



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
DOCTORADO EN CIENCIAS (FÍSICA)

ESTUDIO DEL PROCESO DE CAPTURA ELECTRÓNICA ASISTIDA POR UN
PULSO LÁSER ULTRA-RÁPIDO E INTENSO EN COLISIONES IÓN-ÁTOMO.

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
FRANCISCO JAVIER DOMÍNGUEZ GUTIÉRREZ

TUTOR PRINCIPAL
Dr. REMIGIO CABRERA TRUJILLO, INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS.

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
Dr. ANTONIO M. JUÁREZ REYES, INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS.
Dr. MANUEL TORRES LABANSAT, INSTITUTO DE FÍSICA.

MÉXICO, D. F. ENERO 2015.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

ESTUDIO DEL PROCESO DE CAPTURA ELECTRÓNICA ASISTIDA POR UN
PULSO LÁSER ULTRA-RÁPIDO E INTENSO EN COLISIONES IÓN-ÁTOMO.

Por

FRANCISCO JAVIER DOMÍNGUEZ-GUTIÉRREZ.

Comite tutorial:

Dr. Antonio M. Juárez Reyes
Miembro comite
ICF-UNAM

Dr. Remigio Cabrera Trujillo
Tutor principal
ICF-UNAM

Dr. Manuel Torres Labansat
Miembro comite
IFUNAM

Jurado:

Dr. Carlos F. Bunge M.
IFUNAM
Dr. Guillermo Hinojosa A.
ICF-UNAM

Dr. Predrag S. Krstic
Stony Brook University

Dr. Ricardo Méndez F.
FC-UNAM
Dr. Alejandro Crespo S.
IFUNAM

Tesis presentada para

Obtener el grado de Doctor en Ciencias (Física) del
Posgrado en Ciencias Físicas realizado en el
Instituto de Ciencias Físicas de la
Universidad Nacional Autónoma de México, 2015

Ciudad de México, México

There is no conflict between the ideal of religion and the ideal of science, but science is opposed to theological dogmas because science is founded on fact. To me, the universe is simply a great machine which never came into being and never will end. The human being is no exception to the natural order. Man, like the universe, is a machine. Nothing enters our minds or determines our actions which is not directly or indirectly a response to stimuli beating upon our sense organs from without.

Nikola Tesla.

Agradecimientos

Agradezco sinceramente a mi asesor, Dr. Remigio Cabrera Trujillo, su esfuerzo y dedicación. Sus conocimientos, orientaciones, su paciencia y la motivación para realizar mis estudios de doctorado. Él ha inculcado en mí un sentido de seriedad, responsabilidad y rigor académico sin los cuales no podría tener una formación completa como doctor en ciencias (Física). Por impulsarme a realizar una estancia de investigación en la Universidad de Stony Brook, NY, USA.

Al Dr. Predrag S. Krstić de la Universidad de Stony Brook, por la orientación y ayuda que me brindó durante mi estancia de investigación en New York, por su apoyo y amistad que me permitieron aprender física y mucho más que lo estudiado en horas de trabajo.

Al Dr. Robert J. Harrison del Institute for Advanced Computational Science (IACS), por su ayuda y amistad durante mi estancia en New York y las horas de discusión sobre MADNESS.

A mis amigos de Stony Brook University, Andrew Vackel, Michael Inghima, Scott Thornton, Samyam Rajbhandari y Bryan Sundahl. Por su amistad y grandes momentos de diversión que pasamos juntos.

A mi comité tutorial, Dr. Manuel Torres y Dr. Antonio Juárez por su apoyo y amistad.

A mis sinodales: Dr. Predrag S. Krstić, Dr. Carlos F. Bunge, Dr. Guillermo Hinojosa, Dr. Ricardo Méndez y Dr. Alejandro Crespo, por las correcciones de mi tesis, orientaciones y discusiones sobre mi trabajo.

Finalmente, quiero agradecer a CONACyT por la beca de doctorado otorgada durante estos cuatro años de estudios de doctorado (No. CVU: 267898). También al apoyo financiero otorgado por la beca-mixta de CONACyT y PAPIIT IN-110-714 para realizar mi estancia de investigación en la Universidad de Stony Brook, NY, USA.

Índice general

| | |
|---|-----------|
| Índice de tablas | VI |
| Índice de figuras | VII |
| 1. Introducción | 1 |
| 2. Coeficientes de transmisión y reflexión asistidos por láser | 4 |
| 2.1. Teoría | 5 |
| 2.1.1. Método implícito de Crank-Nicolson | 5 |
| 2.1.2. Implementación y condiciones iniciales | 7 |
| 2.2. Resultados | 8 |
| 2.2.1. Pozo de potencial cuadrado | 8 |
| 2.2.2. Pozo de potencial armónico y doble armónico truncados | 10 |
| 2.2.3. Pozo de potencial medio círculo y triangular | 13 |
| 2.3. Conclusiones | 14 |
| 3. Efecto de un pulso láser en los procesos de captura electrónica y excitación en colisiones ión-átomo. | 15 |
| 3.1. Teoría | 15 |
| 3.1.1. Estudio numérico del átomo de Hidrógeno. | 17 |
| 3.1.2. Método numérico para sistemas de colisión ión-átomo con láser | 18 |
| 3.2. Sistema de colisión simétrico $H^+ + H(1s) \rightarrow H(n = 1, 2) + H^+(n = 2)$ | 22 |
| 3.2.1. Análisis para el caso sin láser | 23 |
| 3.2.2. Resultados para el caso con la asistencia del pulso láser | 25 |
| 3.3. Sistema de colisión $He^{2+} + H(1s) \rightarrow He^+(n = 2, 3) + H^+$ | 28 |
| 3.3.1. Resultados para el caso sin láser a 250 eV | 29 |
| 3.3.2. Efectos de la duración de un pulso láser en el proceso de captura electrónica | 30 |
| 3.4. Análisis de los procesos de captura electrónica y excitación del sistema $Li^+ + H(1s)$ con láser | 32 |
| 3.4.1. Método de Hartree-Fock | 32 |
| 3.4.2. Efectos de la longitud de onda en los procesos de captura electrónica y excitación | 34 |
| 3.5. Modelo cualitativo | 39 |
| 4. Conclusiones generales | 41 |
| A. <i>MADNESS</i> Ambiente numérico de multiresolución adaptativa para simulación científica | 42 |
| A.1. Teoría | 42 |
| A.2. Estudio numérico del sistema $H^+ + H(1s)$ con trayectorias clásicas para el proyectil | 45 |
| Bibliografía | 48 |

Índice de tablas

| | |
|---|----|
| 3.1. Valores de energía $E_{n,l}$ (eV) y valores de expectación $\langle r \rangle$ y $\langle 1/r \rangle$ (u. a.) para el átomo de hidrógeno. Estos fueron obtenidos mediante la solución numérica de la ESIT para los estados de excitación $n = 1, 2$ y 3 . Los resultados son comparados con resultados exactos ($\langle r \rangle^* = [3n^2 - l(l+1)]/2$, $\langle 1/r \rangle^* = 1/n^2$ y $E^* = -13.606/n^2$) | 18 |
| 3.2. Conversión entre energías en keV y la velocidad del ión en unidades atómicas. | 22 |
| 3.3. Valores de las energías (eV) de los estados estacionarios $n = 2$ y 3 del átomo de litio. Los resultados son obtenidos usando el método de Hartree-Fock y comparados con los resultados teóricos de Pindzola [18] y los valores reportados por la base de datos de NIST [63]. | 33 |
| A.1. Sección eficaz de captura electrónica y excitación de los estados $n = 1, 2, 3$ (en unidades de 10^{-16} cm ²) obtenidos por MADNESS a una energía de 25 keV [78]. Estos resultados son comparados por los resultados numéricos obtenidos por medio del método de diferencias finitas, teóricos de Winter [42], así como con mediciones experimentales de Morgan et al. [47] para los estados $n = 2$, de Hughes et al. [76] para los estados $3s$ y con la sección eficaz total de Melchert et al [77] | 47 |

Índice de figuras

| | | |
|------|--|----|
| 2.1. | 2.1(I) Elección del valor de σ para obtener una buena aproximación de los resultados numéricos con los exactos. 2.1(II) Resultados numéricos obtenidos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción del pozo de potencial cuadrado en función de E/V_0 . Para el caso con láser considero las tres intensidades ($I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm ²), haciendo un promedio sobre la fase (RCLP). Observo que el coeficiente de absorción es diferente a cero únicamente para el caso con láser. | 11 |
| 2.2. | Reporto los resultados numéricos obtenidos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción del pozo de potencial de forma armónico truncado (Fig. 2.2(I)) y de doble armónico truncado (Fig. 2.2(II)) en función de E/V_0 . Para el caso con láser considero tres intensidades ($I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm ²), haciendo un promedio sobre la fase (RCLP). En ambas figuras, observo que el coeficiente de absorción es diferente a cero únicamente para el caso con láser. | 12 |
| 2.3. | Reporto los resultados numéricos obtenidos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción del pozo de potencial de forma medio círculo (Fig. 2.3(I)) y triangular (Fig. 2.3(II)) en función de E/V_0 , para el caso con láser considero tres intensidades ($I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm ²), hago un promedio sobre la fase (RCLP). En ambas figuras, observo que el coeficiente de absorción es diferente a cero únicamente para el caso con láser. | 13 |
| 3.1. | Reporto los resultados numéricos obtenidos para los estados s , p y d (\square) por medio del método de diferencias finitas, comparando con las soluciones analíticas (línea continua) [33, 39]. En la Fig. 3.1(I) muestro los resultados para los estados $1s$, $2s$ y $3s$ para mejor visualización de los estados esféricos del átomo de hidrógeno, mientras que en la Fig. 3.1(II) muestro los estados $2p$, $3p$ y $3d$ para visualizar los nodos asociados con dicho estados. | 17 |
| 3.2. | Proyección de la función de onda total promediado en la variable z , para ejemplificar la elección de la caja numérica \mathcal{V} del cálculo de la probabilidad de captura electrónica o excitación . . . | 21 |
| 3.3. | Fig. 3.3(I) sección eficaz de captura electrónica total en el intervalo de energías de colisión 1 – 25 keV. Los resultados son comparados con resultados teóricos de Lüdde et al. [41] y Winter [42], también con mediciones experimentales de Gealy et al. [43] y McClure et al. [44]. En la Fig. 3.3(II) comparo los resultados numéricos obtenidos para la probabilidad de captura electrónica (a) y excitación (b)) con los resultados teóricos reportados por el método LTDSE de Kolakowska et al. [45] para los estados $n = 2$ en función del parámetro de impacto a 10 keV de energía de colisión. | 23 |
| 3.4. | Fig. 3.4(I) reporto la sección eficaz de captura electrónica (superior) y excitación (inferior) para el intervalo de energías 1-25 keV, comparo con resultados teóricos de Winter [42] y Fritsch et al. [46] y mediciones experimentales de Morgan et al. [47] y Barnett et al. [48]. En la Fig. 3.4(II) muestro la sección eficaz total de ionización obtenida por la ecuación 3.16 y comparo con resultados teóricos reportados por Winter [42] y Janev et al. [49], así como con mediciones experimentales de Shah et al. [50]. | 25 |
| 3.5. | En la Fig. 3.5(I) muestro la forma del pulso láser para $\tau = 25$ u.a. (1 fs), $\omega = 0.056$ u.a. (800 nm) a diferentes valores de RCLP en pasos de $n\pi$, donde $n = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5$. En la Fig. 3.5(II) reporto el efecto de la fase del pulso láser (RCLP) en la probabilidad de captura electrónica para los estados $n = 2$ a 10 keV en función del parámetro de impacto. | 26 |

| | | |
|-------|---|----|
| 3.6. | En la Fig. 3.6(I) y Fig. 3.6(II) muestro el efecto del pulso láser en la probabilidad de captura electrónica de los estados $2s$ y $2p$ del sistema $H^+ + H$, respectivamente. Como una guía para visualizar el efecto del pulso láser, incluyo los resultados para el caso sin láser de la Fig. 3.4(I). Comparando con mediciones experimentales de Morgan et al. [47], Bayfield [51] y Barnett et al. [48] concluyo que el efecto del pulso láser no es relevante en un experimento. | 27 |
| 3.7. | En la Fig. 3.7(I) y Fig. 3.7(II) muestro la probabilidad de captura electrónica $P(b)$ total y de los estados $n = 2$ y 3 multiplicada por el parámetro de impacto en función de b del sistema $He^{2+} + H$ a 250 eV/amu. Los resultados son comparados con resultados reportados por Stolterfoht et al. [54] (línea negra) y Fatima et al. [11] (línea roja) | 29 |
| 3.8. | En la Fig. 3.8(I) y Fig. 3.8(II) muestro la sección eficaz de captura electrónica total y de los estados $n = 2$ y 3 en función de la energía del proyectil del sistema $He^{2+} + H$ en el intervalo de energías $0.25 - 25$ keV/amu. Para el caso sin láser, los resultados son comparados con resultados teóricos de Minami et al. [55], Hoekstra et al. [56], Toshima [57] y Stolterfoht et al. [54], así como con mediciones experimentales de Havener et al. [58], Ćirić et al. [61], Shah et al. [59] y Nutt et al [60] | 31 |
| 3.9. | Probabilidad de captura electrónica total multiplicada por el parámetro de impacto b en función del mismo. En la Fig. 3.9(I) muestro el efecto de la fase para una longitud de onda de 80 nm, mientras que en la Fig. 3.9(II) comparo los resultados numéricos para el caso sin láser con los resultados del pulso láser promediados en la fase RCLP a una longitud de onda de 80 y 200 nm. También comparo con valores obtenidos por la aproximación eikonal reportado por Errea et al. [19] y por el método END de Cabrera-Trujillo et al. [20]. | 36 |
| 3.10. | Fig. 3.10(I) sección eficaz de captura electrónica total (σ_{Tot}) y suma de la sección eficaz de captura electrónica de los estados $n = 2$ y 3 ($\sum_n \phi_n$) en función de la energía del proyectil E_p . En esta misma figura comparo con resultados teóricos de Errea et al. [19] y Cabrera-Trujillo et al. [20], así como con resultados experimentales de Shah et al. [65]. Fig. 3.10(II) muestro los resultados del caso con láser para longitud de onda a 80 y 200 nm. | 37 |
| 3.11. | En la Fig. 3.11(I) reporto los efectos del pulso láser en el proceso de captura electrónica comparando los resultados de la asistencia del pulso láser para 80 y 200 nm con los obtenidos para el caso sin láser de la sección eficaz de captura electrónica de los estados $n = 2$ y 3 . Así como con los resultados teóricos de Errea et al. [19] y Cabrera-Trujillo et al. [20]. En la Fig. 3.11(II) comparo el efecto de la fase (RCLP) en el proceso de captura electrónica para las energías $1, 5$ y 10 keV/amu a 80 nm de longitud de onda. | 38 |
| 3.12. | En la Fig. 3.12(I) reporto los efectos del pulso láser en el proceso de excitación comparando los resultados de la asistencia del pulso láser para 80 y 200 nm con los obtenidos para el caso sin láser de la sección eficaz de captura electrónica de los estados $n = 2$. También comparo con los resultados teóricos de Errea et al. [19]. En la Fig. 3.12(II) muestro el efecto de la fase (RCLP) en el proceso de captura electrónica para las energías $1, 5$ y 10 keV/amu para una longitud de onda de 80 nm. | 39 |
| 3.13. | Resultados de la Ec. (3.26) mostrando la contribución del pulso láser para la sección eficaz de captura electrónica total, los cuales están promediados sobre la RCLP para los sistemas de colisión $Li^+ + H(1s)$ (frecuencia del láser) y $He^{2+} + H(1s)$ (ancho del pulso láser). | 40 |
| A.1. | Fig. A.1(I) comparo la trayectoria en línea recta con la trayectoria obtenida por solución numérica de las ecuaciones (A.10). Fig. A.1(II) muestro los efectos de la trayectoria del proyectil en la probabilidad de captura electrónica total a 1 keV. | 46 |

1 Introducción

I'm always looking, like a child, for the wonders I know
I'm going to find, maybe not every time, but every once
in a while.

— R. P. Feynman

El proceso de captura electrónica en colisiones de iones, como proyectiles, por un átomo de un electrón activo, como blanco, es un proceso importante para diagnosticar el plasma en Tokamaks [1]. Gracias a la implementación de novedosos métodos experimentales y al reciente desarrollo de láseres de femto-segundos en infra-rojo, la manipulación del proceso de captura electrónica puede ser posible y de este modo permitir el control de los procesos implicados en colisiones ión-átomo [2–4]. La espectroscopía de captura electrónica es una herramienta importante en el diagnóstico de plasmas en Tokamaks, la cual provee información de la temperatura del plasma y de la cantidad de impurezas (residuos de Hélio en algunos casos) dentro del reactor [5,6]. Con el objetivo de controlar el proceso de captura electrónica, se ha propuesto la asistencia de un láser en colisiones del tipo ión-átomo [7–11]. Así, con la posibilidad de controlar el proceso de captura electrónica, se pueden calcular coeficientes de emisión efectivos y tener un diagnóstico adecuado del plasma.

La asistencia de un láser en sistemas de colisión resonantes ha sido analizado por Ferrante et al. [12] usando el método de parámetro de impacto y la aproximación de dos estados, en especial para los sistemas $H^+ + H$ y $Rb^+ + Rb$. En dicho trabajo se discute el efecto del láser sobre el proceso de captura electrónica total, el cual resulta ser despreciable en los sistemas resonantes. También, el estudio numérico del sistema resonante $H^+ + H$ con la asistencia de un láser es investigado por Niederhausen et al. [10] reportando una fuerte dependencia entre la fase del pulso láser con polarización circular y el mecanismo del proceso de captura electrónica durante la colisión. Sin embargo, los efectos de la asistencia de un pulso láser en sistemas asimétricos (e.g. $He^{2+} + H$) ha tenido muy poca investigación. Un estudio numérico realizado por Kirchner [13] reporta que el pulso láser mejora el proceso de captura electrónica a bajas energías de colisión para el sistema $He^{2+} + H$, y el incremento de la probabilidad de captura electrónica tiene una dependencia con la fase inicial del pulso láser. Por tal motivo, uno de los propósitos del presente trabajo es estudiar los efectos de un pulso láser intenso y corto en el proceso de captura electrónica para sistemas simétricos y asimétricos, por medio del cálculo de la sección eficaz total de captura electrónica y de los principales estados de excitación del proyectil.

La generalización al estudio de sistemas de colisión más complejos (e.g. $\text{Li}^+ + \text{H}$) es motivado, en ésta tesis, por el experimento de litio Tokamak esférico (*Lithium Tokamak eXperiment (LTX)*), en el cual varios gramos de litio son evaporados dentro de su primera pared recubriéndola al 90 % y permitiendo un análisis a un régimen de bajo reciclaje [15], también, por el uso de litio en pruebas de pérdida de radiación en Tokamaks y al gran éxito de reducir la contaminación de plasmas después del recubrimiento de la pared por medio de boronización ¹ [17].

Desde el punto de vista teórico, la motivación para estudiar sistemas de colisión más complejos, se debe a que varios métodos han sido aplicados al estudio de las propiedades fundamentales de transporte de litio en plasmas, y a los procesos de captura electrónica y excitación del sistema $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ por varios autores [19–21].

Ésta tesis está desarrollada de la siguiente forma: en el capítulo 2, como primer avance en el estudio de sistemas de colisión asistidos por láser, considero el estudio de un sistema de colisión unidimensional, calculando la probabilidad de transmisión y reflexión para un paquete de ondas que colisiona con una impureza atractiva (e.g. punto cuántico, perturbación sobre una guía de onda, etc) en presencia de un pulso láser intenso ($I_0 = 10^{12} - 10^{14}$) W/cm², longitud de onda de 780 nm y ancho del pulso de 10 fs. Mi estudio está basado en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo por medio del método de Crank-Nicolson. La impureza atractiva es modelada por varias formas de pozos de potencial unidimensionales (cuadrado, armónico, triangular, circular y doble armónico). Encuentro una relación entre el aumento de la intensidad I_0 del pulso láser y la modificación de los coeficientes de transmisión y reflexión a bajas energías de colisión. Además el principal efecto del pulso láser en el sistema de colisión es el notorio aumento de la probabilidad de absorción por el pozo de potencial. En el capítulo 3 considero el estudio del efecto de la asistencia de un pulso láser intenso, corto y ultra-rápido en la dinámica de los siguientes sistemas de colisión

- 1.- $\text{H}^+ + \text{H}(1s) \rightarrow \text{H}(n = 1, 2) + \text{H}^+(n = 1, 2)$. Se calcula la sección eficaz de captura electrónica y excitación en función de la energía de colisión para el intervalo 1 – 25 keV. Para el caso sin láser, de éste sistema de colisión, comparo los resultados obtenidos de la sección eficaz total y de los estados $n = 2$ con resultados teóricos y experimentales reportados en la literatura, para ambos procesos, demostrando un buen acuerdo de mis resultados numéricos. Después, como método de aprendizaje, estudio el efecto de un pulso láser en los estados $n = 2$, debido a que el efecto Stark es nulo para el estado $n = 1$ y notorio para los estados $n = 2$ corroborando, con este análisis, los resultados teóricos encontrados en la literatura para este tipo de sistemas [12].

¹En Tokamaks, la boronización es la deposición de una capa de boro y carbono sobre la superficie interna del recipiente de vacío mediante una descarga luminiscente en un diborano, metano y helio [16].

- 2.- $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{He}^+(n = 2, 3) + \text{H}^+$. Se utiliza este sistema como una aplicación del método numérico, realizando un estudio del efecto de la duración de un pulso en el proceso de captura electrónica para el intervalo de energías de colisión de $0.25 - 10 \text{ keV/uma}$. Para el caso sin láser, aseguro la confiabilidad de los resultados numéricos obtenidos comparando la sección eficaz de captura electrónica total y de los estados $n = 2$ y 3 con mediciones experimentales y resultados teóricos reportados en la literatura. Para el caso con láser, realizo un análisis del incremento de la sección eficaz total y de dichos estados considerando algunos valores del ancho del pulso láser. Reporto que al incrementar dicho ancho, el proceso de captura electrónica es más eficiente.
- 3.- $\text{Li}^+ + \text{H}(1s) \rightarrow \text{Li}(n = 2, 3) + \text{H}^+(n = 2)$. Es estudiado, en el intervalo de energías de $1 - 25 \text{ keV/uma}$, mediante el uso de un pseudo potencial para el proyectil obtenido por el método de Hartree-Fock. Para éste sistema me intereso en el efecto de un pulso láser intenso y ultra-rápido en el ultra-violeta en los procesos de captura electrónica y excitación.

A partir de los resultados de mi investigación encuentro que el efecto del pulso láser (variación de la intensidad, ancho del pulso o longitud de onda) en colisiones ión-átomo es notorio a bajas energías de colisión, y se observa una relación entre el aumento de los parámetros del láser y la probabilidad de captura electrónica. Finalmente, las conclusiones sobre este trabajo y la descripción de futuras investigaciones son explicadas en el capítulo 4.

2 Coeficientes de transmisión y reflexión asistidos por láser

Both the man of science and the man of action live
always at the edge of mystery, surrounded by it.
— J. R. Oppenheimer

Actualmente es importante comprender la reciente tecnología en óptica y electrónica desde el punto de vista de la física fundamental, ya que diversas aplicaciones sobre la interacción de partículas con impurezas son de gran interés en los campos de la física aplicada. Por ejemplo, cuando una pequeña constricción es introducida en la trayectoria de varios electrones en un material, la conductancia (resistencia) es modificada [23]. Este sistema puede ser estudiado como la propagación de un paquete de ondas y su interacción con una impureza, el cual es un tema investigado desde los principios de la mecánica cuántica [22]. Un segundo ejemplo a considerar es la construcción de materiales complejos a partir de estructuras nanoelectrónicas. Estas estructuras tendrán puntos de contacto de tipo cuántico y debido a la colisión con dichos puntos o alguna otra impureza, el transporte electrónico es altamente modificado [24]. De este modo, si un electrón (partícula) colisiona con una impureza (puntos cuánticos) en una hetero-estructura unidimensional la densidad de estados y la propagación de ésta partícula realizará una variedad de nuevos efectos. Estos efectos han sido estudiados y comprendidos para mejorar las propiedades ópticas de materiales semiconductores por medio de la inducción de campos eléctricos ¹ [26]. El análisis de estos efectos son implementados en compuertas lógicas en computación cuántica.

En este capítulo estudio la propagación de una partícula modelada por un paquete de ondas Gaussiano y su interacción con una impureza atractiva (e.g. un punto cuántico, una perturbación dentro de una guía de onda, etc.) en presencia de un pulso láser ultra-rápido e intenso, con el propósito de controlar los procesos de transmisión y reflexión en modelos unidimensionales [27].

¹Un campo eléctrico aplicado a un semiconductor producirá una fuerza sobre los electrones y los agujeros de modo que estos experimenten una aceleración neta y movimiento neto, debido a que siempre hay estados de energía disponibles en la conducción y bandas de valencia de un semiconductor. Este movimiento neto de carga debido a un campo eléctrico se denomina deriva (efecto del campo) [25].

2.1. Teoría

Un cálculo mecánico-cuántico de la dinámica de un paquete de ondas que interactúa con una impureza requiere de varias aproximaciones del problema. En mi caso, la dinámica de la colisión es tratada desde el punto de vista de la mecánica cuántica y la asistencia del pulso láser es considerada semi-clásicamente dentro de la aproximación dipolar. Así, la función de onda del sistema debe satisfacer la siguiente ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (en unidades atómicas):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{1}{2m_p} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - \mathbf{E}_f(t) \cdot \hat{\mathbf{d}} \right] \Psi(x, t), \quad (2.1)$$

donde m_p es la masa de la partícula transportada en el sistema unidimensional, en mi caso es un electrón $m_p = m_e$, $V(x)$ es el pozo de potencial asociado a la impureza, y $\hat{\mathbf{d}} = -\hat{\mathbf{x}}$ es el operador de momento eléctrico dipolar. Para modelar el pulso láser, utilizo un pulso Gaussiano ultra-corto e intenso expresado como

$$\mathbf{E}_f(t) = \mathbf{E}_f e^{-(t/\tau)^2} \cos(\omega t + \phi), \quad (2.2)$$

donde \mathbf{E}_f es la amplitud del pulso, $\tau\sqrt{4\ln 2}$ define la intensidad a *Full-Width at Half-Maximum* (FWHM)², ω es la frecuencia del pulso y ϕ es la fase del pulso láser. La fase combina el máximo de la envolvente del pulso láser y el punto de máxima interacción entre la partícula y la impureza. Finalmente, para lograr una comprensión sobre diferentes formas de interacción entre una partícula y un punto cuántico, en mi investigación, considero diferentes formas de pozo de potencial (cuadrado, armónico, circular, doble armónico y triangular) las cuales serán definidas al momento de ser estudiadas.

2.1.1. Método implícito de Crank-Nicolson

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT) definida por la ec. 2.1 es resuelta numéricamente mediante el uso del método implícito de Crank-Nicolson en la aproximación de diferencias finitas [28]. Soluciones numéricas a la ESDT pueden ser encontradas para una energía dada. En el esquema del método

²El pulso láser definido por la ec. (2.2) describe un pulso de envolvente Gaussiana $f(t) = \exp[-(t/\tau)^2]$, con un comportamiento armónico, por lo que el *Full-Width at Half-Maximum* es obtenido encontrando el tiempo t_0 , el cual es el punto medio máximo, como :

$$e^{-(t_0/\tau)^2} = \frac{1}{2} f(t_{max}) \quad (2.3)$$

pero $f(t_{max})$ ocurre para $t_{max} = \mu$, donde μ es el promedio. Resolviendo la ec. (2.3) para t_0 , obtengo :

$$t_0 = \pm \tau \sqrt{\ln 2}, \quad (2.4)$$

definiendo a $\text{FWHM} = t_0^+ - t_0^-$, éste queda expresado como :

$$\text{FWHM} = \tau \sqrt{4 \ln 2}. \quad (2.5)$$

implicito de Crank-Nicolson, la función de onda $\Psi(x, t)$ es obtenida por evolución temporal de la función de onda inicial :

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-i\hat{H}\Delta t/\hbar\right) \Psi(x, t_0), \quad (2.6)$$

donde $\Psi(x, t_0)$ es la función de onda inicial, y $\exp\left(-i\hat{H}\Delta t/\hbar\right)$ es el operador unitario de evolución temporal. Entonces, escribiendo al operador Hamiltoniano como $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ y considerando el método de separación de operadores [29], se obtiene :

$$\exp\left(i\hat{T}\Delta t/2\hbar\right) \Psi(x, t) = \exp\left(-i\hat{T}\Delta t/2\hbar\right) f(x, t_0), \quad (2.7)$$

donde $f(x, t_0)$ está definido como :

$$f(x, t_0) = \exp\left(-i\hat{V}\Delta t/\hbar\right) \Psi(x, t_0). \quad (2.8)$$

Ahora, expandiendo a primer orden las funciones exponenciales, puede aplicarse el método de diferencias finitas en la función de onda como $\Psi(x_k, t_n) \rightarrow \Psi_k^n$, así como en las segundas derivadas del operador de energía cinética $2\hat{T} = -\partial^2/\partial x^2$. En esta aproximación, la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se reescribe como :

$$\{\Psi_k^{n+1} - \nu(\Psi_{k+1}^{n+1} - 2\Psi_k^{n+1} + \Psi_{k-1}^{n+1})\} = \{f_k^n + \nu(f_{k+1}^{n+1} - 2f_k^{n+1} + f_{k-1}^{n+1})\}, \quad (2.9)$$

donde $\nu = i\Delta t/(4\Delta x^2)$, y la función $f_k^n = \exp\left(-i\hat{V}_k\Delta t\right) \Psi_k^n$. La ecuación (2.9) puede ser escrita en forma matricial como :

$$\mathbf{A}^+ \vec{\Psi}^{n+1} = \mathbf{A}^- \vec{f}^n, \quad (2.10)$$

donde $\vec{\Psi}^{n+1}$ y \vec{f}^n son vectores columna :

$$\vec{\Psi}^n = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \Psi_n \end{pmatrix}; \quad \vec{f}^n = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

con \mathbf{A}^\pm matrices tri-diagonales con los siguientes elementos :

$$\begin{pmatrix} 1 \pm 2\nu & \mp\nu & 0 & \cdots & 0 \\ \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu & \cdots & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu \\ 0 & \cdots & 0 & \mp\nu & 1 \pm 2\nu \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

La matriz \mathbf{A}^\pm es una matriz constante para Δt y Δx fijos. Este método preserva la norma de la función de onda y debe cumplir la condición $|\nu| < 1$ por estabilidad del método al considerar tiempos de propagación bastante largos. Finalmente, las soluciones son obtenidas por el método de descomposición LU [30].

2.1.2. Implementación y condiciones iniciales

Se consideran electrones incidentes colisionando con una impureza atractiva en un intervalo de velocidades $v_p = 0.2 - 4.0$ u.a. en pasos de $\Delta v_p = 0.05$, las cuales, en problemas de conducción corresponden a energías de colisión de $0.5 - 220$ eV. Así, como primer paso de mi estudio, calculo los coeficientes de transmisión y reflexión para el caso sin láser del pozo de potencial cuadrado, ya que este problema tiene un solución exacta y puedo comparar mis resultados numéricos asegurando la confiabilidad de ellos. Después, podré comprender la interacción del paquete de ondas Gaussiano con otras formas de pozo de potencial a partir de mis resultados numéricos. Finalmente, comparando los resultados del análisis del efecto de la asistencia del pulso láser en la dinámica con los obtenidos del caso libre, demuestro que los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción son modificados a bajas energías por la asistencia del pulso láser.

Los parámetros del pulso láser son obtenidos a partir de valores representativos de un láser de Ti:Zafiro con una longitud de onda $\lambda = 780$ nm, que corresponde a una frecuencia de $\omega = 0.057$ u.a. Considero tres valores para la intensidad del pulso laser, los cuales son: $I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm² que corresponde a una amplitud de campo eléctrico de $\mathbf{E}_f = 0.01$, $\mathbf{E}_f = 0.03$ y $\mathbf{E}_f = 0.1$ u.a., respectivamente. El ancho del pulso es elegido a 10 fs. en el cual la dinámica es conmensurada en el tiempo de colisión. En este estudio, vario la fase del pulso de $\phi = 0 \rightarrow \pi$ en pasos de $\pi/4$. Los parámetros del pulso láser son elegidos debido al tiempo de colisión y a que la intensidad del pulso compite con el tamaño de la impureza, por lo que mis calculos estan fuera del régimen perturbativo. La posición de la partícula incidente comienza a una distancia en la cual el pulso láser es despreciable. Por lo que, he elegido a $|\mathbf{E}_f|$ como el 1% del valor máximo del pulso, esto implica que $|\mathbf{E}(t_{min})/\mathbf{E}_f = 0.01$, con $t_{min} = 1000$ u.a. y como la partícula

está ubicada en $x_0 = -vt_{min}$ de la impureza, la distancia máxima donde la partícula puede empezar su trayectoria es $x_0 = 4000$ u.a., correspondiente a una velocidad inicial de $v = 4.0$ u.a. Estas suposiciones definen la caja numérica a utilizar como $[-4000, 4000]$ u.a. con un incremento uniforme de $\Delta x = 0.2$ u.a. El incremento en el tiempo es $\Delta t = 0.05$ u.a. por estabilidad del método numérico.

2.2. Resultados

Como se mencionó en la implementación del método numérico, comenzaré mi investigación resolviendo el pozo de potencial cuadrado para comparar mis resultados numéricos con los resultados exactos para este potencial. Después, aplicaré el proceso computacional al estudio del efecto de diferentes formas de pozo de potencial en los coeficientes de transmisión y reflexión, así como al análisis de la asistencia del pulso láser en la dinámica de la colisión.

2.2.1. Pozo de potencial cuadrado

El pozo de potencial cuadrado está definido por :

$$V_s(x) = \begin{cases} -V_0 & , |x| \leq R_0, \\ 0 & , |x| > R_0, \end{cases} \quad (2.13)$$

donde R_0 es el tamaño de la impureza y $V_0 > 0$ es la profundidad del pozo de potencial. Este potencial representa una partícula que tiene un punto de interacción en $x = \pm R_0$, y la fuerza asociada a este potencial es $f(x) = \pm V_0 \delta(x \pm R_0)$ el cual dice que la partícula se moverá con mayor velocidad dentro del pozo de potencial cuadrado. El ancho del potencial es elegido como $R_0 = 5.0$ u.a. con una profundidad de pozo de $V_0 = 1.0$ u.a. los cuales son valores típicos de una impureza en una guía de onda. Estos valores son utilizados para las demás formas de pozo de potencial.

Para el caso sin láser, en la literatura se reporta la obtención de los coeficientes de transmisión y reflexión de forma numérica y analítica por Goldberg et al. [31] y Pérez-Prieto et al. [32], respectivamente. En mi caso, el coeficiente de reflexión \mathcal{R} es calculado considerando el intervalo $[x_{min}, x = -R_0]$ como :

$$\mathcal{R} = \int_{-\infty}^{-R_0} |\Psi(x)|^2 dx \simeq \sum_{i=0}^k |\Psi_i|^2 \Delta x. \quad (2.14)$$

La suma es llevada hasta el valor del entero k que corresponde al índice que define $x_k = -R_0$ en la discretización numérica. Similarmente, calculo el coeficiente de transmisión \mathcal{T} como la probabilidad de encontrar a

la partícula en el intervalo $[R_0, x_{max}]$ del potencial, i.e.

$$\mathcal{T} = \int_{R_0}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx \simeq \sum_{i=j}^N |\Psi_i|^2 \Delta x, \quad (2.15)$$

la suma empieza en el índice de la discretización j que corresponde a $x_j = R_0$. Finalmente, considerando la conservación de flujo de partículas puedo obtener la probabilidad de absorción en la impureza como $\mathcal{A} = 1 - \mathcal{T} - \mathcal{R}$.

La solución exacta del pozo de potencial cuadrado puede ser encontrada en libros de mecánica cuántica [33, 34]. Así, para el caso de una onda plana, los coeficientes de transmisión y reflexión tienen la siguiente solución exacta :

$$\mathcal{T} = \frac{4\epsilon(\epsilon + 1)}{4\epsilon(\epsilon + 1) + \sin^2(2\beta\sqrt{\epsilon + 1})}, \quad \mathcal{R} = 1 - \mathcal{T}, \quad (2.16)$$

donde

$$\beta = \sqrt{2m_p V_0 R_0^2}, \quad \epsilon = E/V_0, \quad (2.17)$$

y E es la energía cinética de la partícula incidente. En general, para el caso $E < V_0$ la velocidad de la partícula se incrementa dentro del pozo. Así, modelando la partícula como un paquete de ondas Gaussiano

$$\Psi(x) = \frac{1}{(\pi\sigma)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma} - ip(x - x_0)\right), \quad (2.18)$$

donde x_0 es la posición del centro del paquete de onda, σ es el ancho del paquete y $p = \sqrt{2m_p E}$ es el momento asociado al paquete de ondas con una energía de colisión, E . A partir de las soluciones exactas, los estados con energías ligadas para el pozo de potencial cuadrado están definidos por las siguientes expresiones, para soluciones impares :

$$\cot\left(\beta\sqrt{1 + \frac{E_n}{V_0}}\right) = \sqrt{\frac{-E_n/V_0}{1 + E_n/V_0}}, \quad (2.19)$$

y para soluciones pares :

$$\tan\left(\beta\sqrt{1 + \frac{E_n}{V_0}}\right) = \sqrt{\frac{-E_n/V_0}{1 + E_n/V_0}}, \quad (2.20)$$

donde $E_n < 0$ son los eigen-valores de las energías del pozo de potencial cuadrado. Nótese que siempre existe al menos un estado ligado sin importar lo pequeño que sea V_0 . En mi caso, para $V_0 = 1$ u. a. y $R_0 = 5$ u. a. encuentro tres estados ligados, dos simétricos y un asimétrico. La energía del estado base es $E_0 = -0.9328$ u. a., el primer estado excitado es $E_1 = -0.7275$ u. a. y el estado de mayor energía es $E_2 = -0.3651$ u.a.

En la Fig. 2.1(I) comparo mis resultados numéricos con la solución exacta observando que para un valor

de $\sigma = 50$ la función de onda puede ser tratada como una onda plana, ya que al expresar el paquete de onda en el espacio de momentos, por medio de una transformación tipo Fourier se tiene una forma Gaussiana pero de un ancho menor [33,34]. En la Fig 2.1(II) reporto los resultados numéricos obtenidos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción en función de la energía E/V_0 para el pozo de potencial cuadrado. Como es bien conocido, los coeficientes de transmisión y reflexión oscilan en función de la energía de la partícula. Así, el máximo de las oscilaciones está en $2\beta\sqrt{\epsilon_m + 1} = n\pi$ de acuerdo con el argumento de la ecuación 2.16. Por lo tanto, la resonancia en la transmisión ocurre cuando la longitud de onda de de-Broglie, asociada a la partícula incidente, coincide con el valor entero de la longitud de onda asociada al pozo de potencial cuadrado.

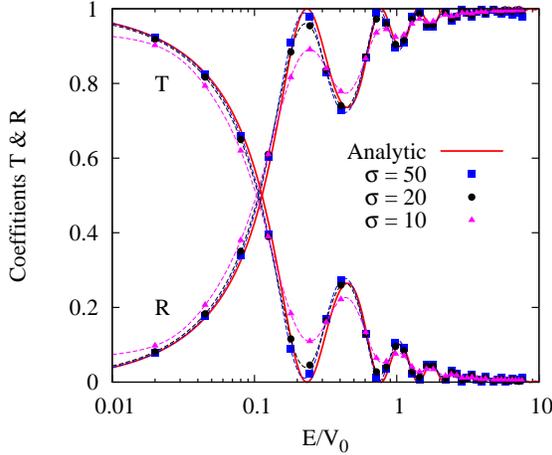
Para el caso con láser, en la figura 2.1(II) muestro los resultados para los tres valores de la intensidad del pulso láser, $I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm² realizando un promedio sobre la fase (RCLP) en un intervalo de $0 - \pi$ en pasos de $\pi/4$, y estos resultados son comparados con el caso sin láser para hacer notar el efecto del pulso láser en la colisión. En general, el mayor efecto del láser sobre la colisión es obtenido para energías de colisión $E \leq V_0$, para bajas energías de colisión los coeficientes de transmisión disminuyen, y la probabilidad de absorción debida al pozo de potencial aumenta, mientras que, para altas energías los coeficientes de transmisión y reflexión para los tres valores de la intensidad del pulso láser tienen un comportamiento similar. Este es un efecto importante debido a la asistencia del pulso láser en la dinámica. También existe una relación entre la disminución de la energía de colisión de la partícula incidente, E , con la disminución de los coeficientes de transmisión, así como con el aumento de los coeficientes de reflexión y la probabilidad de absorción.

2.2.2. Pozo de potencial armónico y doble armónico truncados

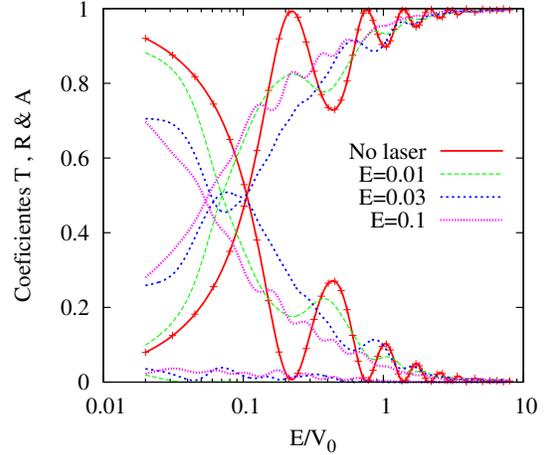
Un pozo de potencial de forma armónica truncada puede ser utilizado como una trampa para la partícula transportada, el cual está definido de la siguiente manera

$$V_h(x) = \begin{cases} V_0 \left[\left(\frac{x}{R_0} \right)^2 - 1 \right] & , |x| \leq R_0, \\ 0 & , |x| > R_0, \end{cases} \quad (2.21)$$

modelando una impureza que realiza una fuerza tipo Hooke $f(x) = -2V_0x/R_0$ a la partícula incidente dentro del pozo (movimiento armónico con frecuencia $\omega = \sqrt{2V_0/m_p R_0^2}$). En la Fig. 2.2(I) muestro los resultados numéricos obtenidos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción en función del factor E/V_0 para el pozo de potencial de forma armónica truncada. Al igual que en el estudio del pozo de potencial cuadrado, para el caso con láser, reporto mis resultados promediando estos sobre la fase (RCLP). Para el caso sin láser,



(I) Elección de σ para el paquete de onda



(II) Pozo de potencial cuadrado

Figura 2.1: 2.1(I) Elección del valor de σ para obtener una buena aproximación de los resultados numéricos con los exactos. 2.1(II) Resultados numéricos obtenidos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción del pozo de potencial cuadrado en función de E/V_0 . Para el caso con láser considero las tres intensidades ($I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm²), haciendo un promedio sobre la fase (RCLP). Observo que el coeficiente de absorción es diferente a cero únicamente para el caso con láser.

el máximo de los coeficientes de transmisión es a $E/V_0 \sim 0.5$, mientras que para altas energías de colisión la transmisión es total. En presencia del pulso láser a una intensidad baja $I_0 = 3.5 \times 10^{12}$ W/cm² ($E_0 = 0.01$ u.a.), el efecto sobre el proceso de transmisión a energías de colisión $E < 0.07V_0$ es mayor respecto a todo el intervalo de energías y para energías entre $0.07V_0$ y $0.1V_0$ el efecto del pulso láser es nulo. Debido a la asistencia del pulso láser en la dinámica, el efecto más notorio es el aumento de la probabilidad de absorción para energías de colisión $E \sim 0.05V_0$ al 5% del valor más bajo para la intensidad del pulso láser. A una intensidad de pulso láser de $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ W/cm² ($E_0 = 0.03$ u.a.) la probabilidad de transmisión de la partícula incidente mejora a energías menores de $0.2V_0$ respecto al caso sin láser. Sin embargo, para ésta intensidad de pulso láser, la probabilidad de absorción es la más baja. Finalmente, para energías de colisión altas el efecto del pulso láser es nulo.

Continuando mi estudio, considero una partícula (electrón) colisionando con una forma de pozo de potencial doble armónica truncada definida por la siguiente función :

$$V_{2h}(x) = \begin{cases} 4V_0 \left(\left(\frac{x}{R_0} \right)^2 + \frac{x}{R_0} \right) & , -R_0 \leq x < 0, \\ 4V_0 \left(\left(\frac{x}{R_0} \right)^2 - \frac{x}{R_0} \right) & , 0 \leq x \leq R_0, \\ 0 & , |x| > R_0, \end{cases} \quad (2.22)$$

la cual representa una partícula atrapada de manera armónica y simétrica en ambos lados del centro de la

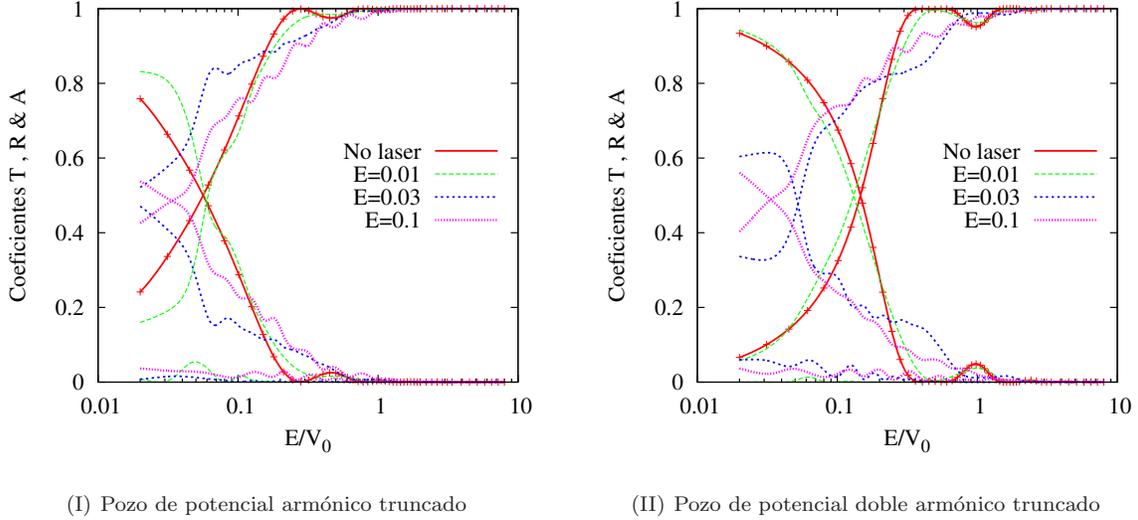


Figura 2.2: Reporto los resultados numéricos obtenidos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción del pozo de potencial de forma armónico truncado (Fig. 2.2(I)) y de doble armónico truncado (Fig. 2.2(II)) en función de E/V_0 . Para el caso con láser considero tres intensidades ($I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm²), haciendo un promedio sobre la fase (RCLP). En ambas figuras, observo que el coeficiente de absorción es diferente a cero únicamente para el caso con láser.

impureza. Así, en la Fig. 2.2(II) reporto mis resultados numéricos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción en función de la energía E/V_0 . Para el caso sin láser, un punto importante a notar es que el pozo de potencial doble armónico truncado no presenta un comportamiento sinusoidal en los coeficientes de transmisión, tal como se mostró para las formas cuadrática y armónica. En su lugar la gráfica presenta un valle para energías de colisión entre $0.3V_0$ y $0.7V_0$, donde la probabilidad de reflexión es nula.

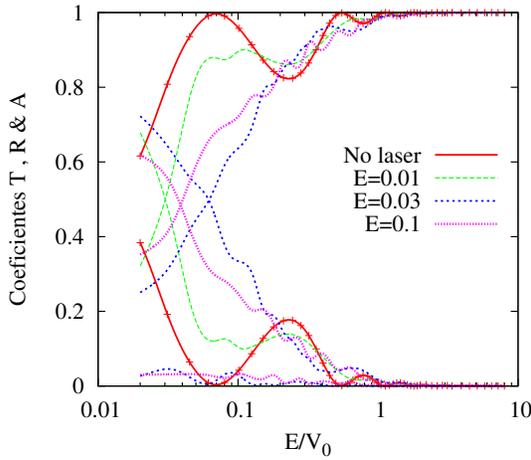
Para el caso con láser, los resultados de la probabilidad de transmisión y reflexión a una intensidad $I_0 = 3.5 \times 10^{12}$ W/cm² tiene un comportamiento similar a los resultados sin láser. Sin embargo, cuando incremento la intensidad del pulso láser, el comportamiento de los coeficientes de transmisión y reflexión tienen un cambio abrupto. También la probabilidad de absorción es de un 8% para energías menores a $E = 0.2V_0$ u.a. Finalmente, al comparar la probabilidad de reflexión para distintos valores de intensidad de pulso láser, los resultados a una intensidad de $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm² es menor respecto a una intensidad de pulso láser de $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ W/cm². La probabilidad de absorción es menor respecto a los resultados presentados para las formas cuadrática y armónica truncadas.

2.2.3. Pozo de potencial medio círculo y triangular

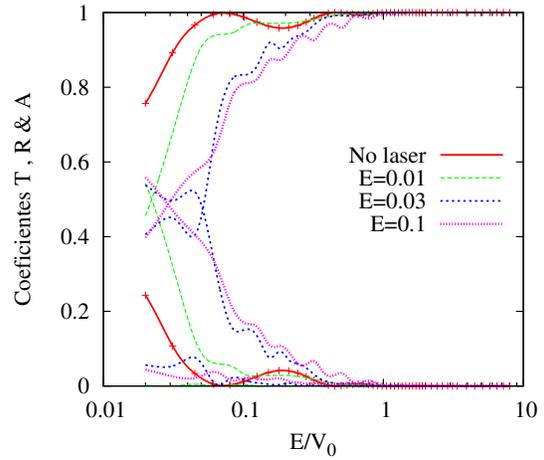
Considero ahora, el caso del pozo de potencial circular, el cual se define como :

$$V_c(x) = \begin{cases} -V_0 \sqrt{1 - \left(\frac{x}{R_0}\right)^2} & , |x| < R_0, \\ 0 & , |x| > R_0. \end{cases} \quad (2.23)$$

Al igual que el pozo de potencial cuadrado, R_0 es el tamaño de la impureza y $V_0 > 0$ es la profundidad del pozo de potencial. En la Fig. 2.3(I) reporto los resultados para el caso sin láser y para las intensidades del pulso láser $I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm². En el caso sin láser noto que el comportamiento oscilatorio tiene su primer máximo en la probabilidad de transmisión a una energía de colisión $E \sim 0.07V_0$ la cual es menor a la probabilidad de transmisión de las formas de pozo de potencial anteriores. Para el caso con láser, los resultados de la probabilidad de transmisión para la intensidad más baja de pulso láser es menor respecto al caso sin láser y los máximos de los coeficientes de transmisión son muy cercanos. A una intensidad de pulso láser intermedia los coeficientes de transmisión y reflexión son menores que los resultados de una intensidad alta y los obtenidos del caso sin láser, esto a un intervalo de energías de colisión bajas. Para esta forma de pozo de potencial la probabilidad de absorción es cercano al 5% a energías de colisión menores a $0.2V_0$.



(I) Pozo de potencial medio círculo



(II) Pozo de potencial triangular

Figura 2.3: Reporto los resultados numéricos obtenidos de los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción del pozo de potencial de forma medio círculo (Fig. 2.3(I)) y triangular (Fig. 2.3(II)) en función de E/V_0 , para el caso con láser considero tres intensidades ($I_0 = 3.5 \times 10^{12}$, $I_0 = 3.5 \times 10^{13}$ y $I_0 = 3.5 \times 10^{14}$ W/cm²), hago un promedio sobre la fase (RCLP). En ambas figuras, observo que el coeficiente de absorción es diferente a cero únicamente para el caso con láser.

Un último caso a considerar es la forma de pozo de potencial triangular truncado definida por :

$$V_t(x) = \begin{cases} -V_0 \left(\frac{x}{R_0} + 1 \right) & , -R_0 < x < 0, \\ V_0 \left(\frac{x}{R_0} - 1 \right) & , 0 < x < R_0, \\ 0 & , |x| > R_0, \end{cases} \quad (2.24)$$

el cual es un pozo de potencial que ejerce una aceleración constante sobre la partícula incidente cuando interactúa con la primera sección del pozo de potencial y después la partícula desacelera recuperando su velocidad inicial al final del pozo de potencial. En la Fig. 2.3(II) reporto los resultados numéricos obtenidos para los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción en función de la energía E/V_0 para los casos sin láser y con la asistencia de un pulso láser. Los resultados en ausencia del pulso láser son mayores respecto al pozo de potencial cuadrado para energías de colisión bajas. Para el caso con láser, observo que la probabilidad de transmisión disminuye y la probabilidad de reflexión aumenta para las tres intensidades consideradas en este trabajo. En especial para energías de colisión menores a $E = 0.1V_0$, noto que la probabilidad de absorción aumenta como función de la intensidad del pulso láser.

2.3. Conclusiones

En este trabajo, calculé los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción de un paquete de ondas que representan una partícula (en mi caso un electrón) colisionando con una impureza, la cual es modelada por cinco diferentes formas de pozo de potencial. Así, la asistencia de un pulso láser ultra-corto es considerada a diferentes intensidades y es sincronizada con la dinámica de la colisión. Encontré que la forma del potencial tiene un efecto notable en la probabilidad de transmisión y reflexión para el caso sin láser. En comparación, el efecto del pulso láser incrementa o disminuye la probabilidad de transmisión y reflexión para bajas energías de colisión. También, por efecto de la asistencia del pulso láser en la dinámica, la probabilidad de absorción de partículas aumenta debido a las cinco formas de potencial en al menos un 5%. En especial, al estudiar los efectos del pulso láser en el intervalo de energías bajas, se observa que éste efecto, en la probabilidad de absorción, es mayor para las formas de pozo de potencial triangular y circular.

3 Efecto de un pulso láser en los procesos de captura electrónica y excitación en colisiones ión-átomo.

The distant part of the sky always seems clearest, so
that I shall always strive to reach it.

— N. Watsuki

En éste capítulo, comienzo con la solución numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (ESIT) para el átomo de hidrógeno. Los resultados numéricos obtenidos son reportados mediante el cálculo de variables observables y comparados con resultados exactos. Después, el procedimiento numérico utilizado en el capítulo anterior es generalizado a tres dimensiones para ser aplicado al estudio de colisiones ión-átomo, también, para comprender el efecto de un pulso láser en sistemas de colisión ión-átomo a un intervalo de energías de colisión intermedias. Por medio de la solución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT) utilizando el método implícito de Crank-Nicolson en la aproximación de diferencias finitas, y como una prueba de la generalización del procedimiento numérico, considero el estudio del sistema de colisión $H^+ + H(1s)$, para después aplicar éste método numérico al análisis de los sistemas $He^{2+} + H(1s)$ y $Li^+ + H(1s)$. En el caso sin láser, cálculo la sección eficaz total y los principales estados de excitación en función de la energía de colisión, comparando los resultados obtenidos con los teóricos y experimentales reportados en la literatura. Para el caso con láser me intereso en el efecto de la variación de los parámetros de un pulso láser intenso y ultra-rápido en los procesos de captura electrónica y excitación con el fin de obtener una mejora en estos procesos. En este capítulo se utilizan unidades atómicas para los cálculos numéricos, a excepción que se especifiquen las unidades físicas.

3.1. Teoría

El estudio de átomos hidrogenóides ha sido realizado por varios autores, encontrando soluciones exactas del Hamiltoniano para describirlos en diferentes sistemas coordenados tales como esféricos, prolatos, toroidales, etc [35–38]. En este trabajo, propongo como solución completa de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (ESIT) de un átomo hidrogenóide a la función $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \phi)$ donde $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ son los armónicos esféricos del momento angular orbital l y número cuántico magnético m . Así, al considerar una solución numérica a la ESIT en coordenadas esféricas y obtenidas por medio del

siguiente Hamiltoniano :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m_e} + \frac{l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{Z}{r}, \quad (3.1)$$

donde el primer término es la energía cinética del electrón, el segundo término es la parte asociada al momento angular, y el último es el potencial de interacción entre el electrón y el núcleo. Para una solución en coordenadas esféricas, el término $l(l+1)$ es el eigen-valor del operador \hat{L}^2 correspondiente a la parte angular θ y ϕ [33]. Ahora, considerando el cambio de variable para la parte radial $rR_{n,l}(r) = U_{n,l}(r)$, la función $U_{n,l}(r)$ satisface la siguiente ecuación diferencial radial :

$$\left\{ -\frac{1}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{Z}{r} \right\} U_{n,l}(r) = E_n U_{n,l}(r). \quad (3.2)$$

Para resolver esta ecuación por medio del método de diferencias finitas, discretizo la función $U_{n,l}(r)$ y su segunda derivada en una red numérica uniforme como $U_{n,l}(r) \rightarrow U_k$, siempre que $r \rightarrow r_k$ en una red numérica de espaciamiento uniforme Δr . Tomando en cuenta que U_k son elementos de un vector N -dimensional :

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

y re-escribiendo a la ecuación (3.2) como un problema de eigen-valores $\mathbb{B}U = E_n U$, donde la matriz \mathbb{B} tiene los siguientes elementos :

$$\begin{pmatrix} 2B + V_{\text{eff}_1} & -B & 0 & \dots & 0 \\ -B & 2B + V_{\text{eff}_2} & -B & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -B & 2B + V_{\text{eff}_N} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Donde $B = 1/2\Delta r^2$, V_{eff_i} es la discretización del potencial efectivo y está definido por $V_{\text{eff}} = -l(l+1)/2r^2 - Z/r$. Por medio de la solución de la ESIT y del método de diferencias finitas puedo obtener los valores de las eigen-energías E_n y eigen-funciones $R_{n,l}(r)$ de átomos hidrógenoídes, las cuales serán utilizadas para el cálculo de la probabilidad de captura electrónica o excitación por estados como, se discute en la siguiente sección de la dinámica de la colisión ión-átomo.

3.1.1. Estudio numérico del átomo de Hidrógeno.

Como una prueba de la solución numérica de la ec. (3.2) por medio del método de diferencias finitas, resuelvo numéricamente la parte radial de la ESIT obteniendo los estados de excitación $n = 1, 2$ y 3 del átomo de hidrógeno, ya que es un sistema muy bien conocido. En la Fig. 3.1 comparo los resultados obtenidos con las soluciones exactas encontradas en libros de mecánica cuántica elemental [33,39]. Los estados estacionarios son obtenidos utilizando una red numérica definida por $r = [0, 100]$ u.a. y un espaciamiento uniforme de $\Delta r = 0.05$ u.a. También, al resolver numéricamente la ESIT obtengo las eigen-energías del átomo de hidrógeno para los mismos niveles de energía, éstos resultados son reportados en la tabla 3.1 y comparados con la solución exacta $E_n = -13.606/n^2$ demostrando un error del $\sim 0.1\%$. En la misma tabla comparo los valores de expectación $\langle r \rangle = [3n^2 - l(l+1)]/2$, $\langle 1/r \rangle = 1/n^2$ con mis resultados numéricos obtenidos para garantizar la confiabilidad de mis resultados.

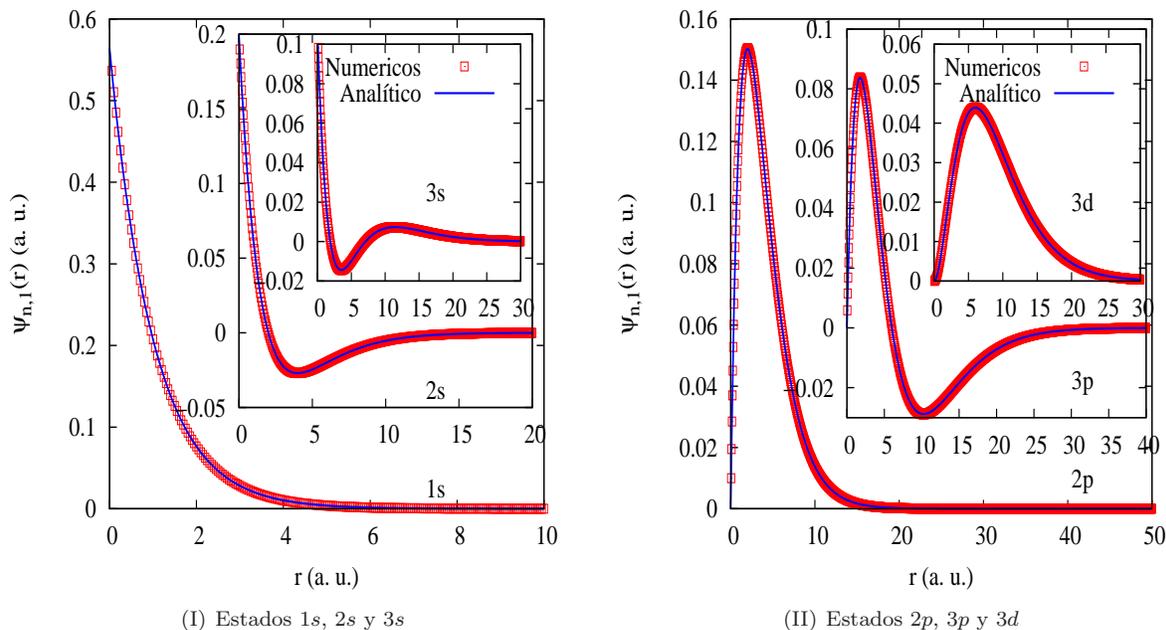


Figura 3.1: Reporto los resultados numéricos obtenidos para los estados s , p y d (\square) por medio del método de diferencias finitas, comparando con las soluciones analíticas (línea continua) [33, 39]. En la Fig. 3.1(I) muestro los resultados para los estados $1s, 2s$ y $3s$ para mejor visualización de los estados esféricos del átomo de hidrógeno, mientras que en la Fig. 3.1(II) muestro los estados $2p, 3p$ y $3d$ para visualizar los nodos asociados con dicho estados.

| Átomo de hidrógeno | | | | | | |
|--------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------------|-----------|---------|
| Estado | $\langle r \rangle$ | $\langle r \rangle^*$ | $\langle 1/r \rangle$ | $\langle 1/r \rangle^*$ | $E_{n,l}$ | E^* |
| 1s | 1.499 | 1.5 | 0.998 | 1.000 | -13.598 | -13.606 |
| 2s | 6.000 | 6.0 | 0.249 | 0.250 | -3.400 | -3.402 |
| 2p | 4.999 | 5.0 | 0.249 | 0.250 | -3.400 | -3.402 |
| 3s | 13.500 | 13.5 | 0.111 | 0.111 | -1.511 | -1.512 |
| 3p | 12.499 | 12.5 | 0.111 | 0.111 | -1.511 | -1.512 |
| 3d | 10.499 | 10.5 | 0.111 | 0.111 | -1.511 | -1.512 |

Tabla 3.1: Valores de energía $E_{n,l}$ (eV) y valores de expectación $\langle r \rangle$ y $\langle 1/r \rangle$ (u. a.) para el átomo de hidrógeno. Estos fueron obtenidos mediante la solución numérica de la ESIT para los estados de excitación $n = 1, 2$ y 3 . Los resultados son comparados con resultados exactos ($\langle r \rangle^* = [3n^2 - l(l+1)]/2$, $\langle 1/r \rangle^* = 1/n^2$ y $E^* = -13.606/n^2$)

3.1.2. Método numérico para sistemas de colisión ión-átomo con láser

El Hamiltoniano que utilizo para describir la colisión entre un ión como proyectil y un átomo de un electrón activo como blanco, con la asistencia de un pulso láser, es el siguiente :

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z_t}{|\vec{r}|} - \frac{Z_p}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} - \vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t), \quad (3.5)$$

donde \vec{r} es la distancia entre el núcleo y el electrón activo del blanco. En este capítulo considero como blanco al átomo de hidrógeno en el estado base 1s, por lo que $Z_t = 1$, mientras Z_p es la carga del núcleo del proyectil.

Cuando la energía de colisión es mayor que la energía de los estados ligados del electrón activo y el parámetro de impacto es lejano al blanco [40], se puede hacer uso de métodos semi-clásicos en los cuales el movimiento de los núcleos está descrito por trayectorias clásicas. Mi investigación se enfoca a energías intermedias por lo que puedo hacer uso de una aproximación en línea recta para la trayectoria del proyectil como $\vec{R}(t) = \vec{b} + \vec{v}_p t$, donde \vec{b} es el parámetro de impacto y \vec{v}_p es la velocidad del proyectil. Así el primer término del Hamiltoniano (3.5) es la energía cinética del electrón activo, el segundo término es el potencial de interacción entre el electrón y el blanco, el tercer término es el potencial de interacción entre el electrón activo y el proyectil. El último término es la descripción semi-clásica del acoplamiento entre el electrón y el campo eléctrico del pulso láser, en la aproximación dipolar. El pulso láser es modelado por una envolvente Gaussiana como :

$$\vec{\mathcal{E}}(t) = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \cos(\omega t + \phi), \quad (3.6)$$

donde $\vec{\mathcal{E}}_0$ es la amplitud del campo eléctrico, en mi caso elijo una polarización lineal en la dirección del eje z . El valor del *Full-Width-Half-Maximum* (FWHM) es definido como $\tau\sqrt{4\ln 2}$, y representa la duración del pulso láser, ω es la frecuencia del pulso láser y ϕ es la fase del láser (RCLP).

La función de onda total $\Psi(\vec{r}, t)$ describe la dinámica del electrón en la colisión y es obtenida por medio de la solución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT) $\mathbf{H}\Psi(\vec{r}, t) = i\partial_t\Psi(\vec{r}, t)$, donde ∂_t es la derivada parcial respecto al tiempo de la función de onda y el Hamiltoniano es definido en la eq. (3.5). Para la dinámica de la colisión, la solución de la ESDT al tiempo inicial $\Psi(\vec{r}, t_0)$, t_0 es propagada por medio del uso del operador unitario de propagación :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \exp(-i\mathbf{H}\Delta t) \Psi(\vec{r}, t_0), \quad (3.7)$$

donde $\Delta t = t - t_0$. Considerando al Hamiltoniano como $\mathbf{H} = \sum_{\eta} \mathbf{T}_{\eta} + \mathbf{V}$ donde $\eta = x, y, z$, la propagación en el tiempo de la función de onda es obtenida del siguiente modo :

$$\prod_{\eta} \exp\left(\frac{i}{2}\mathbf{T}_{\eta}\Delta t\right) \Psi = \prod_{\eta} \exp\left(-\frac{i}{2}\mathbf{T}_{\eta}\Delta t\right) \Xi, \quad (3.8)$$

donde $\Xi(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\mathbf{V}\Delta t)\Psi(\vec{r}, t_0)$.

La ecuación (3.8) es equivalente al método de separación de variables, tal que x, y , y z son independientes y permiten una separación en forma matricial. Al aproximar la función exponencial a primer orden y de acuerdo a la definición del operador de energía cinética $\mathbf{T}_{\eta} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}$ obtengo la siguiente ecuación :

$$\prod_{\eta=x,y,z} \left(1 - \frac{i\Delta t}{4} \frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right) \Psi = \prod_{\eta=x,y,z} \left(1 + \frac{i\Delta t}{4} \frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right) \Xi. \quad (3.9)$$

Ahora, implementando el método de Crank-Nicolson en una aproximación de diferencias finitas, discretizo a la función de onda Ψ como $\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi(x_i, y_j, z_k; t^n) \rightarrow \Psi_{i,j,k}^n$ y la segunda derivada de cada eje dentro de una red numérica cartesiana, donde los puntos sobre la red η son discretizados a η_{ϑ} con $\vartheta = 0, \dots, N$. N es el total de puntos de la red numérica y $\eta = x, y, z$. Utilizo condiciones a la frontera de Dirichlet en la solución numérica de la ESDT, esto es $\Psi(\vec{r} \rightarrow \infty) = 0$, en las fronteras de la red numérica, así, puedo re-escribir a la ecuación (3.9) como sigue :

$$\mathbf{A}_x^+ \mathbf{A}_y^+ \mathbf{A}_z^+ \Psi^{n+1} = \mathbf{A}_x^- \mathbf{A}_y^- \mathbf{A}_z^- \Xi^n, \quad (3.10)$$

donde las matrices A_η^\pm tienen los siguientes elementos constantes :

$$\begin{pmatrix} 1 \pm 2\nu_\eta & \mp\nu_\eta & 0 & \dots & 0 \\ \mp\nu_\eta & 1 \pm 2\nu_\eta & \mp\nu_\eta & \dots & 0 \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \mp\nu_\eta & 1 \pm 2\nu_\eta & \mp\nu_\eta \\ 0 & \dots & 0 & \mp\nu_\eta & 1 \pm 2\nu_\eta \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

donde $\nu_\eta = i\Delta t/(4\Delta\eta^2)$. La condición que tiene el método numérico es que $|\nu_\eta| < 1$ para mantener la estabilidad de la función de onda total a tiempo largos de propagación, en caso contrario la función de onda carece de convergencia, y se obtienen resultados sin sentido físico.

Sección eficaz de captura electrónica y excitación

A partir del proceso computacional descrito en la sección anterior, obtengo la función de onda total $\Psi(\vec{r}, t_f)$ al tiempo final, t_f , de la dinámica de la colisión. Así, la sección eficaz total de captura electrónica es calculada por medio de la integración de $|\Psi(\vec{r}, t_f)|^2$ como sigue :

$$P(E_p, b) = \int_{\mathcal{V}} |\Psi(\vec{r}, t_f)|^2 d\mathcal{V} \quad , \quad \sigma(E_p) = 2\pi \int_0^\infty P(E_p, b) b db, \quad (3.12)$$

donde $P(E_p, b)$ es la probabilidad de captura electrónica total, E_p la energía de colisión, b el parámetro de impacto, \mathcal{V} es el volumen de integración donde la función de onda esté bien definida para la captura electrónica y $\sigma(E_p)$ la sección eficaz de captura electrónica total.

Con el fin de calcular la captura electrónica total mediante la integración numérica de $|\Psi(\vec{r}, t_f)|^2$, en la Fig. 3.1.2 muestro la proyección de la función de onda en dirección del eje z al tiempo final de la dinámica. En ésta imagen puedo definir el intervalo de integración en el eje z del volumen \mathcal{V} para la captura electrónica total. Una vez obtenida la solución numérica de la ESIT para n estados del átomo hidrogenoide, la probabilidad de captura electrónica y excitación de diferentes estados $P_{n,l}(E, b)$ es calculada proyectando la función de onda estacionaria de dichos n estados sobre la función de onda total al final de la dinámica (obtenida de la solución numérica de la ESDT).

$$P_{n,l}(E, b) = \sum_{m=-l}^l \left| \int_{\mathcal{V}} R_{n,l}(r) Y_{l,m}^* \Psi(x, y, z; t_f) d\mathcal{V} \right|^2, \quad (3.13)$$

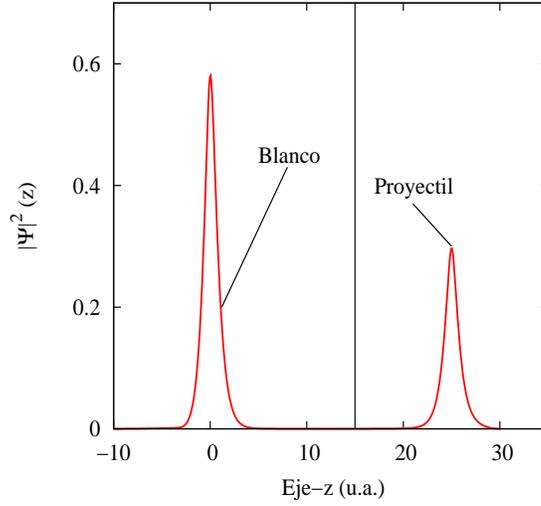


Figura 3.2: Proyección de la función de onda total promediado en la variable z , para ejemplificar la elección de la caja numérica \mathcal{V} del cálculo de la probabilidad de captura electrónica o excitación

donde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, R_{nl} es la parte radial de las funciones de onda estacionarias dadas en coordenadas esféricas y fueron obtenidas de la solución numérica de la ESIT, $Y_{l,m}$ son los armónicos esféricos en coordenadas cartesianas, su expresión puede ser encontrada en libros de mecánica cuántica [33], $\Psi(x, y, z; t_f)$ es la función de onda total al final de la dinámica obtenida de la solución numérica de la ESDT y \mathcal{V} es la caja numérica elegida para la integración numérica según sea el caso, i.e., definiendo a Γ como la caja numérica completa y \mathcal{V} la caja numérica para la probabilidad de captura electrónica total, $\Gamma - \mathcal{V}$ es la caja numérica para la probabilidad de excitación. Dado que la función de onda $\Psi(x, y, z; t_f)$ está en coordenadas cartesianas y las funciones de onda radial $R_{n,l}(r)$ en coordenadas esféricas, hago coincidir los datos numéricos de dichas funciones en un punto en común por medio de una interpolación lineal, permitiendo el cálculo de la probabilidad de n estados de captura electrónica o n estados de excitación.

Para el caso de captura electrónica, incluyo un factor de traslación en las funciones de onda estacionarias como :

$$R_{nl}Y_{l,m} = R_{nl}(r_p)Y_{l,m}(x - b, y, z - z_f) \exp(i\vec{v}_p z_f), \quad (3.14)$$

\vec{v}_p es la velocidad del proyectil, r_p es el centro de la función de onda estacionaria y el argumento de la exponencial es un factor de fase que implica que las funciones estacionarias fueron colocadas en el punto $r_p = \sqrt{(x - b)^2 + y^2 + (z - z_f)^2}$ donde z_f es la posición final del ión en la colisión. Para el cálculo de la probabilidad de excitación, el centro de las funciones estacionarias es el origen de la red numérica por lo que no se incluye el factor de traslación. Finalmente, la sección eficaz de captura electrónica o excitación por

estados es calculada como :

$$\sigma_{nl}(E) = 2\pi \int_0^{b_{max}} P_{n,l}(E, b) b db, \quad (3.15)$$

donde el límite superior b_{max} de la integral (3.15) es reemplazado por un valor de corte, determinado por el tamaño de la caja numérica Γ .

3.2. Sistema de colisión simétrico $\mathbf{H}^+ + \mathbf{H}(1s) \rightarrow \mathbf{H}(n = 1, 2) + \mathbf{H}^+(n = 2)$

Como una prueba del método numérico discutido en la sección anterior y del proceso computacional, considero el estudio del sistema $\mathbf{H}^+ + \mathbf{H}(1s)$ en el intervalo de energías de colisión 1 – 25 keV/uma debido que existe un vasto estudio de este sistema en la literatura y puedo comparar mis resultados numéricos con aquellos obtenidos por otras teorías, y con mediciones experimentales. Después, incluyo la asistencia de un pulso láser intenso y corto en la dinámica de la colisión, para corroborar los resultados de Ferrante et al. [12] y extender éste estudio al análisis de la modificación de la sección eficaz de captura electrónica y de excitación para los estados $n = 2$, ya que a este nivel de energía el efecto Stark es notorio.

Implementación numérica

En la implementación, el proyectil \mathbf{H}^+ inicia su trayectoria en el punto definido por $\vec{R}(0) = (b, 0, z_0)$ y es propagado en dirección del eje z desde su posición inicial $z_0 = -35$ u.a., b es el parámetro de impacto paralelo al eje x para un intervalo de $b \in [0.2, 10]$ con un incremento uniforme $\Delta b = 0.2$. La caja numérica está definida como $[-10, 20]_x \times [-15, 15]_y \times [-45, 45]_z$ con un espaciamiento uniforme $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2$, para el incremento de tiempo $\Delta t = 0.06$ por estabilidad del método numérico. El blanco es el átomo de hidrógeno en su estado base y es colocado en el origen del sistema cartesiano. Esta función de onda al inicio de la dinámica es calculada con la técnica de tiempo imaginario haciendo un cambio de variable $\tau = it$ en la ESDT. Ésta ecuación es resuelta por medio del método implícito de Crank-Nicolson con el Hamiltoniano (3.5) para $Z_p = 0$ y $\vec{\mathcal{E}}(t) = 0$ difundiendo una función prueba definida como una constante hasta que converja a la

| Energ. | Vel. | Energ. | Vel. | Energ. | vel. |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| 25.0 | 1.0000 | 20.0 | 0.8948 | 15.0 | 0.7749 |
| 10.0 | 0.6328 | 7.0 | 0.5259 | 5.0 | 0.4474 |
| 2.0 | 0.2829 | 1.0 | 0.2000 | | |

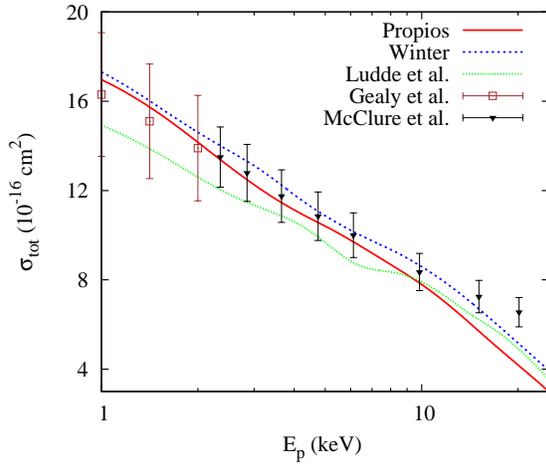
Tabla 3.2: Conversión entre energías en keV y la velocidad del ión en unidades atómicas.

función de mínima energía, para el caso de $Z_t = 1$ obtengo la función $1s$ del átomo de hidrógeno con energía mínima de $E_{\min} = -0.4985$ u.a., el cual tiene un buen acuerdo con el resultado exacto $E_{n=1} = -0.5$. La velocidad del ión es calculada por la ecuación $E_p = \frac{1}{2}m_p v_p^2$, donde $m_p = 1837m_e$ y m_e la masa del electrón. En mi investigación considero el intervalo de energías de colisión y sus respectivas velocidades listadas en la tabla 3.2.

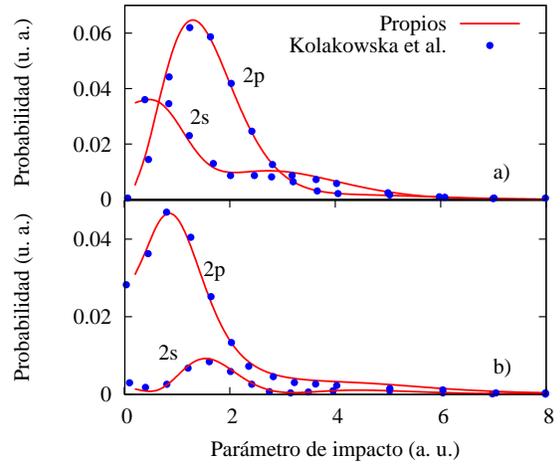
3.2.1. Análisis para el caso sin láser

En la figura 3.3(I) muestro la captura electrónica total obtenida por el método de Crank-Nicolson comparando con resultados reportados por varios autores como Lüdde et al. [41] y Winter [42] quienes utilizan diferentes métodos teóricos, así como con mediciones experimentales de Gealy et al. [43] y McClure et al. [44]. A partir de esta comparación puedo decir que tengo un buen acuerdo con los resultados teóricos y las mediciones experimentales en el intervalo de energías de $1 - 10$ keV, pero, se nota un desacuerdo con las mediciones experimentales para energías mayores a 10 keV. Esto se debe al canal de ionización de este sistema, el cual es de gran importancia para altas energías y mi método numérico no lo describe correctamente.

En la literatura se encuentran varios métodos teóricos aplicados a este sistema, en particular, el método de ESDT-red numérica (*LTDSE*) utilizado por Kolakowska et al. [45], el cual es de interés en este trabajo debido



(I) Sección eficaz total de captura electrónica.



(II) Probabilidad de captura electrónica y excitación de los estados $2s$ y $2p$

Figura 3.3: Fig. 3.3(I) sección eficaz de captura electrónica total en el intervalo de energías de colisión $1 - 25$ keV. Los resultados son comparados con resultados teóricos de Lüdde et al. [41] y Winter [42], también con mediciones experimentales de Gealy et al. [43] y McClure et al. [44]. En la Fig. 3.3(II) comparo los resultados numéricos obtenidos para la probabilidad de captura electrónica (a)) y excitación (b)) con los resultados teóricos reportados por el método LTDSE de Kolakowska et al. [45] para los estados $n = 2$ en función del parámetro de impacto a 10 keV de energía de colisión.

a la similitud con el proceso computacional utilizado en esta investigación. En la Fig. 3.3(II) comparo la probabilidad de captura electrónica y excitación de los estados $n = 2$ para 10 keV en función del parámetro de impacto con los reportados por Kołakowska et al. [45] llegando a un buen acuerdo entre ellos. Para el estado $2p$ mantengo el buen convenio con los resultados de Kołakowska et al. [45] en el intervalo del parámetro de impacto $[0, 8]$ u.a. y reportando la misma oscilación en el intervalo $b \in [3, 6]$ u.a. El máximo de la probabilidad del estado $2p$ para los procesos de captura electrónica y excitación es alrededor de $b = 1$ u.a. y en ambos casos la probabilidad del estado $2s$ está por debajo de la probabilidad del estado $2p$, esto se debe a que la función de onda radial del estado $2p$ no presenta nodos, mientras que la función de onda radial del estado $2s$ tiene un único nodo, reduciendo la probabilidad de captura electrónica y excitación.

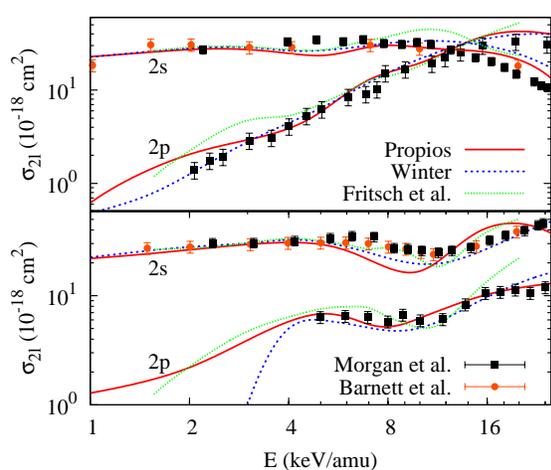
En la Fig. 3.4(I) muestro los resultados obtenidos del cálculo la sección eficaz de captura electrónica y excitación de los estados $n = 2$ por medio de la ec. (3.15), y para demostrar la confiabilidad de mis resultados, estos son comparados con resultados teóricos de Winter [42] y Fritsch et al. [46] y mediciones experimentales de Morgan et al. [47] y Barnett et al. [48]. Debido a que utilizaré este método numérico para el estudio de colisiones atómica asistidas por láser, calculo la sección eficaz total de ionización por medio de la siguiente expresión :

$$\sigma_{\text{Ion}} = \sigma_{\text{Elast}} - \sum_{n,l} \left(\sigma_{n,l}^{\text{Exc}} + \sigma_{n,l}^{\text{Capt}} \right), \quad (3.16)$$

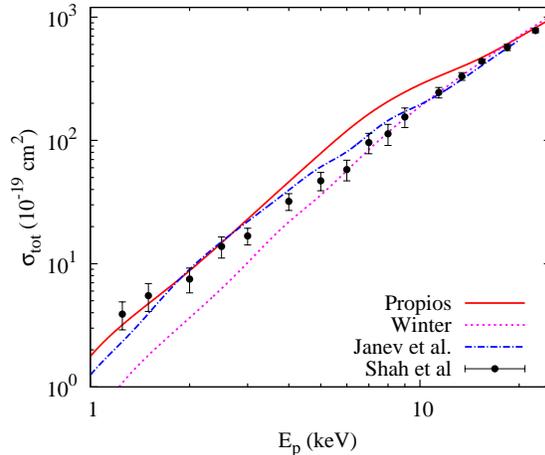
definiendo el intervalo de energías de colisión donde los procesos de captura electrónica y excitación estén bien descritos. En la ecuación (3.16) σ_{Elast} es la sección eficaz de la colisión elástica obtenida como :

$$\sigma_{\text{Elast}} = 2\pi \int_0^{\infty} (1 - P^*(b)) b db, \quad (3.17)$$

donde $P^*(b)$ es la probabilidad de excitación del estado resonante o la parte elástica del sistema de colisión ión-átomo, en este caso es el estado $1s$. $\sigma_{n,l}^{\text{Exc}}$ es la suma de la sección eficaz de los estados de excitación, es decir, la suma parcial de la sección eficaz de la parte inelástica y $\sigma_{n,l}^{\text{Capt}}$ es la suma parcial de los diferentes estados de la sección eficaz de captura electrónica. Así, en la figura 3.4(II) muestro los resultados obtenidos para la sección eficaz total de ionización comparando con resultados teóricos reportados por Winter [42] y Janev et al. [49], así como con mediciones experimentales de Shah et al. [50]. Concluyo afirmando que el método numérico otorga resultados con mejor precisión en el intervalo de energías de colisión $1 - 10$ keV, mientras que fuera de este intervalo de energías los resultados numéricos obtenidos tendrán un error mayor, ya que de $1 - 10$ keV la sección eficaz total de ionización tiene un buen acuerdo con los resultados teóricos y las mediciones experimentales. Esta conclusión se verifica en los cálculos previos de la sección eficaz de captura electrónica total (Fig. 3.3(I)) y de los estados $n = 2$ (Fig. 3.4(I)), así como para la sección eficaz de



(I) Sección eficaz de captura electrónica y excitación de los estados $2s$ y $2p$



(II) Sección eficaz total de ionización

Figura 3.4: Fig. 3.4(I) reporto la sección eficaz de captura electrónica (superior) y excitación (inferior) para el intervalo de energías 1-25 keV, comparo con resultados teóricos de Winter [42] y Fritsch et al. [46] y mediciones experimentales de Morgan et al. [47] y Barnett et al. [48]. En la Fig. 3.4(II) muestro la sección eficaz total de ionización obtenida por la ecuación 3.16 y comparo con resultados teóricos reportados por Winter [42] y Janev et al. [49], así como con mediciones experimentales de Shah et al. [50].

excitación para los estados $n = 2$ (Fig. 3.4(I)).

3.2.2. Resultados para el caso con la asistencia del pulso láser

El sistema $H^+ + H(1s)$ es un sistema donde el blanco y el proyectil tienen los mismos niveles de energía y de acuerdo con Ferrante et al. [12], el pulso láser tendrá un efecto mínimo en el proceso de captura electrónica total. Como un preámbulo al estudio de colisiones atómicas asistidas por láser, considero el análisis del efecto de un pulso láser intenso en el proceso de captura electrónica del sistema $H^+ + H(1s)$ en el intervalo de energías de colisión 1 – 10 keV, calculando la sección eficaz de captura electrónica de los estados $n = 2$. El intervalo de energías considerado se debe a que energías superiores a 10 keV el método numérico no describe correctamente el proceso de ionización para este sistema de colisión. El pulso láser es modelado por un pulso Gaussiano ultra-corto e intenso definido en la ec. (2.2)

La posición inicial del proyectil incidente está a una distancia tal que el campo eléctrico del pulso láser es despreciable, así, el efecto Stark es mínimo al momento de hacer el cálculo de la probabilidad de captura electrónica por estados, ya que las funciones de onda estacionarias del átomo de hidrógeno no contienen la información del efecto Stark. La intensidad I_0 del pulso láser y el campo eléctrico del mismo están relacionados como $I_0 \sim |\mathcal{E}_f(t)|^2$, entonces, el campo eléctrico $\mathcal{E}_f(t)$ debe ser el 1% del valor máximo del pulso al inicio y final de la dinámica, i.e., $\mathcal{E}(t_{\min})/\mathcal{E}_0 = 0.01$. Al considerar un ancho del pulso como $\tau = 1$

fs (25 u.a.) el tiempo mínimo es $t_{min} = 53.3$ u.a. y como la posición inicial del ión H^+ es $z_0 = -v_p t_{min}$ u.a., evaluando z_0 para la energía de colisión mayor en el intervalo de energías considerado en éste trabajo 10 keV ($v_p = 0.6328$ u.a.), y la posición inicial es $z_0 = -35$ u. a.

Para visualizar el pulso láser, en la Fig. 3.5(I) muestro la forma del pulso láser en función del tiempo, para los valores $\tau = 25$ u.a. (1 fs), $\omega = 0.056$ u.a. (800 nm) a diferentes fases (RCLP) en pasos de $n\pi$, donde $n = 0, 0.5, 1, 1.5$. A partir de estas consideraciones para la dinámica de colisión, defino la caja numérica como $[-10, 20]_x \times [-15, 15]_y \times [-45, 45]_z$, tal como se había propuesto en el caso sin láser. De este modo, en la Fig. 3.5(II) muestro el efecto de la fase del pulso láser en la probabilidad de captura electrónica de los estados $n = 2$ en función del parámetro de impacto a 10 keV de energía de colisión. Reporto dicho efecto considerando dos valores representativos de RCLP los cuales son $\phi = 0$ y $\phi = 1.5\pi$. Para $\phi = 0$ la probabilidad de captura disminuye para el estado $2p$ en el intervalo de parámetro de impacto de $[0.2, 4.0]$ u.a. respecto al caso sin láser. La probabilidad de captura electrónica para el estado $2s$ se incrementa a parámetros de impacto cercanos al blanco y decreciendo a parámetros de impacto mayores a $b = 2.0$ u.a. El proceso de captura electrónica es mejorada por el efecto de la asistencia del pulso láser para una fase $\phi = 1.5\pi$, ya que la probabilidad de captura electrónica para los estados $n = 2$ aumenta.

En un experimento no es posible controlar la fase relativa a la colisión, por tal motivo realizo un promedio de la captura electrónica para los estados $n = 2$ sobre la RCLP. En la misma Fig. 3.5(II) reporto mis

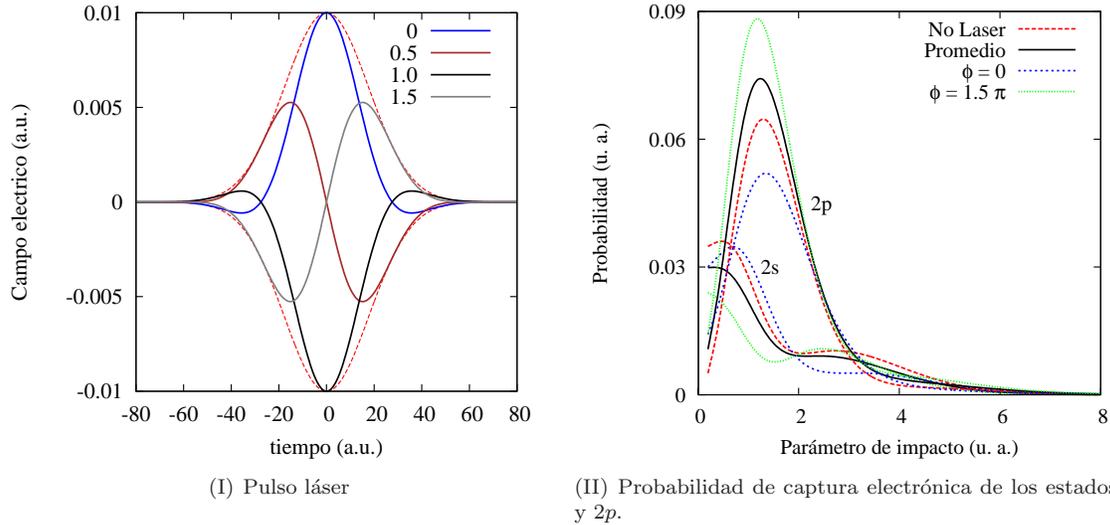
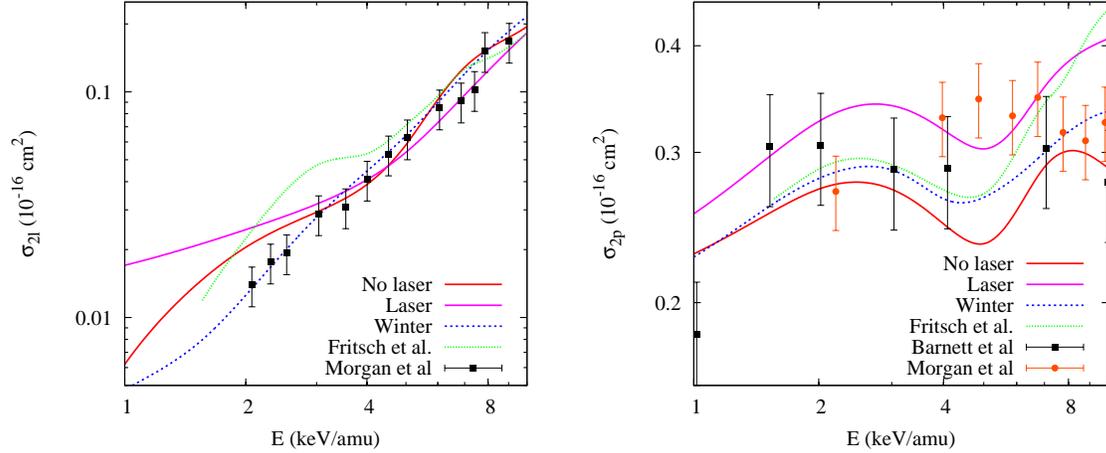


Figura 3.5: En la Fig. 3.5(I) muestro la forma del pulso láser para $\tau = 25$ u.a. (1 fs), $\omega = 0.056$ u.a. (800 nm) a diferentes valores de RCLP en pasos de $n\pi$, donde $n = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5$. En la Fig. 3.5(II) reporto el efecto de la fase del pulso láser (RCLP) en la probabilidad de captura electrónica para los estados $n = 2$ a 10 keV en función del parámetro de impacto.



(I) Sección eficaz de captura electrónica de los estados $2s$ (II) Sección eficaz de captura electrónica de los estados $2p$

Figura 3.6: En la Fig. 3.6(I) y Fig. 3.6(II) muestro el efecto del pulso láser en la probabilidad de captura electrónica de los estados $2s$ y $2p$ del sistema H^++H , respectivamente. Como una guía para visualizar el efecto del pulso láser, incluyo los resultados para el caso sin láser de la Fig. 3.4(I). Comparando con mediciones experimentales de Morgan et al. [47], Bayfield [51] y Barnett et al. [48] concluyo que el efecto del pulso láser no es relevante en un experimento.

resultados numéricos de dichas probabilidades sobre el RCLP notando un efecto mínimo del pulso láser en el proceso de captura electrónica a ésta energía de colisión.

Para analizar el efecto del pulso láser en el intervalo de energías considerado, en las figuras 3.6(I) y 3.6(II), comparo los resultados numéricos de la sección eficaz de captura electrónica y excitación de los estados $2s$ y $2p$ para el caso libre, con los resultados de la asistencia del pulso láser en la dinámica promediados sobre su fase (RCLP). En estas figuras se puede notar un efecto mínimo en todo el intervalo de energías del proceso de captura electrónica, y debido a que los resultados obtenidos están dentro de las barras de error de las mediciones experimentales, el efecto de un pulso láser en un sistema resonante no puede ser observado en un experimento [52]. A partir de este análisis y tomando en cuenta el trabajo de Ferrante et al [12] donde se concluye que el efecto de la asistencia de un láser en la dinámica de sistemas de colisión resonantes es despreciable debido a que la sección eficaz de captura electrónica total permanece sin cambios notorios. Con los cálculos presentados en este trabajo, concluyo que el efecto del pulso láser es despreciable en la captura electrónica para los estados más energéticos del proyectil en los sistemas de colisión resonantes.

3.3. Sistema de colisión $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{He}^+(n = 2, 3) + \text{H}^+$

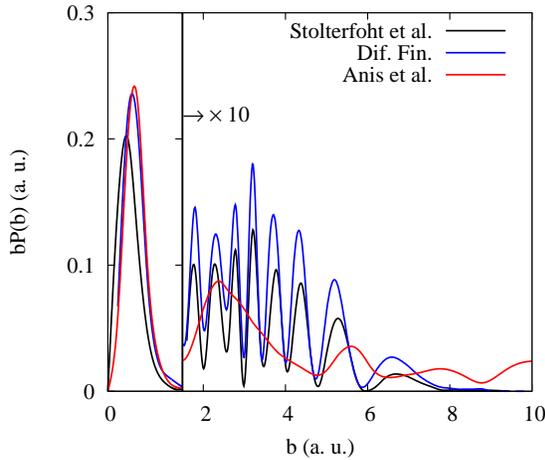
En trabajos teóricos recientes, como el de Madsen et al. [8], se ha estudiado el mecanismo de excitación en sistemas de colisión ión-átomo, así como el efecto de varios láseres en éste tipo de mecanismo describiendo la modificación de la dinámica de la función de onda total en el sistema $\text{H}^+ + \text{H}(1s)$. También, Kirchner [13] y Anis et al. [11] han realizado una descripción mecánico-cuántica del movimiento electrónico en colisiones asistidas por láser estudiando el efecto de un pulso láser en la sección eficaz de captura electrónica total del sistema $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$. Sin embargo, el estudio de la población de los estados del ión al final de la colisión asistida por láser es un tema que no ha sido tratado en la literatura. En esta sección, me intereso en el estudio del efecto de la duración de un pulso láser en el proceso de captura electrónica para el sistema $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ en el intervalo de energías de colisión 0.25 – 10 keV/amu. Analizo el efecto de dos valores de ancho del pulso láser ($\tau = 3$ fs. 75 u.a y $\tau = 1$ fs 25 u.a) en la probabilidad de captura electrónica de los estados $n = 2$ y 3 [53].

Implementación numérica

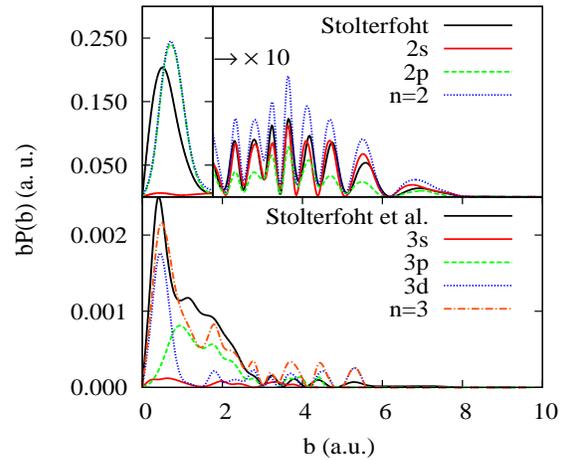
De manera semejante al estudio del sistema simétrico $\text{H}^+ + \text{H}(1s)$, analizo el efecto de la asistencia de un pulso láser en el sistema asimétrico $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ colocando al blanco en el origen del sistema cartesiano, que en mi caso es el átomo de hidrógeno en el estado base. Defino la caja numérica considerando distintos anchos del pulso láser, i.e. 1 (25 u.a.) y 3 (75 u.a.) fs., el pulso láser aplicado a la dinámica de la colisión está definido por la ecuación (2.2). Así, bajo la condición de que la amplitud de campo eléctrico sea el 1% del máximo del pulso láser y eligiendo un ancho de pulso de $\tau = 75$ u.a. (3 fs. a FWHM) obtengo $t_{\min} = -161$ u.a., por lo que la posición inicial del proyectil He^{2+} , a una velocidad de 10 keV/amu ($v_p = 0.6328$ a.u.) de energía de colisión es $R(0) = (b, 0, z_0 = -105)$ u.a. (b el parámetro de impacto). La posición final del proyectil, es elegida a una posición mayor a 105 u.a. con el propósito de reducir modificaciones por efecto Stark en el proceso de captura electrónica. Definiendo a la caja numérica como $[-10, 20]_x \times [-15, 15]_y \times [-110, 120]_z$ con un espaciamiento uniforme $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2$, y para el tiempo $\Delta t = 0.06$ por estabilidad del método numérico. El cálculo de las funciones estacionarias y las eigen-energías del ión He^+ es realizado por medio de la solución numérica de la ESIT usando el método de diferencias finitas y los mismos parámetros utilizados en la solución del átomo de hidrógeno. Encontrando los valores para las energías $E(n = 1) = -1.999$ u.a., $E(n = 2) = -0.499$ u.a., y $E(n = 3) = -0.222$ u.a., con un error absoluto menor al 0.1% respecto al resultado exacto $E = -Z^2/2n^2$. Por lo tanto, puedo confiar en los resultados numéricos obtenidos para el caso estacionario y calcular la probabilidad de captura electrónica del sistema $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ de los estados $n = 2$ y 3, de manera análoga al sistema $\text{H}^+ + \text{H}(1s)$.

3.3.1. Resultados para el caso sin láser a 250 eV

Para el caso sin láser, calculo la probabilidad de captura electrónica total y de los estados $n = 2$ y 3 a 250 eV con el propósito de conocer si el proceso computacional tiene una buena concordancia con resultados teóricos a esta energía de colisión. En la Fig. 3.7 muestro los resultados obtenidos en función del parámetro de impacto para el ión He^{2+} colisionando con el hidrógeno atómico. En la figura 3.7(I) comparo mis resultados de la probabilidad de captura electrónica total con los resultados reportados por Anis et al. [11] y con cálculos numéricos de mayor precisión obtenidos por medio del método END (*Electron Nuclear Dynamics*) de Stolterfoht et al. [54]. A partir de ésta figura es notoria la excelente descripción de las oscilaciones de Stückelberg por Stolterfoht et al. [54]. Dichas oscilaciones se deben a efectos de interferencia en el proceso de captura electrónica. También, puedo notar el buen acuerdo de mis resultados numéricos con la descripción de Stolterfoht et al. [54] para el intervalo radial ($b > 1$) con un rango de tolerancia del 10%, mientras que la diferencia existente en el intervalo rotacional debido a que el método END incluye trayectorias reales y mi método numérico utiliza trayectorias en línea recta. En contraste, los resultados mostrados por Anis et al. [11] no contienen la información de las oscilaciones de Stückelberg, esto se debe al espaciamiento utilizado para el intervalo del parámetro de impacto b elegido por los autores, el cual es $\Delta b = 0.40$ u.a. Este buen acuerdo confirma que la dinámica del proceso de captura electrónica es propiamente descrita por el método de diferencias finitas y END para este tipo de sistemas de colisión.



(I) Probabilidad de captura electrónica total



(II) Probabilidad de captura electrónica de los estados $n = 2$ y 3

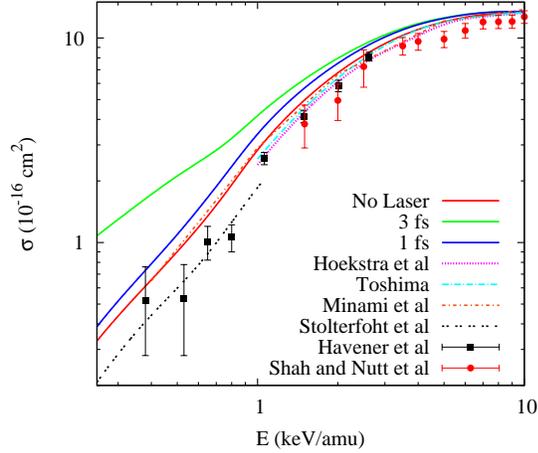
Figura 3.7: En la Fig. 3.7(I) y Fig. 3.7(II) muestro la probabilidad de captura electrónica $P(b)$ total y de los estados $n = 2$ y 3 multiplicada por el parámetro de impacto en función de b del sistema $\text{He}^{2+} + \text{H}$ a 250 eV/amu. Los resultados son comparados con resultados reportados por Stolterfoht et al. [54] (línea negra) y Fatima et al. [11] (línea roja)

En la Fig. 3.7(II) muestro la probabilidad de captura electrónica para los estados $n = 2$ y 3 en función del parámetro de impacto b a 250 eV/amu para el caso sin láser, reportando un buen acuerdo con los resultados de Stolterfoht et al. excepto a parámetros de impacto menores a la unidad. Al comparar mis resultados numéricos para los estados $n = 2$ con la excelente descripción de los efectos de interferencia (oscilaciones de Stückelber) reportados por Stolterfoht et al. [54] puedo notar el buen acuerdo entre ellos en todo el intervalo de parámetro de impacto considerado en este trabajo, mientras que el buen acuerdo para los estados $n = 3$ está en la región radial. Esto se debe a la precisión elegida para la solución de la ESDT, ya que $\Delta\eta = 0.2 \text{ u.a.}$ con $\eta = x, y, z$ y no permite una buena precisión para el cálculo de la probabilidad de captura electrónica $P(b)$ de los estados $n = 3$.

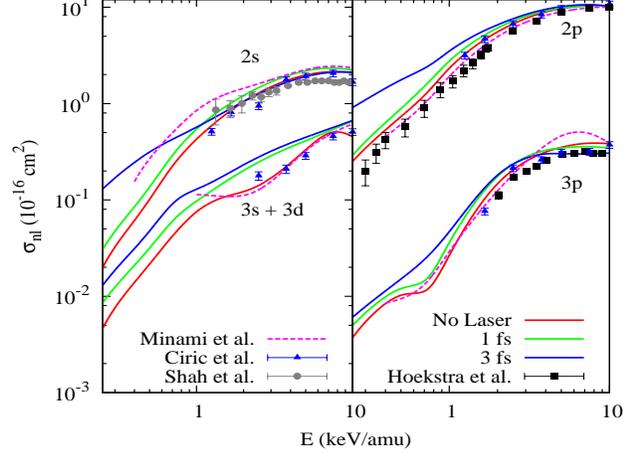
3.3.2. Efectos de la duración de un pulso láser en el proceso de captura electrónica

Para el caso sin láser, en la figura 3.8(I) demuestro la confiabilidad de mis resultados numéricos para la sección eficaz de captura electrónica total comparándolos con aquellos obtenidos por otras teorías de Minami et al. [55], Hoekstra et al. [56], Toshima [57] y Stolterfoht et al. [54]. También con mediciones experimentales de Havener et al. [58], Shah et al. [59] y Nutt et al [60]. Para el caso de la asistencia de un pulso láser en la colisión, mis resultados numéricos son reportados realizando un promedio sobre la fase ϕ del láser notando que para una duración de pulso de 3 fs la sección eficaz de captura electrónica total tiene un gran incremento para energías de colisión menores a 1 keV , mientras que para 1 fs el efecto del pulso láser en el sistema es mínimo.

En la Fig. 3.8(II) muestro los resultados obtenidos por medio del método de Crank-Nicolson en la aproximación de diferencias finitas para la probabilidad de captura electrónica de los estados $n = 2$ y $n = 3$ en función de la energía de colisión para el caso sin láser (No láser) comparando con resultados teóricos de Minami et al. [55] y mediciones experimentales de Ćirić et al. [61], Hoekstra et al. [56] y Shah et al. [59]. Para energías de colisión menores que 2 keV/uma mis resultados numéricos tienen un buen acuerdo con los resultados teóricos de Minami et al. y una buena aproximación con los resultados experimentales de Ćirić et al., Hoekstra et al. y Shah et al. Para el caso con láser considero una duración del pulso de 1 y 3 fs , reportando los resultados con láser mediante un promedio sobre la fase ϕ (RCLP). A partir de la Fig. 3.8(II) observo que la sección eficaz de captura electrónica para los estados $n = 2$ promediados sobre la fase ϕ tienen la máxima contribución respecto a los demás estados. Para 1 fs el efecto del pulso láser es mínimo, mientras que para 3 fs la captura electrónica tiene un factor de diferencia de 10 respecto a los resultados sin láser. También en la Fig. 3.8(II) muestro mis resultados numéricos para la sección eficaz de captura



(I) Sección eficaz total de captura electrónica



(II) Sección eficaz de captura electrónica de los estados $n = 2$ y 3

Figura 3.8: En la Fig. 3.8(I) y Fig. 3.8(II) muestro la sección eficaz de captura electrónica total y de los estados $n = 2$ y 3 en función de la energía del proyectil del sistema $\text{He}^{2+} + \text{H}$ en el intervalo de energías $0.25 - 25$ keV/amu. Para el caso sin láser, los resultados son comparados con resultados teóricos de Minami et al. [55], Hoekstra et al. [56], Toshima [57] y Stolterfoht et al. [54], así como con mediciones experimentales de Havener et al. [58], Ćirić et al. [61], Shah et al. [59] y Nutt et al [60]

electrónica del estado $3p$ en función de la energía del proyectil. Para este caso, el incremento del valor de la sección eficaz para energías bajas no es tan notorio. Finalmente, en esta misma Fig. 3.8(II) reporto los resultados numéricos obtenidos para la sección eficaz de los estados $3s + 3d$. La suma de los resultados de los estados $3s$ y $3p$ no pueden ser diferenciados en mediciones experimentales, por esta razón reporto la suma del valor de la sección eficaz para estos estados comparando con las mediciones experimentales de Ćirić et al y Hoekstra et al. El efecto del pulso láser para estos estados tienen un incremento del valor de la sección eficaz por un factor de 5 para energías menores a 1 keV/amu.

De acuerdo al análisis del efecto de un pulso láser en el proceso de captura electrónica de sistemas de colisión simétricos ($\text{H}^+ + \text{H}(1s)$) y asimétricos ($\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$) puedo concluir que el mayor efecto del pulso láser es a bajas energías y en los sistemas asimétricos, ya que para sistemas simétricos, el efecto del pulso láser es despreciable en la captura electrónica total, y en los estados el efecto es mínimo. Entonces, debido a que nuestro proceso computacional es confiable, como último estudio de colisiones asistidas por láser, en la siguiente sección, considero el estudio del efecto de un pulso láser en los procesos de captura electrónica y excitación para un sistema de gran interés en plasma de Tokamaks.

3.4. Análisis de los procesos de captura electrónica y excitación del sistema $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ con láser

En el presente trabajo de esta sección, estoy interesado en el efecto un pulso láser corto, ultra-violeta e intenso en los procesos de captura electrónica y excitación del sistema de colisión $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ en el intervalo de energías 1–25 keV/uma, debido a que se ha demostrado que la asistencia de un pulso láser en la dinámica de la colisión ión-átomo hace más eficiente dichos procesos en sistemas asimétricos [8, 10–13, 52, 53, 62, 64].

3.4.1. Método de Hartree-Fock

El estudio del sistema de colisión $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ lo realizo resolviendo numéricamente la ESDT por medio del método de Crank-Nicolson y para modelar el proyectil Li^+ , construyo un pseudo-potencial que describa las eigen-energías y funciones de onda estacionarias del átomo de litio por medio del método de Hartree-Fock. Mi método numérico se aplica para sistemas de colisión de un electrón activo, por lo que el pseudo potencial debe tener un núcleo congelado que modele los electrones del estado $1s^2$, ya que para energías de colisión menores a 20 keV/uma (menor a una unidad atómica de velocidad) la influencia del núcleo $1s^2$ del átomo de litio sobre los procesos de captura electrónica y excitación son despreciables [18]. En general, construyo el pseudo potencial considerando un núcleo congelado ($1s^2$) y resolviendo la siguiente ecuación de Hartree-Fock :

$$\left(-\frac{1}{2m}\nabla^2 - \frac{Z}{r}\right)\phi_i(r) - E_i\phi_i(r) = -\int \frac{d^3r'}{|r-r'|} \sum_j \phi_j^*(r') \times [\phi_j(r')\phi_i(r) - \phi_j(r)\phi_i(r')\delta_{s_i s_j}], \quad (3.18)$$

donde ϕ_i son funciones estacionarias tipo Hartree-Fock, con $i = 1, \dots, N$ (N el número de partículas) y estas funciones pueden ser construidas de tal modo que los estados son llenados desde el estado base hacia estados excitados. Como resultado del principio de Pauli la capa s puede ser llenada con 2 electrones ($l = 0$), 6 dentro de la capa p ($l = 1$), 10 electrones dentro de la capa d ($l = 2$). El átomo de litio, en el cual estoy interesado, tiene dos electrones en el orbital $1s$ y un electrón en $2s$, con una configuración definida por $1s^2 2s$ ($^1S_{\frac{1}{2}}$). Para resolver el lado derecho de la ecuación (3.18) requiero de un potencial de núcleo congelado, el cual es obtenido a partir de la definición del potencial eléctrico considerando un sistema atómico de dos electrones como :

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V \frac{\rho(r')r'^2 d\Omega dr'}{\sqrt{r'^2 + r^2 - 2rr' \cos(\theta)}}, \quad \text{con} \quad \rho(r) \simeq (Z^*)^3 \exp(-2Z^*r), \quad (3.19)$$

donde Z^* es la carga apantallada y $d\Omega$ es la definición de ángulo sólido. Resuelvo el potencial eléctrico (3.19) mediante el uso de los polinomios de Legendre obteniendo la siguiente expresión :

$$\frac{2}{r} (Z^*)^2 \left[(1 + Z^*r) e^{-2Z^*r} - 1 \right]. \quad (3.20)$$

El segundo término del lado derecho de la ecuación (3.18) es resuelto por medio de la aproximación de Thomas-Fermi definiendo la cantidad $\xi(r) = \alpha \rho^{1/3}(r)$, donde α es un parámetro libre. Sumando los resultados obtenidos con el potencial atómico Z/r , el pseudo potencial $V_P(r)$ de núcleo congelado $1s^2$ es expresado como :

$$V_P(r) = \frac{1}{r} \left[(Z - 2) + 2(1 + Z^*r) e^{-2Z^*r} \right] + \xi(r), \quad (3.21)$$

con $Z^* = Z - 5/16$ obtenido por un método variacional, el parámetro α es ajustado para obtener la energía mínima del orbital de acuerdo con mediciones experimentales. Éste método permite obtener una función de onda asociada al estado de mínima energía sin nodos y al aplicarlo al cálculo de las energías y funciones estacionarias a sistemas como litio neutro, Be^+ o C^{3+} . Éstos no tendrán un decaimiento al estado $1s^2$, describiendolos de manera apropiada.

Energías de los estados estacionarios $n = 2$ y 3 del átomo de litio

Como una prueba del pseudo potencial obtenido (3.21), resuelvo numéricamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo por medio del método de diferencias finitas, como lo he estado haciendo en este capítulo. Con $Z = 3$ en el pseudo potencial (3.21) obtengo las energías de los estados estacionarios de excitación $n = 2$ y 3 del átomo de litio. Dado que los detalles del método de diferencias finitas los he reportado en secciones previas, en la tabla 3.3 muestro los resultados obtenidos por nuestro proceso computacional notando que los resultados de las energías del átomo de litio tienen un buen acuerdo con los resultados teóricos reportados por Pindzola [18] y la base de datos de NIST [63].

| Estado | Lithium | | |
|--------|---------|----------|--------|
| | Propios | Pindzola | NIST |
| $2s$ | -5.383 | -5.38 | -5.392 |
| $2p$ | -3.479 | -3.12 | -3.544 |
| $3s$ | -2.014 | -2.01 | -2.018 |
| $3p$ | -1.538 | -1.41 | -1.557 |
| $3d$ | -1.511 | -1.51 | -1.513 |

Tabla 3.3: Valores de las energías (eV) de los estados estacionarios $n = 2$ y 3 del átomo de litio. Los resultados son obtenidos usando el método de Hartree-Fock y comparados con los resultados teóricos de Pindzola [18] y los valores reportados por la base de datos de NIST [63].

3.4.2. Efectos de la longitud de onda en los proceso de captura electrónica y excitación

Para estudiar los efectos de un pulso láser sobre los procesos de captura electrónica y excitación en el sistema de colisión $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$, tengo en cuenta que el núcleo $1s^2$ tiene una simetría esférica y el efecto del pulso láser es despreciable sobre estos estados permitiéndome hacer un análisis de estos procesos por medio de la solución numérica de la ESDT. Mis resultados los reporto calculando la sección eficaz de captura electrónica total y de los estados $n = 2$ y 3 , así como la sección eficaz de excitación de los estados $n = 2$ del sistema de colisión $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ utilizando el pseudo-potencial obtenido por el método de Hartree-Fock (3.21) para ambos casos.

Parámetros del pulso láser e implementación numérica

Para elegir el valor de la amplitud de campo eléctrico del pulso láser defino un potencial de interacción entre el electrón del blanco y el núcleo del proyectil con la asistencia del pulso láser como :

$$\mathbf{V} = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} \left[(Z_p - 2) + 2 \left(1 + Z_p^* |\vec{r} - \vec{R}(t)| \right) e^{-2Z_p^* |\vec{r} - \vec{R}(t)|} \right] + \xi(|\vec{r} - \vec{R}(t)|) + \vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t), \quad (3.22)$$

donde $|\vec{r} - \vec{R}(t)|$ es la distancia entre el electrón y el núcleo del proyectil y $\vec{R}(t)$ es la trayectoria del proyectil como se ha mencionado. Haciendo un desarrollo multipolar al potencial definido por la ecuación (3.22), este potencial \mathbf{V} se puede escribir como $\mathbf{V} \simeq -\vec{r} \cdot [\vec{\mathcal{E}}_c(t) + \vec{\mathcal{E}}(t)]$, donde :

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{E}}_c(t) \simeq & \frac{\vec{R}(t)}{|\vec{R}(t)|^3} \left[(Z_p - 2) + 2 \left(1 + Z_p^* \vec{R}(t) \right) e^{(-2Z_p^* \vec{R}(t))} \right] \\ & + 2Z_p^* \frac{\vec{R}(t)}{|\vec{R}(t)|^2} \left[1 - 2 \left(1 + Z_p^* \vec{R}(t) \right) e^{(-2Z_p^* \vec{R}(t))} \right]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Así, los efectos de interferencia son esperados cuando la magnitud de los dos dipolos son de igual magnitud. Para el sistema de colisión considerado en ésta sección, la carga $Z_p = 3$ y para un intervalo de parámetro de impacto de $1 < b < 10$ u.a., las intensidades del pulso láser son $10^{12}-10^{15}$ W/cm². Por lo que se elige un valor de amplitud de campo eléctrico de $\mathcal{E}_0 = 0.02$ a.u. (1.4×10^{13} W/cm²), debido a que estoy interesado en el análisis de un efecto notorio del pulso láser en los estados $n = 3$ del átomo de litio. El pulso láser tiene un ancho de $\tau = 25$ a.u. (1 fs) en FWHM, en secciones anteriores se ha demostrado el efecto de la fase (RCLP) en la asistencia del pulso láser, en la colisión considero un intervalo de $\phi \in [0, 2\pi]$ en pasos de $\Delta\phi = \pi/2$.

El primer valor de la longitud de onda es 80 nm debido a que la energía del fotón del pulso láser (15 eV) es mayor que la energía de ionización I_p del átomo de hidrógeno. El segundo valor es 200 nm ya que la

energía del fotón (6.2 eV) es cercana a la resonancia a la energía de ionización del átomo de litio $I_p = 5.3$ eV y lejana a una resonancia con el estado base del átomo de hidrógeno. Esta última longitud de onda corresponden al intervalo del ultra-violeta permitiendo minimizar los efecto de RCLP entre el pulso láser y el ión incidente [8]. El estudio semi-clásico es justificado por el parámetro de Keldysh :

$$\gamma = \frac{\omega}{\mathcal{E}_0} \sqrt{2I_p}, \quad (3.24)$$

para 80 nm obtengo $\gamma(\text{H}) = 6$ y $\gamma(\text{Li}) = 18$, mientras que para 180 nm el parámetro de Keldysh para el átomo de hidrógeno es $\gamma(\text{H}) = 3$ y para el átomo de litio $\gamma(\text{Li}) = 8$, los cuales están dentro del intervalo multi-fotón ($\gamma > 1$) justificando el cálculo de la probabilidad de captura electrónica y excitación para el caso con láser sin considerar la cuantización del campo eléctrico del pulso láser.

Para la implementación, la posición del proyectil comienza a un distancia z_0 tal que la amplitud del campo eléctrico del pulso láser es despreciable. El valor inicial del campo eléctrico es elegido tal que $\mathcal{E}(t)$ al 1% del valor máximo del pulso, i.e., $\mathcal{E}(t_{\min})/\mathcal{E}_0 = 0.01$, asegurando que al final de la dinámica el efecto Stark es mínimo. El ancho del pulso láser es $\tau = 1$ fs (25 u.a.) obteniendo un tiempo mínimo $t_{\min} = 53.3$ u.a. y dado que el ión Li^+ es colocado a $z_0 = -v_p t_{\min}$ a.u., el valor de la posición inicial del proyectil es $z_0 = -55$ a.u., para la energía de colisión 25 keV ($v_p = 1.0$ u.a.) la cual es el valor máximo del intervalo de energías de colisión (1 – 25 keV/uma) consideradas en este trabajo. La posición final del proyectil es $z_f = -60$ u.a., debido a que se desea tener un efecto Stark despreciable. Con las consideraciones anteriores y tomando en cuenta el radio del estado base del átomo de litio defino la caja numérica a utilizar como $[-10, 30]_x \times [-15, 15]_y \times [-65, 75]_z$. El parámetro de impacto b está sobre el eje x con un intervalo de $[0.2, 20]$ a un espaciamiento uniforme de $\Delta b = 0.2$ u.a.

Captura electrónica total y de los estados $n = 2$ y 3

En la Fig. 3.9 muestro los resultados numéricos de la probabilidad de captura electrónica total a 1 keV/amu. Para la asistencia del pulso láser en la colisión comparados con el caso libre, dichos resultados son multiplicados por el parámetro de impacto b en función del mismo. En la Fig. 3.9(I) reporto el efecto de la fase en la dinámica de la colisión para 80 nm de longitud de onda comparando con el caso sin láser haciendo notorio que el proceso de captura electrónica es mejorado a esta energía. Cabe resaltar que el efecto de la fase es mínimo a parámetros de impacto $b > 2$ u.a. En la figura 3.9(II) comparo mis resultados numéricos para el caso libre con valores obtenidos por la aproximación eikonal reportados por Errea et al. [19] en el cual se utilizan trayectorias rectilíneas para el proyectil, también con resultados de Cabrera-Trujillo et al. [20] obtenidos por medio de la aproximación no-adiabática dependiente del tiempo y trayectorias reales para

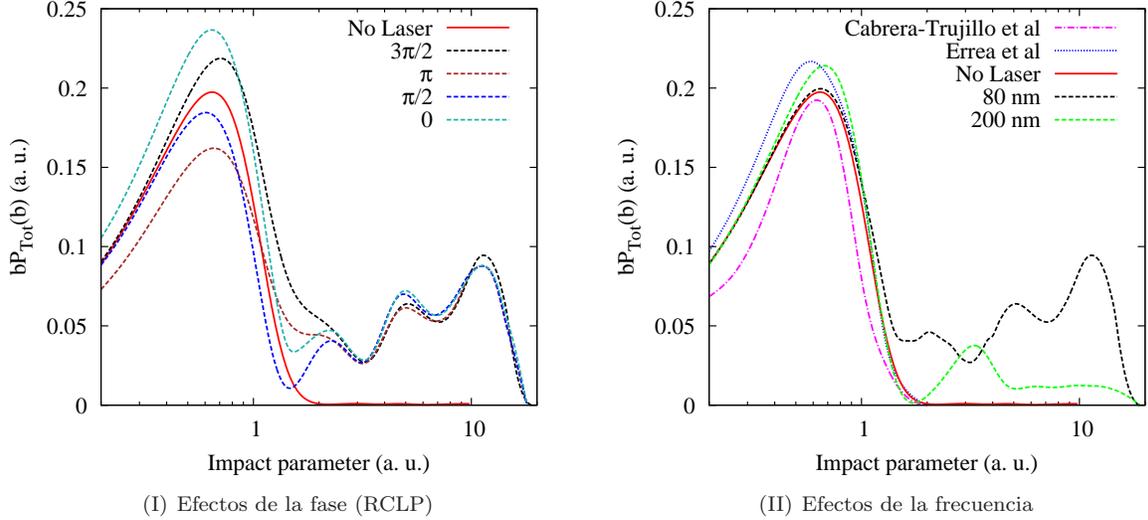
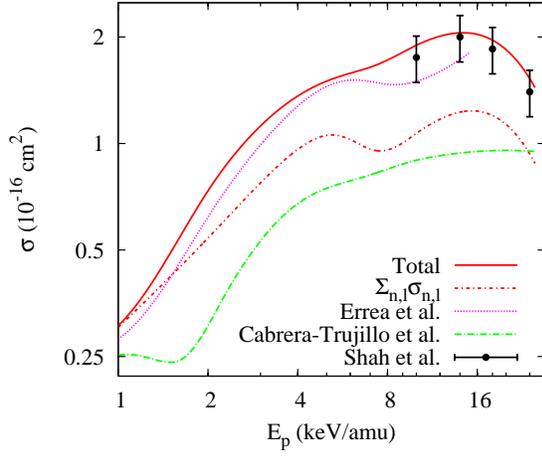


Figura 3.9: Probabilidad de captura electrónica total multiplicada por el parámetro de impacto b en función del mismo. En la Fig. 3.9(I) muestro el efecto de la fase para una longitud de onda de 80 nm, mientras que en la Fig. 3.9(II) comparo los resultados numéricos para el caso sin láser con los resultados del pulso láser promediados en la fase RCLP a una longitud de onda de 80 y 200 nm. También comparo con valores obtenidos por la aproximación eikonal reportado por Errea et al. [19] y por el método END de Cabrera-Trujillo et al. [20].

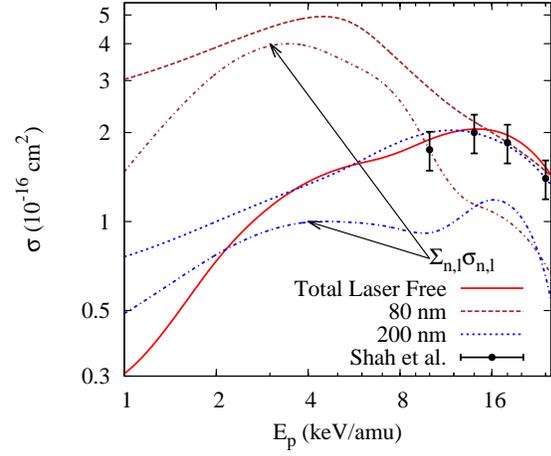
el proyectil. Para el caso sin láser, noto un buen acuerdo entre mis resultados numéricos y los reportados en la literatura. Sin embargo, a parámetros de impacto menores a la unidad $b < 1$ mis resultados tienen una discrepancia con los resultados de Cabrera-Trujillo et al. [20]. Esto se debe a la falta de trayectorias reales para el proyectil en mi método numérico. Para el caso con láser, reporto mis resultados haciendo un promedio sobre la fase del láser donde se tiene un efecto mínimo en el intervalo rotacional ¹ para ambas longitudes de onda. La probabilidad de captura electrónica total a 80 nm de longitud de onda es mejorada por un aumento de un factor de 10, para 200 nm de longitud de onda el efecto sobre la probabilidad de captura electrónica tiene un factor de incremento de 2. El pulso láser modifica notablemente los estados $3d$ y $3p$ debido a que la probabilidad de captura electrónica total es mayor a parámetros de impacto superior a 2 u.a., esto mejora el proceso de captura electrónica para ambas longitudes de onda.

En la Fig. 3.10(I) muestro los resultados numéricos del caso sin láser para la sección eficaz de captura electrónica total σ_{Tot} y presento la suma de la sección eficaz de captura electrónica para los estados $n = 2$ y 3 ($\sum_{n,l} \sigma_{n,l}$). En la misma figura comparo con resultados teóricos de Errea et al. [19] y Cabrera-Trujillo et al. [20], en especial noto un buen acuerdo entre mis resultados y las mediciones experimentales reportadas por Shah et al. [65]. Para altas energías, la suma de la sección eficaz de captura electrónica de los estados

¹El intervalo rotacional está definido en el intervalo de parámetro de impacto $0 - 1$ u.a, mientras que, el intervalo radial está definido para valores de parámetros de impacto mayores a una unidad atómica.



(I) Total sin láser

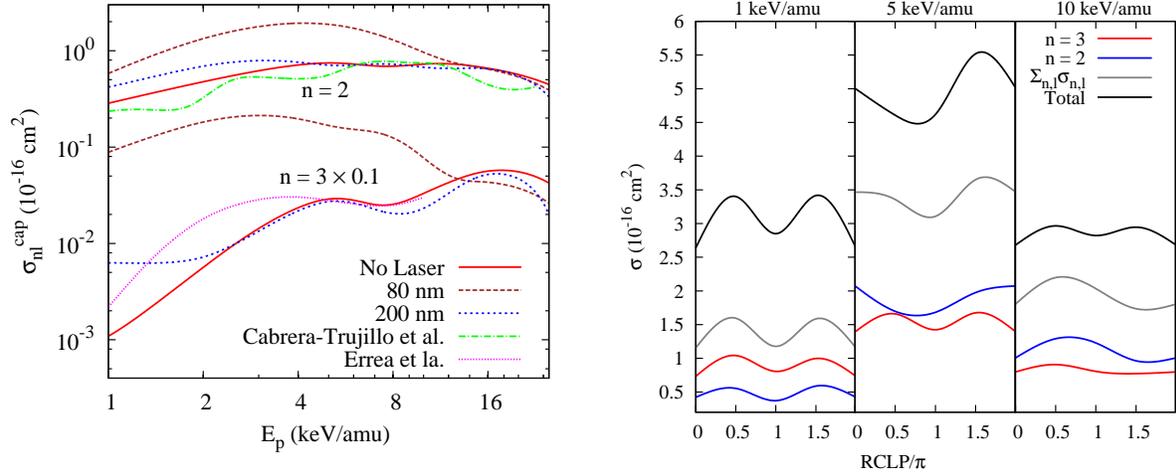


(II) Total con láser

Figura 3.10: Fig. 3.10(I) sección eficaz de captura electrónica total (σ_{Tot}) y suma de la sección eficaz de captura electrónica de los estados $n = 2$ y 3 ($\sum_n \phi_n$) en función de la energía del proyectil E_p . En esta misma figura comparo con resultados teóricos de Errea et al. [19] y Cabrera-Trujillo et al. [20], así como con resultados experimentales de Shah et al. [65]. Fig. 3.10(II) muestro los resultados del caso con láser para longitud de onda a 80 y 200 nm.

$n = 2$ y 3 necesita ser expandida a más estados de excitación del átomo de litio, mientras que a bajas energías la suma de los estados $n = 2$ y 3 es suficiente para representar la sección eficaz total. Para demostrar que el pulso láser mejora el proceso de captura electrónica en la Fig. 3.10(II) reporto la sección eficaz de captura electrónica total y de los estados $n = 2$ y 3 ($\sum_{n,l} \sigma_{n,l}$) a 80 y 200 nm de longitud de onda del pulso láser. Para la sección eficaz de captura electrónica total el aumento es de un factor de 10 a energías de colisión menores a 10 keV/uma. Al comparar mis resultados con las mediciones experimentales sin láser de Shah et al., concluyo que para energías mayores a 15 keV/uma el efecto del pulso láser es despreciable, ya que mis resultados están dentro de las barras de error. Para 200 nm de longitud de onda, el efecto del pulso láser es notorio únicamente a 1 keV/uma de la sección eficaz de captura electrónica total.

En la Fig. 3.11(I) muestro los resultados numéricos obtenidos de la sección eficaz de captura electrónica para los estados $n = 2$ y 3 del caso sin láser comparando con los obtenidos para 80 y 200 nm de longitud del pulso láser y con resultados teóricos de Cabrera-Trujillo et al. [20]. Para los estados $n = 2$ del átomo de litio, así como con Errea et al. [19] para los estados $n = 3$ del átomo de litio. La discrepancia entre mis resultados numéricos y las oscilaciones presentadas por los resultados reportados por Cabrera-Trujillo et al. se debe a que en mi investigación la trayectoria del proyectil la aproximo a una línea recta, mientras que los autores utilizan trayectorias reales para el ión incidente. Para el caso con láser el aumento de la probabilidad de captura electrónica es mayor para los estados $n = 3$ a energías menores de 5 keV/amu, esto se debe a



(I) Sección eficaz $n = 2$ y 3 para ambos casos

(II) Efectos de la fase

Figura 3.11: En la Fig. 3.11(I) reporto los efectos del pulso láser en el proceso de captura electrónica comparando los resultados de la asistencia del pulso láser para 80 y 200 nm con los obtenidos para el caso sin láser de la sección eficaz de captura electrónica de los estados $n = 2$ y 3 . Así como con los resultados teóricos de Errea et al. [19] y Cabrera-Trujillo et al. [20]. En la Fig. 3.11(II) comparo el efecto de la fase (RCLP) en el proceso de captura electrónica para las energías 1, 5 y 10 keV/amu a 80 nm de longitud de onda.

que el efecto Stark separó más canales a $n = 3$ que para $n = 2$ durante la dinámica de la colisión. En la Fig. 3.11(II) reporto el efecto de la fase del pulso láser en el proceso de captura electrónica a energías 1, 5 y 10 keV/amu para 80 nm de longitud de onda. Para 10 keV/amu el efecto de la fase del pulso láser es notorio para los estados $n = 2$, mientras que a 1 keV/amu, el efecto de la fase es similar para ambos estados. Como ya lo he mencionado, el pulso láser tiene un efecto mayor en los estados $n = 3$ a bajas energías. El proceso de captura electrónica total es aumentado gracias a la creación de nuevos canales debidos a efecto Stark. Para 200 nm de longitud de onda, la variación de la fase (RCLP) minimiza el efecto del pulso láser en la dinámica haciendolo prácticamente nulo.

Sección eficaz de excitación para los estados $n = 2$

En la Fig. 3.12(I) muestro los resultados numéricos de la sección eficaz de excitación para estados $n = 2$ a 80 y 200 nm de longitud de onda. Al comparar con los resultados obtenidos para el caso libre (los cuales son verificados con los resultados teóricos de Errea et al. [19]) reporto que a 80 nm de longitud de onda la sección eficaz de excitación se vé afectada y es más eficiente a energías de colisión menores a 10 keV/amu. También las oscilaciones presentadas por el caso libre desaparecen cuando el pulso láser es encendido. El proceso de excitación es mejorado a energías de colisión menores a 10 keV/amu para 80 nm de longitud de onda el pulso láser debido a que el valor de la energía del fotón es cercano al potencial de ionización

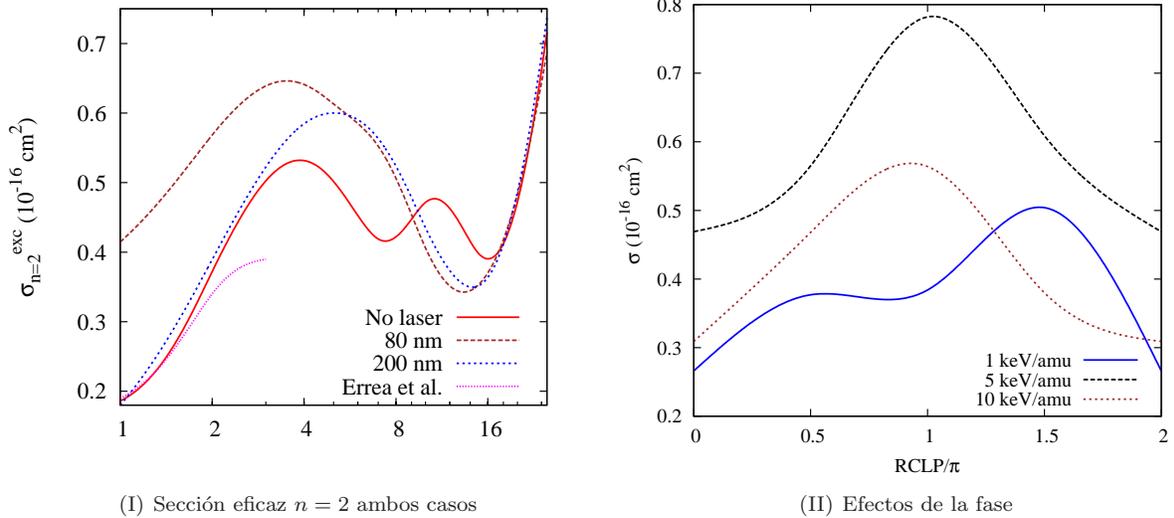


Figura 3.12: En la Fig. 3.12(I) reporto los efectos del pulso láser en el proceso de excitación comparando los resultados de la asistencia del pulso láser para 80 y 200 nm con los obtenidos para el caso sin láser de la sección eficaz de captura electrónica de los estados $n = 2$. También comparo con los resultados teóricos de Errea et al. [19]. En la Fig. 3.12(II) muestro el efecto de la fase (RCLP) en el proceso de captura electrónica para las energías 1, 5 y 10 keV/amu para una longitud de onda de 80 nm.

del átomo de hidrógeno, mientras que a 200 nm el efecto del pulso láser es mínimo. Finalmente en la Fig. 3.12(II) muestro el efecto de la fase (RCLP) en el proceso de excitación para las energías 1, 5 y 10 keV/amu a 80 nm de longitud de onda.

3.5. Modelo cualitativo

El modelo para la manipulación de configuraciones atómicas y moleculares por medio de un pulso láser es estudiado por Suominen et al. [66] y Bava et al. [67]. La probabilidad de captura electrónica puede ser analizada en un modelo de dos estados como resultado de la excitación inducida por el láser, así como la asistencia del láser en la colisión dentro de un modelo de dos curvas de potencial de acuerdo al trabajo de Suominen et al. Con estas suposiciones, la amplitud de probabilidad está dada por :

$$\frac{d}{dt}c_n = -ic_0V_{n_0} \exp \left[i \int_{-\infty}^0 (W_n - W_0) dt' \right], \quad (3.25)$$

donde c_n es la amplitud de probabilidad para los n estados excitados del blanco cuando su estado inicial es el estado base, con $W_i(R)$ como las curvas de potencial en función de la distancia internuclear y $V_{n_0}(R)$ es el elemento de matriz entre las dos curvas para el potencial de interacción del sistema de colisión ión-átomo. Éste elemento de matriz contiene el potencial de interacción responsable de la captura electrónica inducida

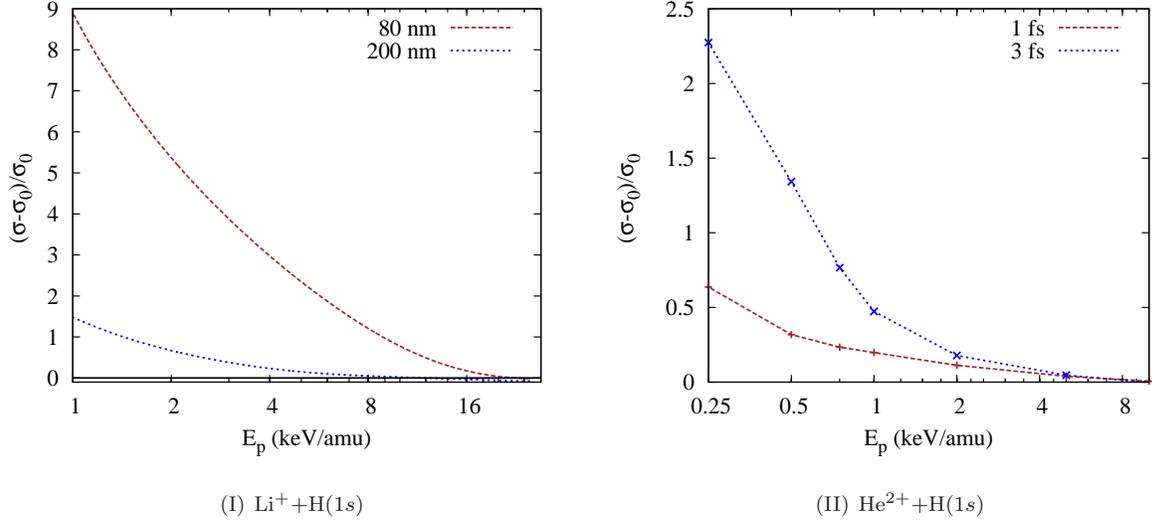


Figura 3.13: Resultados de la Ec. (3.26) mostrando la contribución del pulso láser para la sección eficaz de captura electrónica total, los cuales están promediados sobre la RCLP para los sistemas de colisión $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ (frecuencia del láser) y $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ (ancho del pulso láser).

por la colisión a una trayectoria dada $\vec{R}(t)$, describiendo el efecto del pulso láser en este proceso. $|c_n|^2$ es la probabilidad de captura electrónica y tiene tres términos: El término dominante que induce la captura electrónica debida a la colisión, el término de interferencia que acopla el láser a la dinámica de la colisión y un tercer término debido a la excitación inducida por el láser. Dependiendo de la curva de potencial elegida, el término correspondiente a la captura electrónica es el responsable de las oscilaciones de Stückelberg [54, 66]. De acuerdo a Bava et al. el último término será $|c_n|^2 \sim E_0^2 \tau^2 \exp[-(\Omega\tau)^2] \cos^2(\phi)$, donde Ω es la diferencia entre la frecuencia del pulso láser y la asociada al nivel de resonancia del átomo. Basado en la discusión previa, el análisis del efecto de un pulso láser en el proceso de captura electrónica lo realizo definiendo a :

$$\mathcal{A} = \frac{\sigma - \sigma_0}{\sigma_0}, \quad (3.26)$$

σ_0 y σ son las secciones eficaces en ausencia y asistencia del láser, respectivamente. Además \mathcal{A} está normalizado al caso libre. En la Fig. 3.13 muestro los resultados de la ec. (3.26) para la asistencia del pulso láser en los sistemas de colisión $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ y $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$. La contribución del pulso láser a 80 nm es notorio en el sistema $\text{Li}^+ + \text{H}(1s)$ a bajas energías como se muestra en la Fig. 3.13(I). Finalmente, en la Fig. 3.13(II) la contribución del pulso láser alcanza un pico a $\tau = 1/\Omega$ teniendo un mayor efecto en el proceso de captura electrónica a bajas energías.

4 Conclusiones generales

En la presente tesis, implementé el método de Crank-Nicolson para resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Obtuve una apropiada descripción de la función de onda asociada al electrón activo en los sistemas de colisión ión-átomo asistidos por láser.

Para el caso sin láser, tengo un buen acuerdo entre mis resultados de la sección eficaz de captura electrónica total y por estados con mediciones experimentales y cálculos teóricos reportados en la literatura, para los sistemas $H^+ + H(1s)$, $He^{2+} + H(1s)$ y $Li^+ + H(1s)$. Al aplicar el método de Hartree-Fock, en el estudio del sistema $Li^+ + H(1s)$, para encontrar un pseudo-potencial que describa un sistema de núcleo congelado. Pude demostrar que el método numérico puede ser aplicado al estudio de sistemas de colisión más complejos.

Para el caso con láser, encuentro una importante dependencia entre la variación de los parámetros del pulso láser (Intensidad, longitud de onda y fase) con la eficiencia de los procesos de captura electrónica y excitación a bajas energías del proyectil, para los tres sistemas de colisión. Mediante el modelo cualitativo, se demostró que la variación de la longitud de onda del pulso láser hace más eficiente y controla el proceso de captura electrónica, respecto a los demás parámetros del láser.

Finalmente, mi investigación en colisiones atómicas asistidas por láser puede ser extendido a un intervalo de bajas energías (i.e. ~ 100 eV) con la inclusión de trayectorias clásicas para el proyectil, y al cálculo de la sección de captura electrónica y excitación para estados $n > 3$ por medio del ambiente numérico de multiresolución adaptativa para simulación científica *MADNESS*. En el apéndice A muestro los primeros resultados del trabajo a futuro, describiendo *MADNESS* el cual utilizo para resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo debido a que tiene un excelente control de la precisión numérica; obtengo las trayectorias clásicas para el estudio del sistema $H^+ + H(2s)$ a 100 eV mediante la solución numérica de las ecuaciones de Hamilton clásicas. Éste trabajo lo estaré realizando en colaboración con Dr. Predrag S. Krstić de Stony Brook University y Dr. Remigio Cabrera Trujillo de Universidad Nacional Autónoma de México.

A *MADNESS* Ambiente numérico de multiresolución adaptativa para simulación científica

I can calculate the motion of heavenly bodies, but not the madness of people.

— Isaac Newton

MADNESS provee un ambiente de alto nivel para la solución de ecuaciones diferenciales en varias dimensiones, el cual es adaptativo, utiliza métodos veloces garantizando una buena precisión basada en un análisis de multi-resolución y novedosas representaciones de los operadores asociados a la ecuación de Laplace, calor y Schrödinger dependiente del tiempo. Existen tres componentes principales de MADNESS, a un bajo nivel de programación es un ambiente de programación paralelo a una gran escala que incrementa la productividad de programadores y la codificación, manteniendo una compatibilidad con herramientas de programación ya establecidas como *MPI* y *Global arrays*. La capacidad numérica es construida a partir de herramientas de paralelaje que proveen un ambiente de alto nivel para la solución numérica de problemas en varias dimensiones (i.e., una dimensión temporal y dimensiones asociadas a los grados de libertad del sistema 1 + 6+). Finalmente, MADNESS constituye una herramienta de gran interés en química, física atómica y molecular, ciencias de materiales y estructura nuclear [68].

A.1. Teoría

En MADNESS, los códigos son escritos en términos de funciones y operadores usando el lenguaje de programación C++. También, MADNESS utiliza una representación fundamental y una aproximación usando bases y mallas numéricas, las cuales se adaptan y refinan automáticamente para satisfacer la precisión que se requiera en la solución de un problema específico. Las operaciones numéricas pueden ser consideradas con precisión finita equivalente al cálculo matemático usado para expresar ecuaciones diferenciales de algún problema a resolver. Por ejemplo, la codificación de la ecuación de Schrödinger : [69]

$$\int \left(\frac{1}{2} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + V(x)|\psi(x)|^2 \right) dx, \quad (\text{A.1})$$

en una dimensión puede ser escrito en MADNESS como :

```
real_function_3d dpsidx = Dx(psi);
```

```
double result = 0.5*inner(dpsidx,dpsidx) + inner(V(x),psi*psi);
```

donde `psi` es una función tridimensional y `Dx(psi)` obtiene la derivada de la función `psi` en la dirección del eje x y el término `inner` realiza el producto interno de cualquier función. MADNESS puede aplicar operadores diferenciales e integrales, también, puede construir operadores de convolución con funciones de Green importantes en física (e.g. Coulomb, Helmholtz de estados ligados, propagador de partícula libre). Así, muchos problemas físicos pueden ser expresados por operadores integrales para obtener soluciones de un modo sencillo y con una mayor precisión. Finalmente, MADNESS otorga soluciones de alta precisión, es eficiente en el computo de varias dimensiones y utiliza computadores conectadas en paralelo a gran escala. Particularmente, MADNESS presenta problemas cuando los sistemas a resolver necesitan condiciones a la fronteras complicados, las funciones solución son altamente oscilantes o solamente necesitan una baja precisión. Debido a estas complicaciones, se recomienda el uso de herramientas apropiadas para la solución de dichos sistemas. Para comprender la teoría detrás de la aproximación de multiresolución en la cual está basado MADNESS se recomienda la lectura del trabajos de Alpert et al. [71], mientras que en el trabajo de Fann et al. [68] se dá una introducción comprensiva de MADNESS a la comunidad científica computacional.

Potencial modelo

En mi caso, utilizo MADNESS para el estudio de colisiones atómicas asistidas por láser con el objetivo de tener una precisión alta en las soluciones y poder describir los procesos de captura electrónica, excitación e ionización implicados en los sistemas de colisión ión-átomo. Por tal motivo, necesito definir el potencial modelo utilizado en MADNESS que representa un potencial nuclear de carga Z tipo Coulomb, el cual es utilizado en el estudio de colisión ión-átomo como [68, 70] :

$$V_{\text{modelo}}(r) = \frac{\text{erf}(r)}{r} + \frac{e^{-r^2}}{\sqrt{\pi}}, \quad (\text{A.2})$$

y definiendo a la profundidad del potencial modelo como :

$$V_{\xi}(r) = \frac{Z}{\xi} V_{\text{modelo}}\left(\frac{r}{\xi}\right), \quad (\text{A.3})$$

en MADNESS puedo controlar la componente de momento líneal máximo permitido en la función de onda por un parámetro de corte ξ , definido de manera empírica. El potencial modelo (con $\xi = 0.2$) tiene un buen acuerdo con el potencial de Coulomb y buena precisión para una distancia radial $r > 2$, mientras que para

valores de $\xi \ll 1$ se obtiene el potencial de Coulomb con una mejor precisión, es decir,

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} V_\xi(r) = -\frac{Z}{r}. \quad (\text{A.4})$$

En MADNESS, la simulación comienza con un estado estacionario del potencial V_ξ , el estado estacionario inicial $\psi(r)$ para un potencial de Coulomb es relajado dentro de un eigen-estado del potencial modelo $V_\xi(r)$ a través de solución de la siguiente ecuación :

$$\psi(r) = \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - E \right)^{-1} V_\xi(r)\psi(r). \quad (\text{A.5})$$

En mi caso, puedo considerar estados estacionarios del átomo de hidrógeno como el estado $1s$ ó $2s$, ya que los utilizaré como blanco para el estudio de colisiones atómicas asistida por láser.

Evolución temporal

La evolución temporal de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT) (A.1) es realizada por medio de un propagador de cuarto orden con un corrector de gradiente reportado por Chin and Chen [73]. Así, el operador de evolución temporal es expresado por :

$$U(dt, t) = e^{-\frac{i}{6}\hat{V}(t+dt)dt} e^{-\frac{i}{2}\hat{T}dt} e^{-\frac{2i}{3}\hat{V}(t+\frac{dt}{2})dt} e^{-\frac{i}{2}\hat{T}dt} e^{-\frac{i}{6}\hat{V}(t)dt} + O(dt^5). \quad (\text{A.6})$$

Este operador de evolución temporal reduce el error numérico y el tiempo de computo, también, permite una propagación a tiempos bastante largos debido a su precisión a segundo orden (Trotter splitting [74]). La función de Green de una partícula libre para la ESDT en D dimensiones espacial es dada por :

$$G_0 = (2\pi i dt)^{-D/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2i dt}\right) \quad (\text{A.7})$$

y es aplicada a la función de onda total para ser propagada en el tiempo.

La base espectral de elementos discontinua es una alternativa conveniente para los métodos de elemento finito y diferencias finitas y su aplicación a la construcción de operadores diferenciales e integrales [71]. Sin embargo, la base adaptativa, discontinua y polinomial inevitablemente incluye componentes numéricos altamente oscilantes, aún cuando se representan funciones suaves y la intensidad del límite de G_0 a éste ruido numérico preserva la integrabilidad de la función de onda total. Para incrementar el tamaño de la función de onda total se requiere que las variaciones espaciales sean refinadas y la ESDT está limitada por

una condición *Courant-Friedrich-Lewy-like* [75] ($dt \propto \Delta x^2$) con un paso temporal crítico definido como

$$dt_{\text{crit}} \propto \xi^2, \quad (\text{A.8})$$

la red numérica es controlada por ξ y suaviza los parámetros del potencial. La aplicación de la función de Green para resolver la ESDT es usada por MADNESS como una distribución de memoria en paralelo, reemplazando restricciones de memoria debidos a la comunicación entre ancho de banda, el límite de banda es controlado por el parámetro de corte ξ , el cual confina la singularidad del potencial de Coulomb removiendo errores por la propagación temporal. Los detalles sobre la elección de la parametrización del límite de banda efectivo y la precisa aplicación de su operador oscilatorio son encontrados en las notas de implementación de MADNESS [69]

A.2. Estudio numérico del sistema $\text{H}^+ + \text{H}(1s)$ con trayectorias clásicas para el proyectil

La función de onda total $\Psi(\vec{r}, t)$ describe la dinámica del sistema de colisión ión-átomo y es obtenida por solución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT), y la aplicación del método de parámetro de impacto. Expandiendo los códigos existentes en MADNESS, que resuelven la ESDT para el estudio de fotoionización [70] al cálculo numérico de la sección eficaz total y por estados de los procesos de captura electrónica, excitación e ionización de sistemas de colisión ión-átomo, estudio el sistema de colisión $\text{H}^+ + \text{H}(2s) \rightarrow \text{H}(n = 2, \dots, 6) + \text{H}^+(n = 2, \dots, 6)$ con la ayuda del siguiente Hamiltoniano que describe la dinámica del electrón :

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{|\vec{r}|} - \frac{Z_p}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|}, \quad (\text{A.9})$$

donde el primer término corresponde a la energía cinética del electrón, el segundo término es el potencial de interacción entre el electrón y el blanco, y el tercer término es el potencial de interacción entre el electrón y el proyectil. En el tercer término se define la trayectoria del proyectil como $R(t)$, la cual es obtenida a partir de la solución numérica de las ecuaciones de Hamilton siguiendo la curva de energía de potencial $1s\sigma$ de la molécula $(\text{HH})^+$ para describir la dinámica entre el proyectil y el blanco (protón-protón) como :

$$\Phi(R) = \epsilon(R) + \frac{1}{R(t)}; \quad \frac{d}{dt}R_\mu(t) = \frac{\partial \mathcal{H}(t)}{\partial P_\mu(t)} \quad \frac{d}{dt}P_\mu(t) = -\frac{\partial \Phi(R)}{\partial R_\mu(t)} \quad (\text{A.10})$$

donde $\epsilon(R)$ es la curva de energía de potencial de la molécula $(\text{HH})^+$, m_p es la masa reducida del sistema y $R(t) = \sqrt{R_x(t)^2 + R_y(t)^2 + R_z(t)^2}$ con $\mu = x, y, z$ como la componente de la posición o momento lineal.

Implementación numérica

Como una prueba del ambiente MADNESS, resuelvo el sistema de colisión $\text{H}^+ + \text{H}(1s)$ a 1 keV/amu para comparar los resultados de la probabilidad de captura electrónica total y por estados, obtenidos por MADNESS con trayectorias clásicas, con los resultados obtenidos por el método de diferencias finitas y la aproximación en línea recta [53]. Considerando los valores de la caja numérica utilizados en el capítulo 3 y las condiciones iniciales para la solución numérica de las ec. (A.10), las cuales son: para la posición $R_x(0) = b$, donde b es el parámetro de impacto, $R_y(0) = 0$ y $R_z(0) = -z_0$, donde z_0 es la posición inicial del proyectil en la dirección del eje z , mientras que las condiciones iniciales para el momento son: $P_x(0) = P_y(0) = 0$ y $P_z(0) = m_p v_p$ donde m_p es la masa reducida del sistema y v_p la velocidad del proyectil. La probabilidad de captura electrónica (ó excitación) es calculada mediante la proyección de los estados estacionarios del átomo de hidrógeno en la función de onda total al final de la dinámica. Los estados estacionarios hidrogenóides están definidos en MADNESS, por lo que puedo calcular la probabilidad de captura electrónica y su correspondiente sección eficaz para un número de estados superior al método de diferencias finitas de la siguiente forma :

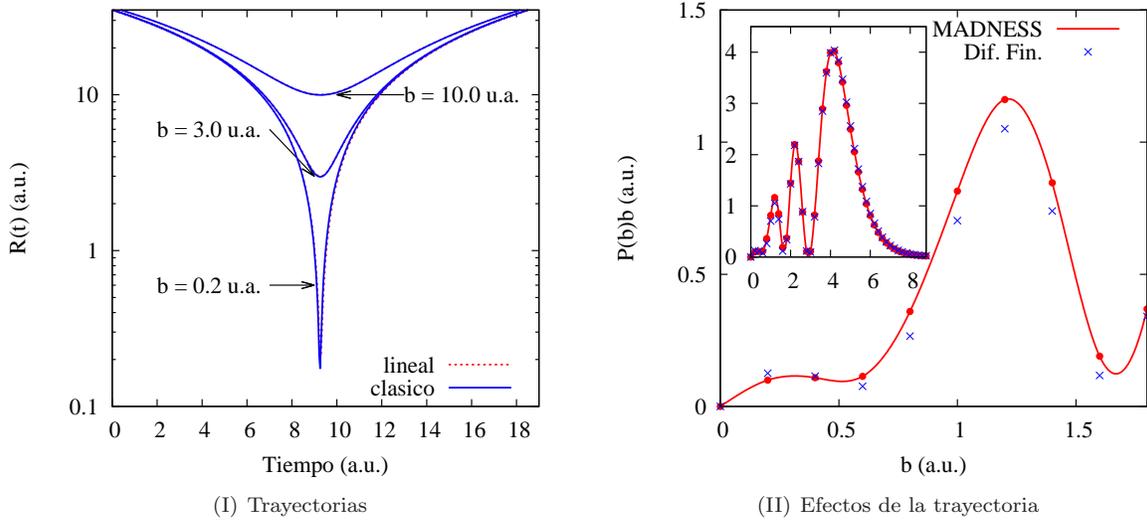


Figura A.1: Fig. A.1(I) comparo la trayectoria en línea recta con la trayectoria obtenida por solución numérica de las ecuaciones (A.10). Fig. A.1(II) muestran los efectos de la trayectoria del proyectil en la probabilidad de captura electrónica total a 1 keV.

$$P_{nl} = \sum_m \left| \int_V \phi_{nlm}^* \Psi(t) dV \right|^2, \quad \sigma_{nl} = 2\pi \int_0^\infty b P_{nl}(b) db, \quad (\text{A.11})$$

donde P_{nl} es la probabilidad de captura electrónica o excitación, σ_{nl} su correspondiente sección eficaz, ϕ_{ns} son los estados estacionarios hidrogenoídes definidos en MADNESS con la posibilidad de calcular la probabilidad de captura electrónica ó excitación de los estados mayor a $n = 6$. En la Fig. A.1(I) muestro la diferencia entre la trayectoria en línea recta y la trayectoria obtenida por solución numérica de las ecuaciones (A.10). El cambio es notorio a parámetros de impacto menores a la unidad, mientras que a parámetros de impacto en la región radial la trayectoria léneal y la clásica son iguales. En la Fig. A.1(II) comparo la probabilidad de captura electrónica total obtenidos por MADNESS con trayectorias clásicas para el proyectil, con los obtenidos por el método de diferencias finitas con trayectorias en línea recta a 1 keV. El efecto de la trayectoria es mayor en la región rotacional, ya que los datos obtenidos por MADNESS son diferentes a los obtenidos por el método de diferencias finitas [78]. Con éste método y aproximación para la trayectoria del proyectil mejoro la precisión de los resultados de la captura electrónica por estados.

En la tabla A.1, reporto los resultados obtenidos para la sección eficaz de captura electrónica y excitación por estados a 25 keV (en unidades de 10^{-16} cm^2) obtenidos por el ambiente MADNESS [78] para garantizar su buena precisión al ser comparados con los resultados numéricos obtenidos por el método de diferencias finitas a una trayectoria cercana a una línea recta. También, los resultados de MADNESS son comparados con resultados teóricos de Winter [42], así como con mediciones experimentales de Morgan et al. [47] para los estados $n = 2$, de Hughes et al. [76] para el estado $3s$ y con la sección eficaz total de Melchert et al. [77], notando un buen acuerdo con los resultados teóricos y en especial con las mediciones experimentales.

| States | Captura electrónica | | | | Excitación | | | |
|--------|---------------------|-----------|--------|--------|------------|-----------|--------|--------|
| | MADNESS | Dif. Fin. | Winter | Exp | MADNESS | Dif. Fin. | Winter | Exp |
| 1s | 3.05251 | 2.985 | 3.048 | — | — | — | — | — |
| 2s | 0.39182 | 0.397 | 0.397 | 0.3094 | 0.11698 | 0.207 | 0.163 | 0.1191 |
| 2p | 0.13983 | 0.134 | 0.173 | 0.1065 | 0.47395 | 0.236 | 0.478 | 0.4520 |
| 3s | 0.09994 | 0.017 | 0.098 | 0.0794 | 0.02450 | — | — | — |
| 3p | 0.03717 | 0.096 | 0.054 | — | 0.06704 | — | 0.072 | — |
| 3d | 0.00814 | 0.041 | 0.007 | — | 0.05124 | — | — | — |
| Total | 3.72941 | 3.820 | 3.942 | 3.557 | | | | |

Tabla A.1: Sección eficaz de captura electrónica y excitación de los estados $n = 1, 2, 3$ (en unidades de 10^{-16} cm^2) obtenidos por MADNESS a una energía de 25 keV [78]. Estos resultados son comparados por los resultados numéricos obtenidos por medio del método de diferencias finitas, teóricos de Winter [42], así como con mediciones experimentales de Morgan et al. [47] para los estados $n = 2$, de Hughes et al. [76] para los estados $3s$ y con la sección eficaz total de Melchert et al [77]

Bibliografía

- [1] R. C. Isler y E. C. Crume, Phys. Rev. Lett. **41**, 1296 (1978).
- [2] L. Zhenzhong, C. Deying, F. Rongwei y Yuanqin Xia, Appl. Phys. Lett. **100**, 014105 (2012).
- [3] G. Sansone et al., Nature **465**, 763 (2010)
- [4] A. Stingl, M. Lenzner, Ch. Spielmann, F. Krausz y R. Szipöcs, Opt. Lett. **20**, 602 (1995).
- [5] K. A. Brueckner y J. Siebe, Rev. Mod. Phys. **46**, 325 (1974).
- [6] X. J. Liu, L. Liu, J. G. Wang, Y. Z. Qu y B. J. Xiao, Physics of Plasmas **18**, 103301 (2011).
- [7] Y. P. Hsu, M. Kimura y R. E. Olson, Phys. Rev. A **31**, 576 (1985) .
- [8] L. B. Madsen, J. P. Hansen y L. Kocbach, Phys. Rev. Lett. **89**, 093202 (2002).
- [9] T. Kirchner, Phys. Rev. A **69**, 063412 (2004).
- [10] T. Niederhausen y T. Uwe, Phys. Rev. A **73**, 041404 (2006).
- [11] F. Anis, V. Roudnev, R. Cabrera-Trujillo y B. Esry, Phys. Rev. A **73**, 043414 (2006).
- [12] G. Ferrante, L. Lo Casico y B. Spagnolo, Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics **14**, 3961 (1981).
- [13] T. Kirchner, Phys. Rev. Lett. **89**, 093203, (2002).
- [14] Y. Zhang, H. Boehmer, W. W. Heidbrink, R. McWilliams, D. Leneman, S. Vincena, Review of Scientific Instruments **78**, 1 (2007).
- [15] J. C. Schmitt et al., Journal of Nuclear Materials: Proceedings of the 20th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices. **438**, S1096 (2013).
- [16] D. Mueller et al., Journal of Vacuum Science & Technology A **9**, 2713 (1991).
- [17] M.L. Apicella, G. Mazzitelli, V. Pericoli Ridolfini, V. Lazarev, A. Alekseyev, A. Vertkov and R. Zagórski, Journal of Nuclear Materials: Plasma-Surface Interactions-17 **363**, 1346 (2007).
- [18] M. S. Pindzola, Phys. Rev. A **60**, 3764 (1999).
- [19] L. F. Errea, F. Guzmán, L. Méndez, B. Pons y A. Riera, Phys. Rev. A **77**, 012706 (2008).
- [20] R. Cabrera-Trujillo, I. Alvarez, C. Cisneros, A. Guerrero y J. C. Poveda, Phys. Rev. A **82**, 022718 (2010).
- [21] P. S. Krstić y D. R. Schultz, Physics of Plasmas **16**, 053503 (2009).
- [22] E. U. Condon y P. M. Morse, Rev. Mod. Phys. **3**, 43 (1931).
- [23] K. Ensslin, Phys. Rev. A **2**, 587 (2006).
- [24] Y. Meir, K. Hirose y N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **89**, 196802 (2002).

- [25] M. K. Achuthan y K. N. Bhat *Fundamentals of semiconductor devices*, McGraw-Hill Publishing Co., 2007.
- [26] R. Farrow, *Molecular Beam Epitaxy-Applications to Key Materials*, Noyes Publishing 1995.
- [27] R. Cabrera-Trujillo y F. J. Domínguez-Gutiérrez, *Radiation Effects and Defects in Solids* **167**, 464 (2012).
- [28] J. Crank y P. Nicolson, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **43**, 50 (1947).
- [29] A. Bandrauk y H. Shen, *Journal of Chemical Physics* **99**, 1185 (1993).
- [30] A. S. Householder, *Principles of Numerical Analysis*, Dover Publications 1981.
- [31] A. Goldberg, H. M. Schey y J. L. Schwartz, *American Journal of Physics* **35**, 177 (1967).
- [32] A. L. Pérez Prieto, S. Brouard y J. G. Muga, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**, 2371 (2003).
- [33] N. Zettili, *Quantum mechanics, concepts and applications*, Wiley and song inc 2003, 3rd edition.
- [34] J.J. Sakurai y J. Napolitano, *Modern quantum mechanics*, Person Education 2011.
- [35] R. L. Mills, *J. of Hydrogen Energy* **25**, 1171 (2000).
- [36] E. Ley-Koo y R. M. G. García-Castelan, *J. of Phys. A* **24**, 1481 (1991).
- [37] R. Méndez-Fragoso y E. Ley-Koo, *Int. Jour. of Quant. Chem.* **11**, 2882 (2011).
- [38] J. D. Levine, *Phys. Rev.* **140**, 2A (1965).
- [39] F. L. Pilar, *Elementary quantum chemistry*, McGraw-Hill Publishing Company 1990, 2nd edition.
- [40] D. Storm, *Phys. Rev. A* **8**, 1765 (1973).
- [41] H. J. Ludde y R. M. Dreizler, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **15**, 2703 (1982).
- [42] T. G. Winter, *Phys. Rev. A* **80**, 032701 (2009).
- [43] M. W. Gealy y B. Van Zyl, *Phys. Rev. A* **36**, 3091 (1987).
- [44] G. W. McClure, *Phys. Rev.* **148**, 47 (1966).
- [45] A. Kolakowska, M. S. Pindzola, F. Robicheaux, D. R. Schultz y J. C. Wells, *Phys. Rev. A* **58**, 2872 (1998).
- [46] W. Fritsch y C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **26**, 762 (1982).
- [47] T. J. Morgan, J. Geddes y H. B. Gilbody, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **6**, 2118 (1973).
- [48] C. F. Barnett, Oak Ridge National Laboratory Report **6068** (1990).
- [49] R. K. Janev y P. S. Krstić, *Phys. Rev. A* **46**, 5554 (1992).
- [50] M. B. Shah, D. S. Elliott y H. B. Gilbody, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **20**, 2481 (1987).
- [51] J. E. Bayfield, *Phys. Rev.* **185**, 105 (1969).
- [52] F. J. Domínguez-Gutiérrez y R. Cabrera-Trujillo, *Journal of Physics: Conference Series* **512**, 012033 (2014).

- [53] F. J. Domínguez-Gutiérrez y R. Cabrera-Trujillo, *The European Physical Journal D* **68**, 226 (2014).
- [54] N. Stolterfoht, R. Cabrera-Trujillo, P. S. Krstić, Y. Öhrn, E. Deumens y J. R. Sabin, *International Journal of Quantum Chemistry* **109**, 3063 (2009).
- [55] T. Minami, T. G. Lee, M. S. Pindzola y D. R. Schultz, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **41**, 135201 (2008).
- [56] R. Hoekstra, F. J. de Heer y R. Morgenstern, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **24**, 4025 (1991).
- [57] N. Toshima, *Phys. Rev. A* **50**, 3940 (1994).
- [58] C. C. Havener, R. Rejoub, P. S. Krstić y A. C. H. Smith, *Phys. Rev. A* **71**, 042707 (2005).
- [59] M. B. Shah y H. B. Gilbody, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **11**, 121 (1978).
- [60] W. L. Nutt, R. W. McCullough, K. Brady, M. B. Shah y H. B. Gilbody, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **11**, 1457 (1978).
- [61] D. Ćirić, D. Dijkkamp, E. Vlieg y F. J. de Heer, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **18**, 4745 (1985).
- [62] M. Protopapas, C. H. Keitel y P. L. Knight, *Reports on Progress in Physics* **60**, 389 (1997).
- [63] Ralchenko, Yu, Kramida, A. E. Reader y el grupo NIST ASD, *NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0)*, <http://physics.nist.gov/asd>; [2014, April 11].
- [64] F. J. Domínguez-Gutiérrez y R. Cabrera-Trujillo, *Large increase in the electron capture and excitation cross-section for Li^+ colliding with atomic H under UV laser assistance*, enviado a *J. Phys B*.
- [65] M. B. Shah, T. V. Goffe y H. B. Gilbody, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **11**, L233 (1978).
- [66] K. A. Suominen, B. M. Garraway y S. Stenholm, *Phys. Rev. A* **45**, 3060 (1992).
- [67] E. Bava, A. Godone, C. Novero y H. O. Di Rocco, *Phys. Rev. A* **45**, 1967 (1992).
- [68] G. Fann, G. Beylkin, R. Harrison y K. Jordan, *IBM Journal of Research and Development* **48**, 161 (2004).
- [69] R. Harrison, *Implementation Notes*, <http://code.google.com/p/m-a-d-n-e-s-s/downloads/list>; [2011].
- [70] N. Vence, R. Harrison y P.S. Krstić, *Phys. Rev. A* **85**, 033403 (2012).
- [71] B. Alpert, G. Beylkin, D. Gines y L. Vozovoi, *Journal of Computational Physics* **182**, 149 (2002).
- [72] A. N. Grum-Grzhimailo, B. Abeln, K. Bartschat, D. Weflen T. Urness, *Phys. Rev. A* **81**, 043408 (2010).
- [73] S. Chin y C. Chen, *J. Chem. Phys.* **114**, 7338 (2001).
- [74] D. J. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective*, University Science Book, 2007.
- [75] K. W. Morton y D. F. Mayers, *Numerical Solution of Partial Differential Equations*, Cambridge University Press, 2005.
- [76] M.P. Hughes, J. Geddes, R.W. McCullough y H.B. Gilbody, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **79** 50 (1993).
- [77] F. Melchert, S. Krudener, R. Schulze, S. Petri, S. Pfaff y E. Salzborn, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **28**, L355 (1995).
- [78] F. J. Domínguez-Gutiérrez, R. Cabrera-Trujillo y Predrag S. Krstić, *Multi-resolution approach for laser modified collisions of atoms and ions*, aceptado en *Advances in Quantum Chemistry*, Vol. **73** (2015).