atomic hydrogen by 30–1000 keV antiprotons. *Phys. Rev. Lett.*, 74:4627–4630, Jun 1995.
- [20] J. C. Wells, D. R. Schultz, P. Gavras, and M. S. Pindzola. Numerical solution of the time-dependent schrödinger equation for intermediate-energy collisions of antiprotons with hydrogen. *Phys. Rev. A*, 54:593–604, Jul 1996.
- [21] M. Charlton, H. B. Ambalampitiya, I. I. Fabrikant, D. V. Fursa, A. S. Kadyrov, and I. Bray. Collisions of antiprotons with excited positronium atoms. *Phys. Rev. A*, 104:L060803, Dec 2021.
- [22] A. Latina. Tools for scientific computing, 2021.
- [23] Harald Friedrich and H Friedrich. *Theoretical atomic physics*, volume 3. Springer, 2006.
- [24] I B Abdurakhmanov, A S Kadyrov, I Bray, and A T Stelbovics. Coupled-channel integral-equation approach to antiproton–hydrogen collisions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44(7):075204, mar 2011.
- [25] Fatima Anis, V. Roudnev, R. Cabrera-Trujillo, and B. D. Esry. Laser-assisted charge transfer in  $He^{2+} + H$  collisions. *Phys. Rev. A*, 73:043414, Apr 2006.

- 
- [26] Lukáš Pichl, Shiyang Zou, Mineo Kimura, Izumi Murakami, and Takako Kato. Total, partial, and differential ionization cross sections in proton–hydrogen atom collisions in the energy region of 0.1–10 keV/u. *Journal of physical and chemical reference data*, 33(4):1031–1058, 2004.
- [27] AS Kadyrov, I Bray, and AT Stelbovics. Fully quantal close-coupling approach to antiproton-hydrogen collisions. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 388. IOP Publishing, 2012.
- [28] E. Deumens, A. Diz, R. Longo, and Y. Öhrn. Time-dependent theoretical treatments of the dynamics of electrons and nuclei in molecular systems. *Rev. Mod. Phys.*, 66:917–983, Jul 1994.
- [29] Armin Lühr, Nicolas Fischer, and Alejandro Saenz. Interaction of antiprotons with Rb atoms and a comparison of antiproton stopping powers of the atoms H, Li, Na, K, and Rb. *Hyperfine Interactions*, 194(1):51–57, 2009.
- [30] Hans Jürgen Lüdde, Marko Horbatsch, and Tom Kirchner. Calculation of energy loss in antiproton collisions with many-electron systems using Ehrenfest’s theorem. *arXiv preprint arXiv:2106.10787*, 2021.
- [31] S Sahoo, S C Mukherjee, and H R J Walters. Ionization of atomic hydrogen and  $\text{He}^+$  by slow antiprotons. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(16):3227–3237, jul 2004.
- [32] Mohsen Emami-Razavi and Jurij W Darewych. Review of experimental and theoretical research on positronium ions and molecules. *The European Physical Journal D*, 75(6):1–29, 2021.
- [33] Paul Indelicato. Exotic atoms. *Physica Scripta*, T112(1):20, 2004.
- [34] Edward A G Armour. Muon, positron and antiproton interactions with atoms and molecules. *Journal of Physics: Conference Series*, 225:012002, apr 2010.
- [35] J. Lu, E. Y. Sidky, Z. Roller-Lutz, and H. O. Lutz. Antihydrogen formation by collisions of antiprotons with positronium in a magnetic field. *Phys. Rev. A*, 68:024702, Aug 2003.
- [36] Dario Bressanini. Internal structure of the positronium ion  $\text{Ps}^-$ . *Phys. Rev. A*, 104:022819, Aug 2021.
- [37] J Hofierka, B Cunningham, CM Rawlins, CH Patterson, and DG Green. Many-body theory of positron binding in polyatomic molecules. *arXiv preprint arXiv:2105.06959*, 2021.