



UFRJ

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DEPENDENTE
DO TEMPO EM TRÊS DIMENSÕES PARA APLICAÇÃO EM COLISÕES
ÍON-ÁTOMO

Katia Souza d'Almeida

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Orientadora: Ginette Jalbert de Castro Faria

Co-orientador: Paulo Carrilho Soares Filho

Rio de Janeiro

22 de fevereiro de 2005.

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

D148 d'Almeida, Katia Souza

Solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo em três dimensões para aplicação em colisões íon-átomo/
Katia Souza d'Almeida - Rio de Janeiro, UFRJ / IF, 2005

xii, 46f.: il.;31cm.

Orientadora: Profa. Ginette Jalbert de Castro faria

Dissertação (mestrado) - UFRJ / Instituto de Física / Programa de Pós-graduação em Física, 2005.

Referências Bibliográficas: f.43-46.

1. Colisões atômicas. 2. LTDSE. 3. Excitação 4. Hidrogênio. I. de Castro Faria, Ginette Jalbert. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Programa de Pós-graduação em Física. III. Solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo em três dimensões para aplicação em colisões íon-átomo.

RESUMO

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DEPENDENTE DO TEMPO EM TRÊS DIMENSÕES PARA APLICAÇÃO EM COLISÕES ÍON-ÁTOMO

Katia Souza d'Almeida

Profa. Ginette Jalbert de Castro Faria

Prof. Paulo Carrilho Soares Filho

Resumo da Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-graduação em Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física)

Colisões atômicas vêm sendo investigadas teórica e experimentalmente há muitos anos. Essas pesquisas fomentaram uma vasta gama de aplicações que atingem áreas como Física de Plasma, Biofísica, Física de Materiais e Física de Atmosferas Planetárias. Além disto, tais estudos contribuíram consideravelmente para melhorar a nossa compreensão de sistemas de muitos corpos que são governados pelas leis da Mecânica Quântica.

Existem diversos modelos teóricos que calculam seções de choque para os processos que ocorrem durante a interação próton - átomo de hidrogênio (excitação, transferência de carga e ionização). Tais métodos possuem méritos e limitações particulares. O desenvolvimento de ferramentas computacionais mais potentes trouxe grandes vantagens para as chamadas *técnicas de rede*. Inicialmente problemas tri - dimensionais eram reduzidos a duas dimensões, assumindo-se uma simetria ao longo do eixo internuclear. Atualmente é possível obter soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo numa rede tri - dimensional. Este método, conhecido como *Lattice Time Dependent Schrödinger Equation Method* (LTDSE), além de gerar uma descrição completa da dinâmica do elétron durante o processo de colisão, também fornece seções de choque acuradas para uma larga faixa de energias.

Neste trabalho estudamos processos de excitação que ocorrem durante colisões próton - hidrogênio utilizando o método LTDSE. Todo o desenvolvimento numérico foi feito por nós e uma das vantagens do programa é resolver a equação de Schrödinger usando um método iterativo, ao invés de usar a técnica de inversão de matrizes. Foram feitos diversos

testes para definir os melhores parâmetros para os cálculos. Estudamos o tamanho da malha espacial e temporal para colisões de 10 keV e 100 keV. Acompanhamos a evolução temporal da função de onda analisando a dinâmica eletrônica durante o processo de colisão. Estudamos como varia a probabilidade de excitação para os estados 2s, 2p e 3s de acordo com o parâmetro de impacto utilizado e calculamos as seções de choque de excitação para estes mesmos estados. Por fim, comparamos os resultados obtidos com essa técnica aos resultados já existentes na literatura.

Palavras-chave: Colisões atômicas, LTDSE, Excitação, Hidrogênio.

Rio de Janeiro

22 de fevereiro de 2005

ABSTRACT

NUMERICAL SOLUTION OF THE TIME DEPENDENT SCHRÖDINGER EQUATION IN TRI-DIMENSIONS FOR APPLICATIONS IN COLLISIONS ÍON-ATOM

Katia Souza d'Almeida

Profa. Ginette Jalbert de Castro Faria

Prof. Paulo Carrilho Soares Filho

Abstract da Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-graduação em Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física)

Atomic collisions have been studied both theoretically and experimentally for many years. Such researches fostered a wealth of applications spanning different areas such as laboratory plasma research, biophysics, material physics and planetary atmospheric science. Moreover, the subject has contributed considerably to our general understanding of interacting few-body systems which are governed by the laws of quantum mechanics.

There are many theoretical models that calculate atomic cross sections for the processes that occur during interaction próton - hydrogen atom (excitation, charge transfer and ionization). These methods have significant merits and particular limitations.

Substantial advances in computer technology have brought advantages for the lattice TDSE method. At the beginning tri - dimensional problems were reduced to two dimensions assuming a symmetry along the internuclear axis. Nowadays it is possible to obtain solutions of the time dependent Schrodinger equation for a tri - dimensional lattice. This method, known as *Lattice Time Dependent Schrödinger Equation Method*(LTDSE), besides giving a complete description of the electron dynamics during the collision process, also yields accurate cross sections for a wide energy range.

In this work we study excitation processes that occur in próton - hydrogen collisions with the LTDSE method. The whole numerical program was developed by us and one of its advantages is to solve the time dependent Schrodinger equation with an iterative method, instead of using the matrix inversion technique.

Many test were performed in order to choose the best parameters for the calculations. We studied both the spacial and temporal lattice sizes for 10 and 100 keV collisions. We followed the time evolution of the electronic wave function during the collision processes. We also studied how the excitation probabilities change for the 2s, 2p and 3s states according to the impact parameter and calculated the excitation cross sections for these states. At the end, we compared our results with those found in literature.

Key-words: Atomic Collisions, LTDSE, Excitation, Hydrogen.

Rio de Janeiro

22 de fevereiro de 2005

Para meus pais.

AGRADECIMENTOS

Essa tese é o resultado de dias e dias de conversas, pesquisas, discussões, leituras, muita programação, análises e, principalmente, fruto de uma convivência excelente.

Agradeço a Ginette pelo apoio, incentivo, carinho e, principalmente, pela oportunidade de poder aprender tanto trabalhando ao seu lado. Ao Paulinho o meu muito obrigado pela confiança com que me permitiu mexer em seu programa, transmitindo-me, com constante bom humor, conhecimentos importantes para a elaboração deste trabalho.

Quero agradecer aos meus amigos Cristina, Juliana e Rodrigo pela contínua ajuda e amizade. É muito bom ter pessoas tão especiais ao lado, sempre incentivando, ajudando e, claro, sempre brincando, o que torna os dias muito mais leves e fáceis de se levar. Em especial um agradecimento ao Fábio pela permanente colaboração e ajuda com problemas no computador, na disponibilidade para corrigir textos e pelo constante incentivo. Agradeço também a Wânia pelo intenso apoio e interesse com que acompanhou o desenvolvimento desta tese e a todos do LaCAM e pelo auxílio e compreensão.

Corro o risco de esquecer muitos nomes, mas quero agradecer ao Franciole, Marcos Gaspar, Nelson Velho, Felipe Coelho, Curt, César e todos os que, de uma maneira ou de outra, estão sempre presentes, trazendo alegria, apoio e incentivo.

Ao professor Frederico Prudente quero agradecer pelas preciosas sugestões que me foram dadas para dar continuidade a esse trabalho.

E como o aprendizado da Física não começa na faculdade, quero agradecer ao meu querido professor Evandro, que mostrou como essa área pode ser fascinante.

Meus tios, Célia e Waldir, sempre presentes e incentivadores, obrigada por estarem ao meu lado.

Por fim, aos meus pais, Marcilia e Ignácio, meu eterno agradecimento.

Sumário

Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xii
1 Introdução	1
Introdução	1
2 Revisão Teórica	4
2.1 Colisões	4
2.1.1 Tipos de Colisão	4
2.1.2 Colisão Inelástica	4
2.1.3 Velocidade da Colisão	6
2.2 Métodos de Aproximação	7
3 Descrição do Método Utilizado	11
3.1 Introdução ao problema	11
3.2 Método Numérico	15
3.2.1 Método de Rede da Equação de Schrödinger Dependente do Tempo - LTDSE	15
3.2.2 Método da Diferença Finita	16
3.2.3 Operador Evolução Temporal	18
3.2.4 Evolução temporal	20

4	Resultados e Análises	23
4.1	Estudo dos parâmetros	23
4.2	Função de Onda Evoluída	26
4.3	Probabilidade de Excitação	28
4.4	Seção de choque diferencial $d\sigma/db$	33
4.5	Seção de Choque	37
5	Conclusão e Perspectivas	39
A	Unidades Atômicas	41

Lista de Figuras

2.1	Seções de choque totais para colisões de próton com átomos de hidrogênio no seu estado fundamental: $\sigma_{exc}(n)$ é a seção de choque de excitação para o nível n ; σ_{ion} é a seção de choque para ionização e σ_{ce} é a seção de choque para a transferência de carga para todos os estados ligados do átomo de hidrogênio.	7
3.1	Sistema de coordenadas escolhido para o estudo da excitação	13
3.2	Função modeladora em 1 dimensão	14
3.3	Discretização do domínio temporal e espacial	16
4.1	Módulo ao quadrado da função de onda - 10 keV	27
4.2	Curvas de nível - 10 keV	27
4.3	Módulo ao quadrado da função de onda - 100 keV	27
4.4	Curvas de nível - 100 keV	27
4.5	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2s$ para prótons de 10 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(b): -18u.a. a 18u.a. e $\delta x = 0, 18$; os símbolos \diamond e * representam os de Kolakowska et al.[40]	29
4.6	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2s$ para prótons de 10 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0, 2$; os símbolos \diamond e * representam os de Kolakowska et al.[40]	29

4.7	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2p$ para prótons de 10 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(b): -18u.a. a 18u.a. e $\delta x = 0, 18$; os símbolos \diamond e $*$ representam os de Kolakowska et al.[40]	30
4.8	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2p$ para prótons de 10 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0, 2$; os símbolos \diamond e $*$ representam os de Kolakowska et al.[40]	30
4.9	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 3s$ para prótons de 10 keV; nossos resultados com rede(b): -18u.a. a 18u.a. e $\delta x = 0, 18$	30
4.10	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 3s$ para prótons de 10 keV; nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0, 2$	30
4.11	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2s$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(a): -15u.a. a 15u.a. e $\delta x = 0, 18$; os símbolos \diamond e $*$ representam os de Kolakowska et al.[40]	32
4.12	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2s$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0, 2$; os símbolos \diamond e $*$ representam os de Kolakowska et al.[40]	32
4.13	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2p$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(a): -15u.a. a 15u.a. e $\delta x = 0, 18$; os símbolos \diamond e $*$ representam os de Kolakowska et al.[40]	32
4.14	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2p$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0, 2$; os símbolos \diamond e $*$ representam os de Kolakowska et al.[40]	32

4.15	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 3s$ para prótons de 100 keV; quadra-	
	dos pretos representam nossos resultados com rede(a): -15u.a. a	
	15u.a. e $\delta x = 0,18$	33
4.16	Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 3s$ para prótons de 100 keV; quadra-	
	dos pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a	
	20u.a. e $\delta x = 0,2$	33
4.17	Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 2s$ à energia 10 keV;	
	quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$	34
4.18	Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 2p$ à energia 10 keV;	
	quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$	34
4.19	Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 3s$ à energia 10 keV;	
	quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$	35
4.20	Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 2s$ à energia 100 keV;	
	quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$	36
4.21	Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 2p$ à energia 100 keV;	
	quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$	36
4.22	Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 3s$ à energia 100 keV;	
	quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$	37

Capítulo 1

Introdução

Colisões atômicas vêm sendo investigadas teórica e experimentalmente há muitos anos. Entretanto, a dinâmica dos processos multieletrônicos que eventualmente ocorrem nestas colisões ainda não está perfeitamente esclarecida.

Tais processos, como excitação, ionização do projétil e do alvo e a captura eletrônica que ocorrem em colisões entre íons e alvos atômicos e moleculares, têm sido motivo de acurados estudos, dada sua importância em diferentes áreas. Assim são importantes para diagnosticar e descrever o comportamento de plasmas utilizados em fusão nuclear [1, 2] e aqueles encontrados em ambientes estelares. Em Astrofísica [3, 4, 5], as colisões entre elétrons, átomos e íons constituem o principal mecanismo de excitação no ambiente da coroa solar, nebulosas planetárias e núcleos galácticos. Em Física de Materiais [6], feixes de íons tem sido muito utilizados nas últimas décadas na análise e modificação de materiais, permitindo com isso o teste de uma variedade de modelos teóricos. A Medicina é outra área que se serve do estudo de colisões atômicas, uma vez que é necessário compreender os danos induzidos em células (DNA) produzidos pela incidência de radiações ionizantes α , β , γ e íons pesados (hadronterapia)[7].

Podemos classificar uma colisão em termos da velocidade da partícula incidente, comparando-a com a velocidade média dos elétrons atômicos envolvidos no processo.

No caso de uma colisão próton - hidrogênio, a velocidade do próton (v_P) é comparada com a velocidade do elétron na primeira órbita do modelo clássico de Bohr (v_0). Assim, temos: (a) colisão lenta, onde $(v_P) \ll (v_0)$; (b) intermediária, para $(v_P) \sim (v_0)$ e (c) rápida, onde $(v_P) \gg (v_0)$ [8].

Não existe nenhuma abordagem geral que forneça seção de choque inelástica para todas as faixas de velocidade. Existem diversos métodos usados para o estudo dos processos inelásticos e para o cálculo de suas respectivas seções de choque. Aproximações de Born mostraram ser bem sucedidas para altas velocidades [9, 10] mas não predizem corretamente as seções de choque para baixas velocidades. Quando a interação ocorre a velocidades intermediárias, outras aproximações geralmente são necessárias, como a aproximação de canais acoplados [11, 12, 13] ou a expansão em ondas distorcidas - CDW [14]. Para colisões a baixas velocidades a dinâmica da função de onda eletrônica é razoavelmente bem caracterizada pela expansão desta em base de orbitais moleculares [15, 16]. Todas essas aproximações possuem méritos e limitações particulares.

Métodos numéricos que utilizam a mecânica quântica dependente do tempo tornaram-se ferramentas poderosas e largamente utilizadas para o tratamento de uma grande variedade de processos atômicos e moleculares. O desenvolvimento de novas e eficientes técnicas de propagação e, principalmente, o rápido aumento da capacidade computacional, foram muito importantes para o atual sucesso destes métodos [18, 19, 20, 21].

Em termos experimentais, existem várias técnicas utilizadas para este tipo de estudo. Podemos citar: espectroscopia por COLTRIMS (Cold Targeted Recoil Ion Momentum Spectroscopy) que permite a reconstrução do vetor momentum para os ions e os elétrons depois da colisão [22]; espectroscopia de perda de energia de elétrons [23]; espectrometria de tempo-de-vôo e técnicas de coincidência [24].

No LaCAM (Laboratório de colisões Atômicas e Moleculares), fundado em 1998, desenvolvem-se diversas linhas de pesquisas na área [25, 26]. Para isso conta com um

acelerador eletrostático Pelletron de 1,7 MV, único no Brasil dedicado a pesquisas básicas em colisões atômicas e moleculares, além de ser utilizado para pesquisas aplicadas. Assim, com essa tese, iniciamos o desenvolvimento de um modelo teórico capaz de interpretar os resultados experimentais já existentes e aqueles que possam vir a ser obtidos.

Neste trabalho, início de uma nova linha teórica no LaCAM, estudamos as colisões mais simples do tipo próton - hidrogênio, analisando a interação em termos da evolução temporal da função de onda eletrônica. O estudo foi feito utilizando-se o método de rede LTDSE (Lattice Time Dependent Schrödinger Equation) [17, 18], na qual a equação de Schrödinger dependente do tempo é resolvida numericamente seguindo-se a evolução temporal da função de onda inicial (no tempo $t=0$) armazenada numa rede cartesiana tri-dimensional .

No capítulo 2 discutiremos alguns métodos existentes para estudar os processos de colisão. O capítulo 3 é dedicado à explicação do problema e do método numérico utilizado. As análises, resultados e comparações com outros resultados da literatura para o processo de excitação serão apresentados no capítulo 4. O capítulo 5 é dedicado às conclusões e perspectivas do trabalho.

Capítulo 2

Revisão Teórica

Neste capítulo apresentamos uma breve revisão sobre os principais processos que podem ocorrer numa colisão inelástica, assim como uma classificação das colisões em termos da velocidade da partícula incidente. Em seguida, discutiremos alguns métodos existentes para o estudo dos processos inelásticos. Ao longo deste trabalho utilizaremos o sistema de unidades atômicas (vide apêndice A).

2.1 Colisões

2.1.1 Tipos de Colisão

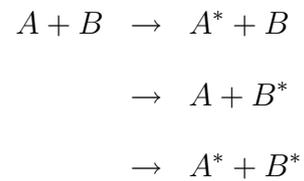
De acordo com seu produto final, uma colisão se classifica como:

(a) Espalhamento elástico: quando não ocorre mudança na estrutura interna das partículas envolvidas; (b) Reações: quando o sistema inicial dá origem a novos sistemas; e (c) Colisão inelástica: quando uma ou mais partículas sofrem uma mudança no seu estado quântico interno.

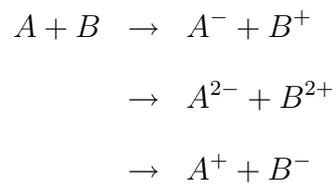
2.1.2 Colisão Inelástica

Para que ocorra alteração no estado quântico da(s) partícula(s), durante a colisão inelástica, um dos seguintes processos deve ocorrer:

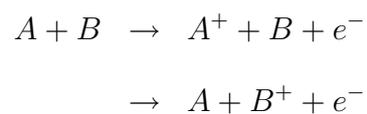
a) Excitação: um ou mais elétrons são excitados, passando para uma camada de mais alta energia:



b) Transferência de carga (captura): há troca de elétrons entre os átomos envolvidos na colisão:



c) Ionização: o átomo perde elétrons para estados do contínuo, tornando-se um íon:



2.1.3 Velocidade da Colisão

Em colisões atômicas é usual descrever a magnitude da velocidade dos projéteis em termos da velocidade do elétron na primeira órbita de Bohr $v_0 = \alpha c$ onde α é a constante de estrutura fina (vide apêndice A). Um próton com esta velocidade possui energia de 25 keV.

Assim, temos:

- a) velocidade lenta, que caracteriza a colisão de baixa energia:

$$v \ll v_0$$

- b) velocidade intermediária, na colisão de energia intermediária:

$$v \sim v_0$$

- c) velocidade alta, na colisão de alta energia:

$$v \gg v_0$$

Os processos que ocorrem em colisões inelásticas apresentam certa predominância em faixas de energias específicas:

- o processo de transferência de carga é predominante em colisões de baixa velocidade
- processos de ionização e excitação são predominantes em colisões de velocidade intermediária ou alta.

O gráfico abaixo, extraído da referência [8] ilustra essa situação para uma colisão $H^+ + H(1s)$:

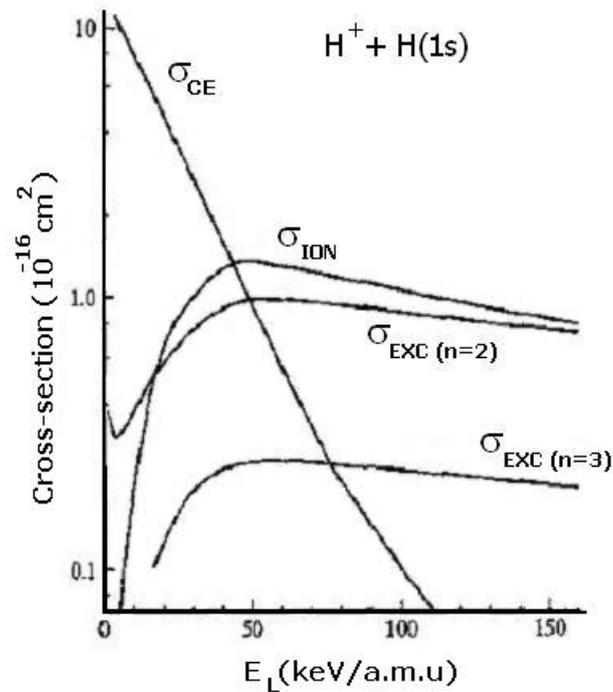


Figura 2.1: Seções de choque totais para colisões de próton com átomos de hidrogênio no seu estado fundamental: $\sigma_{exc}(n)$ é a seção de choque de excitação para o nível n ; σ_{ion} é a seção de choque para ionização e σ_{ce} é a seção de choque para a transferência de carga para todos os estados ligados do átomo de hidrogênio.

2.2 Métodos de Aproximação

Atualmente existem diversos modelos teóricos para tentar descrever os processos inelásticos que usualmente ocorrem em colisões atômicas (excitação, transferência de carga e ionização).

Quando a velocidade da partícula incidente for suficientemente alta as probabilidades de ocorrência dos processos inelásticos são muito pequenas. Se, além disso, o estado inicial não for muito alterado durante a colisão, a aproximação de Born, que emprega estados iniciais e finais não perturbados, serve para este tipo de estudo.

A primeira aproximação de Born foi aplicada pela primeira vez para o estudo de ionização de átomos por impacto de prótons por Bates e Griffing (1953)[9]. Essa aproximação reproduz bem a seção de choque total para ionização. Entretanto não é capaz de reproduzir os resultados experimentais da seção de choque diferencial por não levar em conta a interação elétron ejetado com o projétil [27]. Este método calcula bem as seções de choque de excitação para altas velocidades; entretanto para energias abaixo de 100 keV em colisões próton-hidrogênio essa aproximação não é adequada para reproduzir os resultados experimentais [8]. Para uma revisão recente sobre métodos utilizados para estudo de ionização em colisões vide artigo de Ovchinnikov et al. [28].

Processos de troca de carga não podem ser descritos por esse método, mesmo para altas velocidades. O modelo de segunda aproximação de Born CB2 pode ser usado para esse estudo a energias intermediárias e altas [29]. Sua demanda computacional é bastante elevada para casos em que cargas nucleares não são unitárias e, portanto, sua utilidade prática torna-se limitada.

Baseados na teoria de perturbação de ondas distorcidas, os modelos “continuum distorted wave - CDW” e “Continuum distorted wave eikonal inicial state - CDW-EIS” têm sido freqüentemente aplicados no estudo de processos de ionização de alvos atômicos por impacto de partículas carregadas [30]. Ambos são utilizados para o estudo de colisões a altas energias. O modelo CDW-EIS, desenvolvido inicialmente por Crothers e MacCann [31], mostrou ser útil também para o estudo de ionização a energias intermediárias.

O método da trajetória clássica de Monte Carlo CTMC, introduzido por Abrines e Percival em 1966 [32], aborda as interações íon-átomo usando a Mecânica Clássica. Neste modelo não é possível estudar excitações de elétrons, mas é um método confiável para alguns estudos a velocidades intermediárias [33, 34].

Em colisões de energias baixas e intermediárias, os métodos de canais acoplados têm sido tradicionalmente as ferramentas teóricas utilizadas para o estudo de proces-

sos de excitação e troca de carga [11]. A aproximação de canais acoplados é baseada na expansão das funções de onda num conjunto completo de base, de forma que a equação de Schrödinger é substituída por um sistema de equações diferenciais para os coeficientes da expansão. A teoria normalmente é formulada dentro da aproximação semi-clássica onde o movimento do projétil é descrito por uma trajetória clássica. No modelo de canais acoplados do orbital atômico de um centro (1CAO) o número de estados de base necessários para descrever o problema é bastante grande. Por exemplo, Ford et.al. [12] obtiveram bons resultados para seções de choque de excitação em colisões do tipo $H^+ - H$ usando o método 1CAO com 300 funções de base para energias acima de 15 keV/a.m.u.

O método de canais acoplados de orbitais atômicos de dois centros TCAO desenvolvido originalmente por Bates e McCarroll (1958)[35] tem sido utilizado nas últimas duas décadas para tratar colisões íon-átomo na faixa de velocidades intermediárias (de 1 keV a 200 keV). Vide, por exemplo, os trabalhos de Kuang e Lin [13]. Nesta faixa de energia, as velocidades do projétil e do elétron ativo do alvo (átomo) são da mesma ordem de magnitude, havendo competição entre os processos de excitação, ionização e captura.

Uma alternativa para expansões atômicas é o formalismo de canais acoplados de orbitais moleculares, que emprega uma base de funções de onda moleculares. Este método consegue reproduzir bem seções de choque dos processos inelásticos para colisões lentas do tipo íon -átomo [15, 16].

Uma outra aproximação teórica para o estudo de colisões íon-átomo é a solução direta da equação de Schrödinger dependente do tempo numa rede espacial. Para átomos de muitos elétrons pode-se usar potenciais modelados ou calculados por métodos tipo Hartree-Fock [36]. Os trabalhos pioneiros nessa área foram desenvolvidos há alguns anos atrás [37, 38, 39]. Inicialmente as aplicações deste método eram restritas a problemas reduzidos a duas dimensões. Graças ao desenvolvimento de computadores mais potentes, foi possível estudar problemas em três dimensões.

Vide, por exemplo, o trabalho de Kolakowska et al. [40]. Podemos citar diversas vantagens na utilização deste método, dentre as quais: possibilidade de estudo de colisões para uma larga faixa de velocidades, ausência da necessidade de utilização de uma base particular para expansão da função de onda e fácil visualização da dinâmica da colisão, uma vez que a função de onda total é calculada explicitamente como função do tempo.

Capítulo 3

Descrição do Método Utilizado

Neste capítulo apresentamos o problema que será estudado e os métodos numéricos utilizados para calcular a probabilidade de excitação do átomo de hidrogênio por impacto de próton e a respectiva seção de choque.

3.1 Introdução ao problema

Com o conhecimento da existência de ondas de matéria surgiu a necessidade de uma equação de onda para descrever o comportamento ondulatório das partículas. Em 1926, o físico austríaco Erwin Schrödinger propôs a seguinte equação :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.1)$$

Conhecida como *equação de Schrödinger dependente do tempo*, essa é a equação básica da mecânica quântica não relativística, que também pode ser escrita na forma:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.2)$$

A função $\Psi(\mathbf{r}, t)$, conhecida como *função de onda*, descreve o comportamento da partícula à qual ela está associada no espaço-tempo. \mathbf{H} é o operador energia, também chamado de Hamiltoniano, e $V(\mathbf{r})$ representa o potencial ao qual a partícula está

submetida.

Quando o Hamiltoniano não depende explicitamente do tempo a solução formal da equação de Schrödinger dependente do tempo é dada por:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}, t) &= e^{-iH(t-t_0)}\Psi(\mathbf{r}, t_0) \\ \Psi(\mathbf{r}, t) &= U(t, t_0)\Psi(\mathbf{r}, t_0)\end{aligned}\tag{3.3}$$

onde $U(t, t_0)$ é chamado *operador evolução temporal* do sistema. No nosso caso o Hamiltoniano depende explicitamente do tempo. Entretanto, como estamos fazendo a evolução temporal em intervalos de tempo infinitesimais δt , podemos usar essa representação para calcular a função de onda evoluída [47].

No nosso estudo de colisões próton - hidrogênio, utilizamos aproximações semi-clássicas onde o projétil (próton) viaja ao longo de uma trajetória retilínea enquanto interage com o átomo de hidrogênio. Nesta aproximação, dita de parâmetro de impacto, para energias $E > 1\text{keV}$ [8], o movimento do núcleo (projétil) pode ser tomado como uma trajetória retilínea, pois o ângulo de espalhamento é muito pequeno. Entretanto a descrição do comportamento do elétron é feita no âmbito da mecânica quântica, para podermos acompanhar a evolução temporal do pacote de onda eletrônico durante a colisão e calcular as probabilidades de excitação do elétron e suas respectivas seções de choque.

Consideramos a equação de Schrödinger dependente do tempo para um projétil, próton (Z_P), colidindo com um alvo fixo, átomo de hidrogênio (Z_H):

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z_H}{r} - \frac{Z_P}{R(t)} \right\} \Psi(\mathbf{r}, t)\tag{3.4}$$

\mathbf{r} é a posição do elétron em relação ao alvo, localizado na origem do sistema de coordenadas cartesianas. $R(t)$ é a distância variável no tempo entre o projétil e o

elétron (vide figura 3.2):

$$R(t) = \sqrt{(x - b)^2 + [y - (y_0 + vt)]^2 + z^2} \quad (3.5)$$

onde y_0 e o parâmetro de impacto b dão a localização da posição inicial do projétil, sendo v sua velocidade.

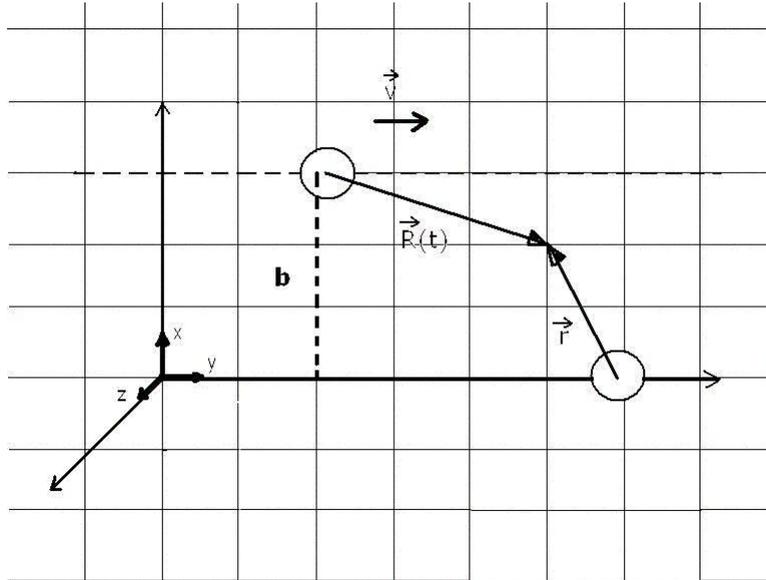


Figura 3.1: Sistema de coordenadas escolhido para o estudo da excitação

A equação 3.4 é resolvida numericamente numa rede cúbica tri-dimensional com a condição de contorno $\Psi = 0$ nas bordas para $t > 0$, e a condição inicial $\Psi = \Psi_{1s}$ para $t = 0$. Multiplicamos a função de onda por uma “função modeladora” $f(x, y, z)$ para evitar reflexões espúrias do pacote de onda nas bordas da rede [40]:

$$f_{mod}(x, y, z) = f_x(x)f_y(y)f_z(z) \quad (3.6)$$

onde:

$$f_x(x) = 1 - e^{\frac{-(x_{max}-x(i))}{3\delta x}} - e^{\frac{x_{min}-x(i)}{3\delta x}}$$

e $f_y(y)$ e $f_z(z)$ são análogas. Outra opção seria utilizar um potencial complexo localizado nas bordas da rede suficientemente forte para eliminar fluxos refletivos

[18].

Uma representação gráfica da função modeladora $f_x(x)$ é apresentada na figura abaixo:

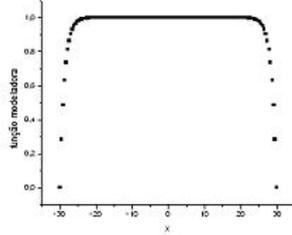


Figura 3.2: Função modeladora em 1 dimensão

Essa função vale um ao longo da rede cartesiana e vai à zero perto dos limites da rede.

O observável físico - probabilidade de excitação - é obtido projetando-se a função de onda total evoluída nos estados estacionários do alvo:

$$P_{n,l,m}(v, b) = \left| \int d^3r \psi_{n,l,m}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t = T_{max}) \right|^2 \quad (3.7)$$

onde T_{max} é o tempo total da colisão.

Define-se :

$$\frac{d\sigma}{db} = 2\pi P(v, b) b \quad (3.8)$$

A seção de choque para excitação para o estado n, l, m é obtida integrando-se $d\sigma/db$ para todos os parâmetros de impacto:

$$\sigma_{n,l,m} = \int_0^\infty \frac{d\sigma}{db} db \quad (3.9)$$

3.2 Método Numérico

A equação 3.4 será resolvida com a ajuda de três “ingredientes”: *técnica de rede* conhecida como *LTDSE*, *método da diferença finita* e a *fórmula de Cayley* [41] para o operador evolução temporal. Faremos em seguida a descrição destes três métodos.

3.2.1 Método de Rede da Equação de Schrödinger Dependente do Tempo - LTDSE

Progressos nas técnicas computacionais permitiram que a equação de Schrödinger fosse resolvida diretamente, sem a necessidade de se calcular o grande número de matrizes presentes no método de canais acoplados.

A solução de rede da equação de Schrödinger dependente do tempo (*LTDSE - Lattice Time-Dependent Schrödinger Equation*) envolve uma representação discreta da função de onda eletrônica $\Psi(x, y, z, t) \rightarrow \Psi(x_i, y_j, z_k, t)$ e de todos os operadores numa rede cartesiana tri-dimensional, em cujos vértices são tomados os valores da função. Operadores locais, como o potencial, transformam-se em matrizes diagonais cujos componentes são seus valores em cada ponto da rede $V(x, y, z, t) \rightarrow V(x_i, y_j, z_k)\delta_{i,i'}\delta_{j,j'}\delta_{k,k'}$.

Após discretizar a função de onda, divide-se todo o espaço temporal em um grande número de intervalos infinitesimais δt . Se a Hamiltoniana do sistema for conhecida e se a função de onda for definida em $t = t_0$, então a derivada temporal da função de onda no tempo inicial é determinada a partir da equação de Schrödinger dependente do tempo. Usando a função de onda e sua derivada temporal, a solução é propagada no intervalo de tempo δt para se obter o valor da função de onda em $t = t_1$ onde $t_1 = t_0 + \delta t$. Sucessivas aplicações deste procedimento determinam ao valor da função de onda para todos os tempos.

Neste método, a função de onda eletrônica representa soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo obedecendo às configurações iniciais e de contorno.

Emprega-se uma rede numérica de extensão espacial finita que possui um número finito de pontos de rede. Logo, quando escolhermos uma representação particular, devemos achar um compromisso entre a extensão espacial da função de onda e a resolução espacial com a qual ela será descrita.

3.2.2 Método da Diferença Finita

A pesquisa matemática de técnicas para solução de equações diferenciais contínuas tem produzido alguns métodos numéricos que são apropriados para o tratamento da continuidade no ambiente computacional. Estes métodos, denominados métodos numéricos de diferença, baseiam-se em técnicas que permitem a simplificação de equações diferenciais complexas de forma que elas sejam resolvidas numericamente.

O método de soluções por diferença finita (FDM - Finite Difference Method) foi escolhido para ser utilizado neste trabalho devido à sua conveniência e praticidade. Para utilizá-lo é necessário que o tempo e o espaço sejam discretizados em pequenos intervalos, o que condiz com o método de rede LTDSE. Uma representação pictórica é mostrada na figura 3.3

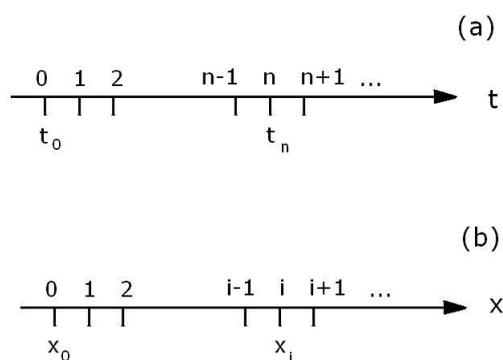


Figura 3.3: Discretização do domínio temporal e espacial

O objetivo do método das diferenças finitas é transformar um problema composto por equações diferenciais parciais em um problema formado por equações

algébricas. Para isso, busca efetuar diretamente a substituição das formas derivadas da função/variável dependente por suas formas de diferenças finitas, obtidas pela expansão em série de Taylor e truncamento a nível da ordem de erro desejada (h):

$$f(x + \delta x) = f(x) + f'(x)\delta x + O(h^2) \quad (3.10)$$

$$f(x - \delta x) = f(x) - f'(x)\delta x + O(h^2) \quad (3.11)$$

As duas equações são o desenvolvimento em série de Taylor respectivamente a vante e a ré, em torno do ponto x da função $f(x)$. Assim, considerando a soma da 1ª com o simétrico da 2ª:

$$f(x + \delta x) - f(x - \delta x) = 2f'(x)\delta x + O(h^2) \quad (3.12)$$

chegamos à derivada da função em forma de diferença finita central, a menos de um erro de 2ª ordem:

$$f'(x) = \frac{f(x + \delta x) - f(x - \delta x)}{2\delta x} + O(h^2) \quad (3.13)$$

Assim, para a 2ª derivada resulta a forma central:

$$\begin{aligned} f''(x, y)_{xx} &= \frac{f(x + \delta x, y) - 2f(x, y) + f(x - \delta x, y)}{\delta x^2} \\ f''(x, y)_{yy} &= \frac{f(x, y + \delta y) - 2f(x, y) + f(x, y - \delta y)}{\delta y^2} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Utilizando o método das diferenças finitas em equações diferenciais parciais obtém-se uma formulação algébrica dessas equações[41].

3.2.3 Operador Evolução Temporal

Em uma simulação numérica é fundamental que a norma da função de onda seja sempre preservada ($= 1$) e isto só ocorre se o operador de evolução temporal for unitário. Assim, as condições a serem satisfeitas são:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (3.15)$$

$$U^\dagger U = 1 \quad (3.16)$$

Reescrevendo a equação (3.3):

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) = e^{-iH\delta t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.17)$$

(válida para δt muito pequeno) a exponencial do operador evolução temporal pode ser expandida em série de Taylor até 1ª ordem:

$$e^{-iH\delta t} \simeq 1 - iH\delta t \quad (3.18)$$

onde H é representado pela aproximação de diferença finita. Calculando a norma do operador, temos:

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= (1 + iH\delta t)(1 - iH\delta t) \\ U^\dagger U &= 1 + H^2\delta t^2 > 1 \end{aligned} \quad (3.19)$$

Vemos, portanto, que essa representação para o operador evolução temporal não é adequada, uma vez que a norma é um valor maior que um.

Multiplicando a equação 3.3 pelo complexo conjugado do operador evolução tem-

poral U^\dagger temos:

$$U^\dagger \Psi(t + \delta t) = U^\dagger U \Psi(t)$$

$$U^\dagger \Psi(t + \delta t) = \Psi(t)$$

Logo,

$$\Psi(t + \delta t) = \frac{1}{1 + iH\delta t} \Psi(t)$$

onde $1/(1 + iH\delta t)$ passa a ser o novo operador de evolução temporal. Calculando sua norma, temos:

$$U^\dagger U = \frac{1}{1 + H^2\delta t^2} < 1 \quad (3.20)$$

Vemos que essa representação também não é adequada para descrever o operador evolução temporal, uma vez que não são unitários.

Uma forma correta de diferenciar a equação de Schrödinger é usar a *fórmula de Cayley* [41] para a representação em termos da diferença finita de $e^{-iH\delta t}$, que é uma representação unitária e acurada em segunda ordem no tempo.

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) = e^{-iH\delta t} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) = \frac{e^{-\frac{1}{2}iH\delta t}}{e^{\frac{1}{2}iH\delta t}} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) \simeq \frac{1 - \frac{iH\delta t}{2}}{1 + \frac{iH\delta t}{2}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.21)$$

A representação acima é conhecida como a *fórmula de Cayley*.

Tirando a norma do novo operador evolução, temos que:

$$U^\dagger U = \frac{1 + (\frac{H\delta t}{2})^2}{1 + (\frac{H\delta t}{2})^2} \equiv 1 \quad (3.22)$$

Assim, a equação de evolução temporal passa a ser escrita como:

$$\left(1 + \frac{iH\delta t}{2}\right) \Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) = \left(1 - \frac{iH\delta t}{2}\right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.23)$$

3.2.4 Evolução temporal

A equação 3.23 nos permite calcular a função de onda no instante $t + \delta t$ conhecida a função de onda no instante t . Nela identificamos um problema de álgebra linear da forma:

$$M\Psi(t + \delta t) = q \quad (3.24)$$

onde:

$$\begin{aligned} M &\equiv \left(1 + \frac{iH\delta t}{2}\right) \\ q &\equiv \left(1 - \frac{iH\delta t}{2}\right) \Psi(t) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Omitimos a variável \mathbf{r} para simplificar a notação.

Utilizando o método da diferença finita para reescrever o lado esquerdo da equação 3.24, temos:

$$\begin{aligned} \Psi_{i,j,k}^{n+1} + \frac{i\delta t}{2} \left[\left(-\frac{\Psi_{i+1,j,k}^{n+1} - 2\Psi_{i,j,k}^{n+1} + \Psi_{i-1,j,k}^{n+1}}{2\delta x^2} \right) - \left(\frac{\Psi_{i,j+1,k}^{n+1} - 2\Psi_{i,j,k}^{n+1} + \Psi_{i,j-1,k}^{n+1}}{2\delta y^2} \right) - \right. \\ \left. \left(\frac{\Psi_{i,j,k+1}^{n+1} - 2\Psi_{i,j,k}^{n+1} + \Psi_{i,j,k-1}^{n+1}}{2\delta z^2} \right) + V_{i,j,k} \Psi_{i,j,k}^{n+1} \right] = \left[1 - \frac{1}{2}iH\delta t \right] \Psi_{i,j,k}^n \end{aligned}$$

O índice “ n ” representa a função de onda no tempo “ t ” e “ $n+1$ ” representa a função em “ $t + \delta t$ ”. Os índices “ i, j, k ” são relativos à malha espacial.

Reagrupando os termos, temos:

$$a\Psi_{i,j,k-1}^{n+1} + b\Psi_{i,j-1,k}^{n+1} + c\Psi_{i-1,j,k}^{n+1} + d_{i,j,k}\Psi_{i,j,k}^{n+1} + e\Psi_{i+1,j,k}^{n+1} + f\Psi_{i,j+1,k}^{n+1} + g\Psi_{i,j,k+1}^{n+1} = q_{i,j,k} \quad (3.26)$$

onde a, b, c, e, f, g são escalares (constantes) :

$$a = g = -\frac{i\delta t}{4\delta z^2} \quad (3.27)$$

$$b = f = -\frac{i\delta t}{4\delta y^2} \quad (3.28)$$

$$c = e = -\frac{i\delta t}{4\delta x^2} \quad (3.29)$$

e $d_{i,j,k}$ e $q_{i,j,k}$ são matrizes, dadas por:

$$d_{i,j,k} = 1 + \frac{i\delta t}{2} \left[\frac{1}{\delta x^2} + \frac{1}{\delta y^2} + \frac{1}{\delta z^2} + V_{i,j,k} \right] \quad (3.30)$$

$$q_{i,j,k} = \left(1 - \frac{1}{2}iH\delta t \right) \Psi_{i,j,k}^n$$

$$\begin{aligned} q_{i,j,k} = & \Psi_{i,j,k}^n + \frac{i\delta t}{2} \left[\frac{\Psi_{i+1,j,k}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i-1,j,k}^n}{2\delta x^2} + \frac{\Psi_{i,j+1,k}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i,j-1,k}^n}{2\delta y^2} + \right. \\ & \left. + \frac{\Psi_{i,j,k+1}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i,j,k-1}^n}{2\delta z^2} \right] - \frac{i\delta t}{2} V_{i,j,k} \Psi_{i,j,k}^n \end{aligned} \quad (3.31)$$

A equação (3.26), que desejamos resolver numericamente, envolve uma matriz que é um caso simplificado de uma matriz do tipo “sete pontos molecular”(seven points molecular)[42]. A simplificação é decorrente do fato de que seis dos sete coeficientes são escalares, enquanto que no caso geral todos os coeficientes são matriciais. Isso acarreta numa significativa diminuição da memória exigida nos cálculos numéricos.

Este tipo de problema numérico pode ser resolvido por um procedimento chamado “Procedimento Fortemente Implícito”(Strong Implicit Procedure)[43]. O algoritmo numérico é descrito a seguir.

Dada a função de onda no tempo t , calcula-se a função de onda no instante $t + \delta t$ utilizando um processo iterativo esquematizado no laço abaixo que contém quatro

passos:

- (a) $r^{(m)} = q - M\Psi^{(m)}(t + \delta t)$
- (b) teste de auto-consistência
- (c) $M_s^{(m)} = r^{(m)}$
- (d) $\Psi^{(m+1)}(t + \delta t) = \Psi^{(m)}(t + \delta t) + s^{(m)}$
- (e) retorna ao passo (a)

No passo (a) é calculado o resíduo $r^{(m)}$ da m-ésima iteração. O “ansatz” para o valor de $\Psi^{m=0}(t + \delta t)$ é o próprio valor de $\Psi(t)$. No passo (b) é feito o teste de auto-consistência onde se compara o valor absoluto de $r^{(m)}$ com a tolerância (tol) exigida *a priori*. O processo de iteração só termina quando $|r^{(m)}| \leq tol$. Se o critério anterior não for satisfeito, passa-se para o passo (c), onde é calculado o incremento $s^{(m)}$ à função de onda no instante $t + \delta t$, que será efetivada no passo (d). O passo (c) é o que exige um tempo de computação maior. Ele consiste na solução de um sistema de equações lineares através de uma fatorização incompleta (ILU)[41] que, no nosso caso particular da matriz M , torna-se muito eficiente.

A partir do momento que a iteração cessa o valor de $\Psi(t + \delta t)$ fica determinado. Multiplica-se esse valor pela função modeladora 3.6 e, em seguida, inicia-se uma nova etapa da evolução temporal, incrementando-se de δt o valor anterior do tempo e recomeçando o processo de iteração para calcular $\Psi(t + 2\delta t)$. Quando o valor de t iguala-se ao valor de T_{max} , a evolução temporal chega ao fim.

Capítulo 4

Resultados e Análises

Neste trabalho estudamos os processos de excitação em colisões próton - átomo de hidrogênio para energias do próton incidente de 10 e 100 keV resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo numa rede tri-dimensional cartesiana. Os resultados obtidos foram computados em dois equipamentos com as seguintes especificações: (I) Pentium 4 com 3,0 GHz e 1 Gb de memória e (II) Pentium 4 com 3,2 GHz e 2 Gb de memória. Com essas máquinas o tempo característico de execução dos programas variou entre 1 dia (100 keV) a 5 dias (10 keV).

4.1 Estudo dos parâmetros

Os parâmetros que definem a malha espacial são: extensão da rede tri-dimensional ($\Delta x = \Delta y = \Delta z$) e intervalo entre os pontos da rede ($\delta x = \delta y = \delta z$). Outros parâmetros importantes são o tempo total da evolução, o incremento temporal δt e a tolerância (tol). Em todos os cálculos realizados os parâmetros foram escolhidos de forma que a distância $R(t)$ entre o elétron e o projétil (vide 3.5) não se anulasse para nenhum valor do tempo. Outra possibilidade seria utilizar um potencial coulombiano modificado, introduzindo um parâmetro c para evitar singularidades na origem: $-Z_P/R(t) \rightarrow -Z_P/\sqrt{c + R(t)^2}$ [40]

O primeiro teste para definir a escolha dos δx e Δx é feito calculando-se nu-

mericamente o valor esperado de energia $\langle H_0 \rangle$ e os valores esperados $\langle r \rangle$ e $\langle 1/r \rangle$, e comparando com os seus valores exatos:

$$\begin{aligned}\langle H_0 \rangle &= -\frac{Z_H}{2n^2} \\ \langle r \rangle &= \frac{[3n^2 - l(l+1)]}{2Z_H} \\ \langle 1/r \rangle &= \frac{Z_H}{n^2}\end{aligned}\tag{4.1}$$

caracterizadas pelos números quânticos n, l e m dos estados estacionários do átomo de hidrogênio.

Enquanto o valor de $\langle H_0 \rangle$ nos indica se a derivada segunda está sendo bem calculada, os valores $\langle r \rangle$ e $\langle 1/r \rangle$ indicam se a função está bem representada em coordenadas cartesianas. Calculamos os valores médios acima para dois tipos de rede: (a) malha de 30 u.a. e $\delta x = 0,18u.a.$ (162^3 pontos) e (b) malha de 36 u.a. e $\delta x = 0,18u.a.$ (200^3 pontos). Na tabela I estes resultados são comparados com (c) os de Kolakowska et al.[40], que utilizaram computadores em paralelo com memória distribuída, uma malha de 60 u.a. em x e y e 30 u.a. em z (devido à simetria do problema - vide equação (3.5)) e $\delta x, y, z = 0,2$ ($300 \times 300 \times 150$ pontos). São também tabelados os valores exatos.

Estado	$\langle r \rangle$	$\langle 1/r \rangle$	$\langle H_0 \rangle$
$1s_0$	1,50(a)	0,99(a)	-0,49568(a)
	1,50(b)	0,99(b)	-0,49593(b)
	1,51(c)	0,98(c)	-0,49515(c)
	1,50	1,00	-0,50000
$2s_0$	5,99(a)	0,25(a)	-0,12456(a)
	5,99(b)	0,25(b)	-0,12464(b)
	6,00(c)	0,25(c)	-0,12457(c)
	6,00	0,25	-0,12500
$2p_{+1}$	4,99(a)	0,25(a)	-0,12512(a)
	4,99(b)	0,25(b)	-0,12510(b)
	4,99(c)	0,25(c)	-0,12514(c)
	5,00	0,25	-0,12500
$2p_{-1}$	4,99(a)	0,25(a)	-0,12510(a)
	4,99(b)	0,25(b)	-0,12512(b)
	4,99(c)	0,25(c)	-0,12514(c)
	5,00	0,25	-0,12500
$3s_0$	10,03(a)	0,10(a)	-0,04583(a)
	12,17(b)	0,11(b)	-0,05219(b)
	13,48(c)	0,11(c)	-0,05541(c)
	13,50	0,11	-0,05555
$3p_{+1}$	10,00(a)	0,10(a)	-0,04858(a)
	11,59(b)	0,11(b)	-0,05335(b)
	12,48(c)	0,11(c)	-0,05559(c)
	12,50	0,11	-0,05555
$3p_{-1}$	10,00(a)	0,10(a)	-0,04858(a)
	11,59(b)	0,11(b)	-0,05335(b)
	12,48(c)	0,11(c)	-0,05559(c)
	12,50	0,11	-0,05555
$3d_0$	9,05(a)	0,11(a)	-0,05128(a)
	9,98(b)	0,11(b)	-0,05425(b)
	10,49(c)	0,11(c)	-0,05557(c)
	10,50	0,11	-0,05555
$3d_{+2}$	9,39(a)	0,11(a)	-0,05237(a)
	10,13(b)	0,11(b)	-0,05464(b)
	10,49(c)	0,11(c)	-0,05557(c)
	10,50	0,11	-0,05555
$3d_{-2}$	9,39(a)	0,11(a)	-0,05237(a)
	10,13(b)	0,11(b)	-0,05464(b)
	10,49(c)	0,11(c)	-0,05557(c)
	10,50	0,11	-0,05555

Tabela 4.1: Valores médios de operadores para estados estacionários do átomo de hidrogênio em redes cartesianas. (a) e (b) são resultados obtidos com o nosso método e (c) são os resultados de Kolakowska et al. [40]. Também colocamos na tabela os valores exatos calculados pela equação 4.1

Os estados com $n \leq 2$ estão bem representados pelas nossas malhas. Os estados com $n = 3$ não apresentam resultados tão bons devido à extensão da função de onda, que é sempre maior do que 10 u.a., enquanto nossa malha tem uma extensão de 15 e 18 u.a.. Vale ressaltar que a malha (b) (calculada na segunda máquina) é a que apresenta os melhores valores. Obtivemos resultados semelhantes para uma rede (d) de extensão $-20u.a.$ a $20u.a.$ e $\delta x, y, z = 0, 2$.

O tempo total da evolução (T_{max}) é obtido dividindo-se a extensão da malha Δy pela velocidade do íon:

$$T_{max} = \frac{\Delta y}{v} \quad (4.2)$$

Analogamente, o incremento temporal δt é obtido pela relação:

$$\delta t = \frac{\delta y}{v} \quad (4.3)$$

Os cálculos da evolução da função de onda foram feitos utilizando-se uma tolerância de 10^{-8} (vide seção (3.2.4)).

4.2 Função de Onda Evoluída

Como mencionado no capítulo 2, uma das vantagens deste método é a visualização da evolução temporal da função de onda. Partindo da função de onda eletrônica do átomo do hidrogênio no estado fundamental 1s, resolvemos a equação 3.4 para um parâmetro de impacto $b=1$ u.a.. Como exemplo de resultados, apresentamos nas figuras seguintes o módulo ao quadrado das funções de onda evoluídas para $t = T_{max}$ e para um corte em $z = 0$ para valores de energia de 10 keV ($v = 0,63v_0$) e 100 keV ($v = 2v_0$). A figura 4.1 representa o resultado tri-dimensional de uma colisão a 10 keV. A figura 4.2 é a representação em termos de curva de nível do mesmo resultado. As figuras 4.3 e 4.4 são análogas para 100 keV.

Como pode ser observado, para velocidades baixas o processo de captura é bas-

tante acentuado. Já para altas velocidades (figuras 4.3 e 4.4), tal processo não é muito pronunciado, como mostra a figura 4.3. Isto está em concordância com o gráfico 2.1.

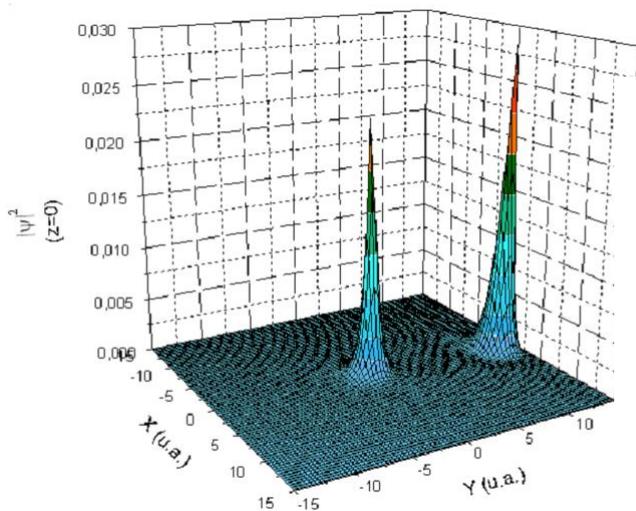


Figura 4.1: Módulo ao quadrado da função de onda - 10 keV

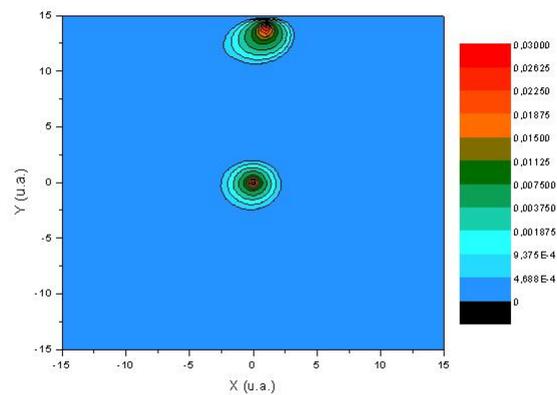


Figura 4.2: Curvas de nível - 10 keV

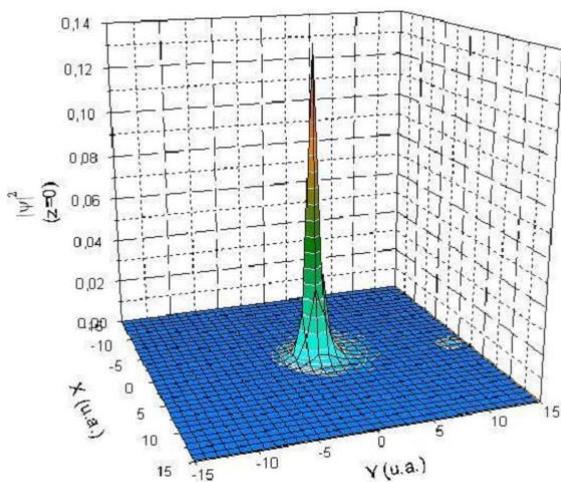


Figura 4.3: Módulo ao quadrado da função de onda - 100 keV

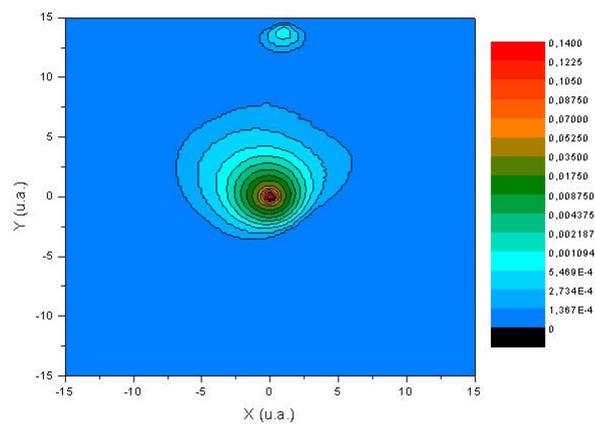


Figura 4.4: Curvas de nível - 100 keV

4.3 Probabilidade de Excitação

Diversos valores de parâmetro de impacto b foram utilizados para o cálculo da probabilidade de excitação. Os valores variam de acordo com o tamanho da rede. Como veremos adiante, para baixas velocidades é necessário um maior número de parâmetros de impacto entre 0 e 5 u.a. para a descrição do problema.

A probabilidade de excitação do átomo de hidrogênio, a partir do estado fundamental $1s$, foi calculada para para diversos parâmetros de rede e energias incidentes de 10 e 100 keV e comparamos nossos resultados, representados por quadrados pretos, com os de Kolakowska et al.[40].

Na referência [40] foram utilizados dois métodos numéricos alternativos para o estudo da evolução temporal: (FD) diferença finita com algoritmo “leapfrog” e (FC) Transformada de Fourier, usando o propagador “split operator”[41]. No primeiro caso foi utilizada a rede (c) já citada na seção anterior (vide tabela I). No segundo caso, foi utilizada uma rede de -26 u.a. a 26 u.a. nas direções x , y e z com $\delta x = 0,385$ (135^3 pontos). Nas figuras abaixo, os resultados do método (FD) foram representados por \diamond e os do método (FC) por $*$.

As figuras 4.5 e 4.6 representam, respectivamente, probabilidade de excitação para o estado $2s$ em função do parâmetro de impacto a 10 keV com as redes (b) e (d):

- rede (b): extensão -18 u.a. a 18 u.a. e $\delta x = \delta y = \delta z = 0,18$
- rede (d): extensão -20 u.a. a 20 u.a. e $\delta x = \delta y = \delta z = 0,2$

Ambos os cálculos foram feitos com a máquina (II) e as redes possuem 200^3 pontos.

Para transições do tipo $1s \rightarrow 2p$ consideramos os estados $2p_{\pm 1}$, já que, devido à simetria do problema $(-1)^{l+m}$, o estado $2p_0$ não contribui para a excitação. As figuras 4.7 e 4.8 representam a probabilidade de excitação para o estado $2p$ ($2p_{+1} + 2p_{-1}$) em função do parâmetro de impacto a 10 keV com as redes (b) e (d), respectivamente. Analogamente as figuras 4.9 e 4.10 representam a probabilidade de excitação para o estado $3s$. Só apresentamos resultados para parâmetros de impacto de 0 a

12 u.a., uma vez que para parâmetros de impacto maiores a probabilidade tende a zero.

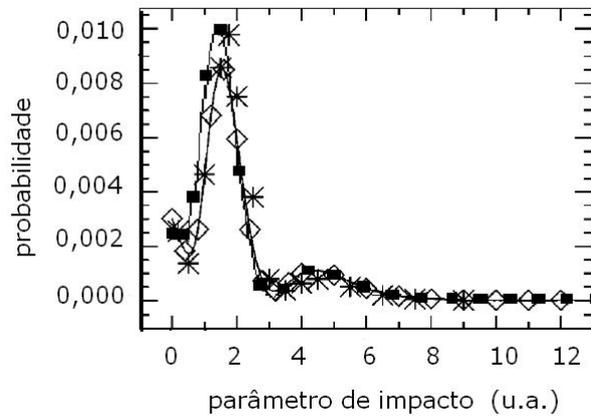


Figura 4.5: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2s$ para prótons de 10 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(b): -18u.a. a 18u.a. e $\delta x = 0,18$; os símbolos \diamond e * representam os de Kolakowska et al.[40]

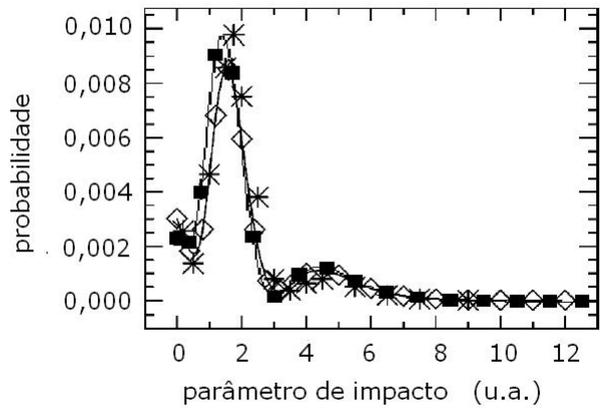


Figura 4.6: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2s$ para prótons de 10 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0,2$; os símbolos \diamond e * representam os de Kolakowska et al.[40]

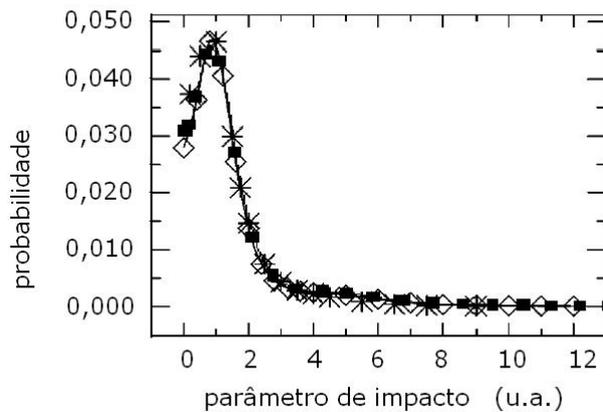


Figura 4.7: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2p$ para prótons de 10 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(b): $-18u.a.$ a $18u.a.$ e $\delta x = 0,18$; os símbolos \diamond e $*$ representam os de Kolakowska et al.[40]

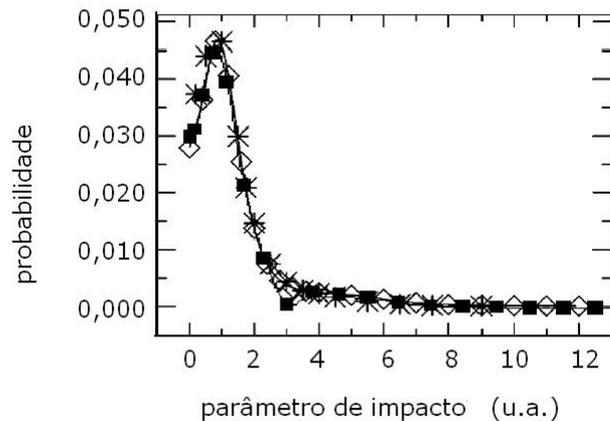


Figura 4.8: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2p$ para prótons de 10 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): $-20u.a.$ a $20u.a.$ e $\delta x = 0,2$; os símbolos \diamond e $*$ representam os de Kolakowska et al.[40]

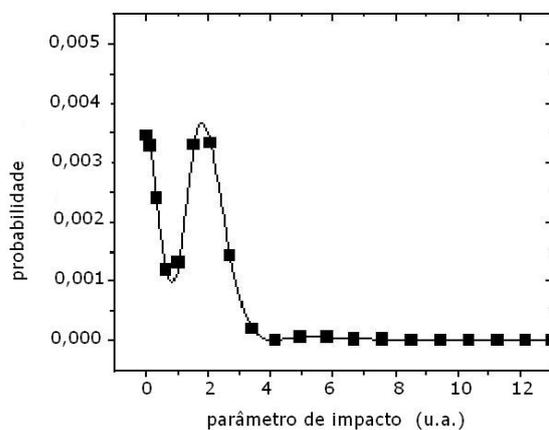


Figura 4.9: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 3s$ para prótons de 10 keV; nossos resultados com rede(b): $-18u.a.$ a $18u.a.$ e $\delta x = 0,18$

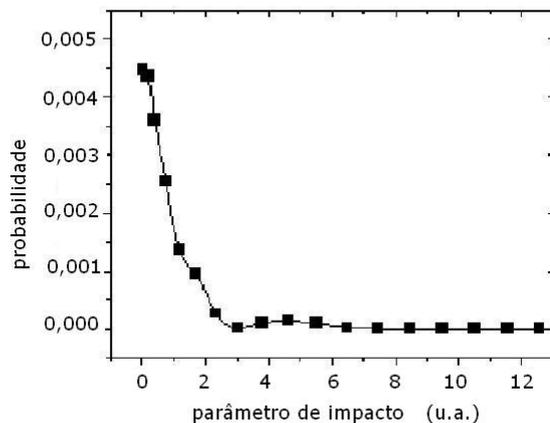


Figura 4.10: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 3s$ para prótons de 10 keV; nossos resultados com rede(d): $-20u.a.$ a $20u.a.$ e $\delta x = 0,2$

A forma geral da probabilidade de excitação como função do parâmetro de impacto varia fortemente de uma transição para outra. Para transições $1s \rightarrow 2s$ existem

dois picos, o primeiro centrado em 1,5u.a. e o segundo próximo de 5 u.a. Ambas as redes geraram resultados semelhantes aos de Kolakowska et al. a menos de um pequeno deslocamento do primeiro pico, mais pronunciado no caso da rede (b). Para a transição $1s \rightarrow 2p$ todos os resultados estão de acordo com os de Kolakowska et al., exceto talvez para uma pequena oscilação cuja máximo está próximo de 4 u.a. Para a transição $1s \rightarrow 3s$ Kolakowska et al. não apresentaram resultados gráficos. Nossos resultados são muito discrepantes entre si para essa transição. Observamos que para pequenos parâmetros de impacto aparecem oscilações com um máximo em torno de $b = 1,5$ e para parâmetros de impacto um pouco maiores existe outro próximo de $b = 5$. A limitação das nossas possibilidades computacionais não nos permitiu aumentar o tamanho da rede, que seria necessário para estudar excitações para estados com $n \geq 3$. Isto pode ser uma consequência do problema detectado na tabela I quando tentamos reproduzir os valores médios para o estado $n = 3$. É de se esperar que à medida que a energia do estado excitado aumenta, uma estrutura mais complexa aparece para pequenos parâmetros de impacto, principalmente para baixas velocidades, como no caso aqui considerado.

Para os cálculos a 100 keV utilizamos as redes (a) e (d).

- rede (a): extensão -15 a 15 u.a. e $\delta x = 0,18$ com 162^3 pontos
- rede (d): extensão -20 a 20 u.a. e $\delta x = 0,2$ com 200^3 pontos

As figuras 4.11 e 4.12 representam, respectivamente, a probabilidade de excitação para o estado 2s em função do parâmetro de impacto com as redes (a) e (d). As figuras 4.13 e 4.14 representam a probabilidade de excitação para o estado 2p em função do parâmetro de impacto com as redes citadas acima. As figuras 4.15 e 4.16 representam a probabilidade de excitação para o estado 3s em função do parâmetro de impacto.

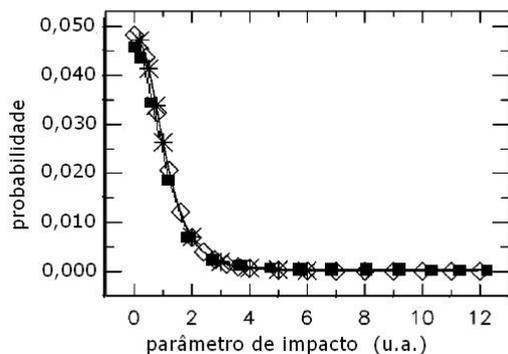


Figura 4.11: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2s$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(a): -15u.a. a 15u.a. e $\delta x = 0,18$; os símbolos \diamond e * representam os de Kolakowska et al.[40]

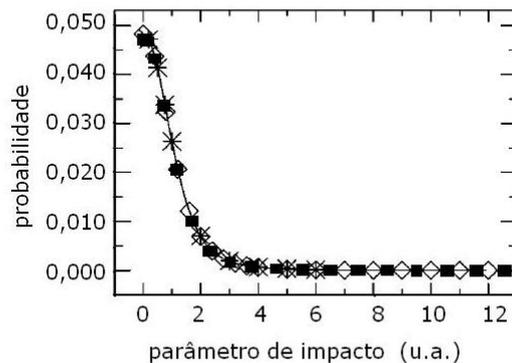


Figura 4.12: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2s$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0,2$; os símbolos \diamond e * representam os de Kolakowska et al.[40]

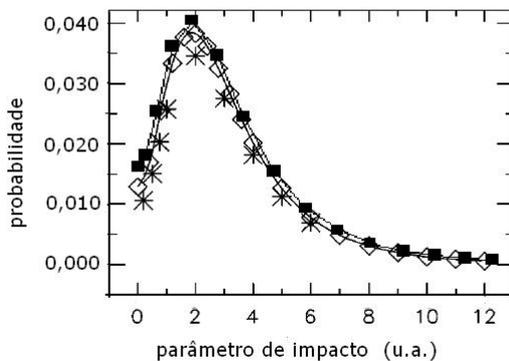


Figura 4.13: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2p$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(a): -15u.a. a 15u.a. e $\delta x = 0,18$; os símbolos \diamond e * representam os de Kolakowska et al.[40]

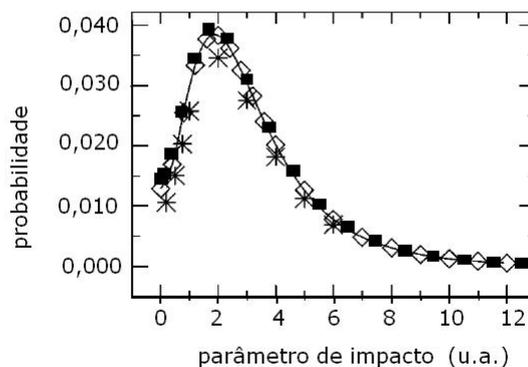


Figura 4.14: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 2p$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0,2$; os símbolos \diamond e * representam os de Kolakowska et al.[40]

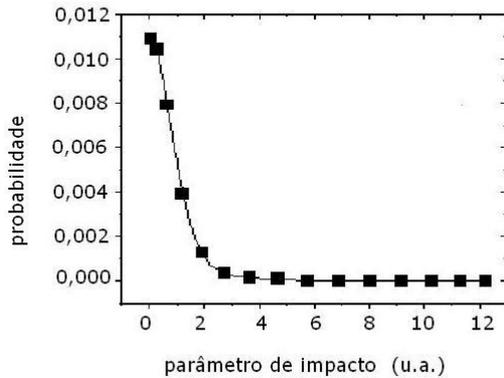


Figura 4.15: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 3s$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(a): -15u.a. a 15u.a. e $\delta x = 0,18$

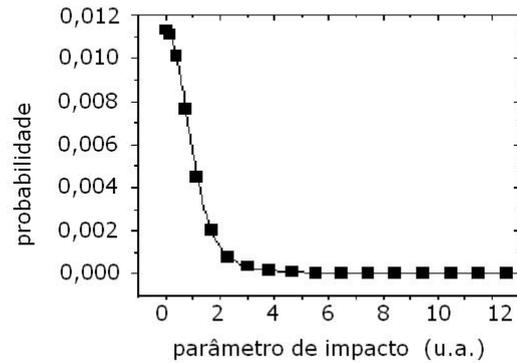


Figura 4.16: Probabilidade de excitação $1s \rightarrow 3s$ para prótons de 100 keV; quadrados pretos representam nossos resultados com rede(d): -20u.a. a 20u.a. e $\delta x = 0,2$

Podemos observar que o pico próximo à origem tem seu tamanho aumentado para todas as transições. O segundo máximo desaparece completamente. Em particular, para o estado $2p$, o pico se alargou e se deslocou para valores maiores de b . Nosso resultados são semelhantes para ambas as redes, o que mostra a pouca sensibilidade dos parâmetros da malha para altas energias. Verificamos que há grande concordância entre nossos resultados e os de Kolakowska et al..

4.4 Seção de choque diferencial $d\sigma/db$

Estudamos o comportamento da seção de choque diferencial $d\sigma/db$ para os parâmetros analisados na seção anterior. As figuras 4.17, 4.18 e 4.19 representam, respectivamente, o comportamento das seções de choque diferenciais $1s \rightarrow 2s$, $1s \rightarrow 2p$ e $1s \rightarrow 3s$ para as redes (b) e (d) a 10 keV. Os quadrados pretos representam os resultados da malha (b) ($\delta x = 0,18$; 200^3 pontos) e os resultados da malha (d) ($\delta x = 0,2$; 200^3 pontos). Apresentamos aqui o resultado para todos os parâmetros de impacto calculados em cada caso segundo uma distribuição dada pelo método de “Gauss-

Legendre”[41]. Isto será utilizado no cálculo da integral da seção de choque total. O estudo das seções de choque diferenciais nos indica como será o comportamento das seções de choque totais em função dos parâmetros utilizados.

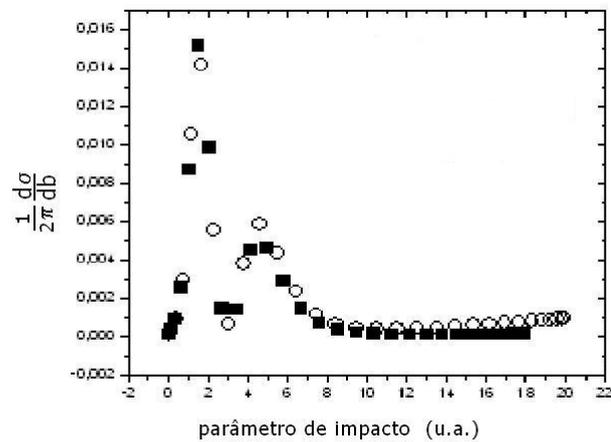


Figura 4.17: Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 2s$ à energia 10 keV; quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$

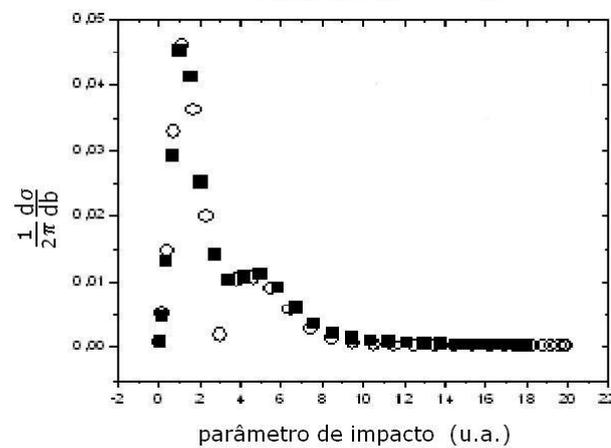


Figura 4.18: Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 2p$ à energia 10 keV; quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$

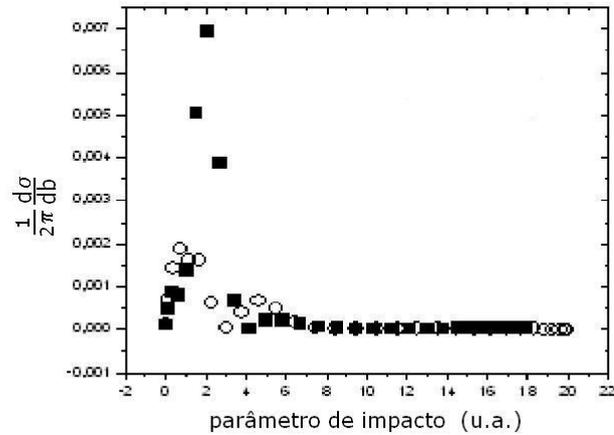


Figura 4.19: Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 3s$ à energia 10 keV; quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$

Observamos que para os maiores valores de parâmetro de impacto, as seções de choque diferenciais vão a zero, a não ser na transição $1s \rightarrow 2s$ para a malha (d), o que pode ser devido a um problema de convergência numérica e/ou um problema do valor escolhido para a tolerância (vide figura 4.17). Todos os gráficos apresentam um formato semelhante para pequenos parâmetros de impacto, a não ser na transição $1s \rightarrow 3s$, o que já era de se esperar pelos resultados apresentados na seção anterior.

As figuras 4.20, 4.21 e 4.22 representam, respectivamente, o comportamento das seções de choque diferenciais $1s \rightarrow 2s$, $1s \rightarrow 2p$ e $1s \rightarrow 3s$ para as redes (a) e (d) a 100 keV. Os quadrados pretos representam os resultados da malha (a) ($\delta x = \delta y = \delta z = 0,18$; 162^3 pontos) e o os resultados da malha (d) ($\delta x = \delta y = \delta z = 0,2$; 200^3 pontos).

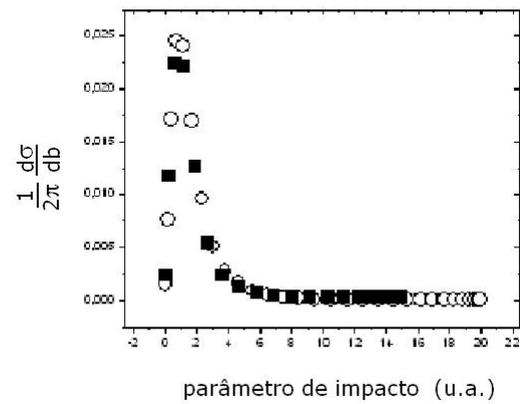


Figura 4.20: Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 2s$ à energia 100 keV; quadrado preto: $\delta x = 0,18$, bola branca: $\delta x = 0,2$

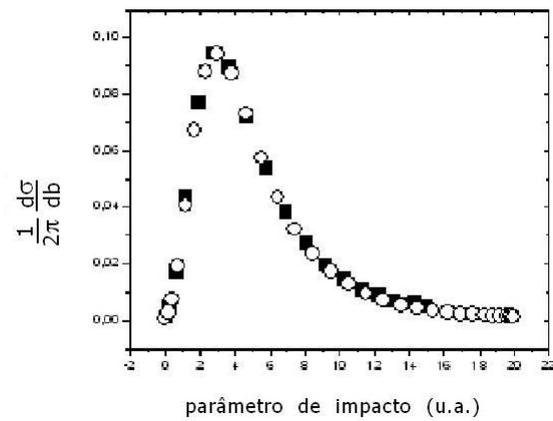


Figura 4.21: Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 2p$ à energia 100 keV; quadrado preto: $\delta x = 0,18$, bola branca: $\delta x = 0,2$

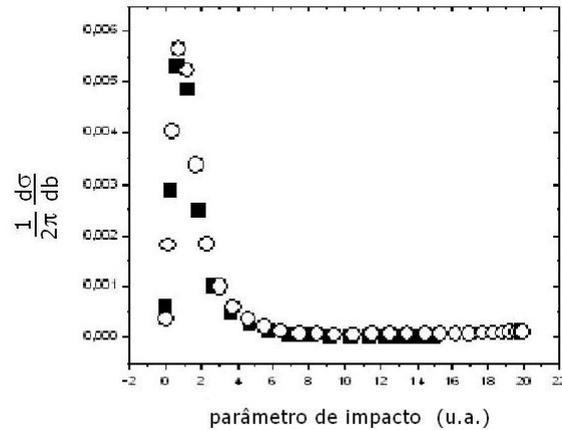


Figura 4.22: Seção de choque diferencial para excitação $1s \rightarrow 3s$ à energia 100 keV; quadrado preto: $\delta x=0,18$, bola branca: $\delta x=0,2$

Como já era de se esperar, nossos resultados mostram que há pouca sensibilidade dos parâmetros da malha para altas energias. Todos os gráficos apresentaram formas menos complexas do que os análogos a 10 keV. Com relação à transição $1s \rightarrow 2p$ vemos que a seção de choque diferencial é mais larga, tendendo a zero muito mais lentamente do que as demais. Isto trará conseqüências para a seção de choque total, como veremos na próxima seção.

4.5 Seção de Choque

Apresentamos agora o cálculo das seções de choque totais de excitação (em unidades de 10^{-18}cm^2) para os estados analisados com as diversas malhas. Nossos resultados são comparados com os de Kolakowska et al.(FD e FC) [40] e com os de canais acoplados de expansão em dois centros de Kuang e Lin [13]. Comparamos também com alguns valores experimentais disponíveis na literatura [44, 45, 46].

Na tabela 4.2 mostramos os resultados para impacto de próton a 10 keV.

<i>Estado</i>	<i>rede(b)</i>	<i>rede(d)</i>	<i>FD e FC</i>	<i>Kuang e Lin</i>	<i>experimental</i>
2s	5,84	7,16	5,62 - 5,54	5,0	$6,1 \pm 2,83^\dagger$
2p	22,68	21,40	21,60 - 19,50	21,20	$25,0 \pm 5,0^\ddagger$
3s	2,07	0,88	1,04 - 0,70	0,9	-

Tabela 4.2: Seções de choque para 10 keV em unidades de $10^{-18}cm^2$. Nossos resultados:(b) e (d); Kolakowska et al.[40]:FD e FC; Kuang e Lin [13]; †: referência [44]; ‡: referência [45]

Nossos resultados para $n = 2$ estão dentro da faixa dos dados experimentais, concordando razoavelmente bem com os resultados teóricos de Kolakowska et al. e Kuang e Lin. Embora compatível com os valores experimentais, o resultado para o estado 2s com a rede (d) está um pouco acima dos demais valores teóricos. Isso pode ser consequência do fato de que $\frac{d\sigma}{db}$ não convergiu a zero (vide gráfico 4.17). Para o estado 3s os valores obtidos não são confiáveis uma vez que, pelas análises anteriores, não dispomos de equipamentos para aumentar o tamanho da rede sem comprometer o espaçamento da malha.

Na tabela 4.3 apresentamos os resultados para impacto de próton a 100 keV.

<i>Estado</i>	<i>rede(a)</i>	<i>rede(d)</i>	<i>FD e FC</i>	<i>Kuang e Lin</i>	<i>experimental</i>
2s	8,59	9,29	9,64 - 10,0	10,0	$8,7 \pm 3,31^\dagger$
2p	96,03	95,50	86,5 - 78,1	76,2	$82,1 \pm 9,852^*$
3s	1,74	2,08	1,96 - 1,74	2,1	-

Tabela 4.3: Seções de choque para 100 keV em unidades de $10^{-18}cm^2$. Nossos resultados:(a) e (d); Kolakowska et al.[40]:FD e FC; Kuang e Lin [13]; † referência [44]; *: referência [46]

Para o estado 2s nossos resultados estão compatíveis com os valores teóricos e experimentais. Já para o estado 2p obtivemos resultados mais altos do que os demais: 10% maior do que os de Kolakowska et al. e 25% maior do que os de Kuang e Lin. Para o estado 3s os valores não são confiáveis, embora estejam dentro da faixa de valores teóricos.

Capítulo 5

Conclusão e Perspectivas

Neste trabalho foi feito um estudo de colisões do tipo próton - átomo de hidrogênio, analisando-se as probabilidades de excitação e respectivas seções de choque resolvendo uma equação de Schrodinger dependente do tempo para a função de onda eletrônica.

O nosso método mostrou-se adequado para o estudo de processos de excitação. Para energia de 10 keV obtivemos bons resultados para os estados com $n = 2$. O estado 3s necessita de redes maiores e, devido às limitações computacionais, não pudemos calcular bem essas seções de choque. Para energia de 100 keV nossos resultados para o estado 2p foram maiores do que os valores teóricos e experimentais. Deve-se levar em conta o fato de que os dados experimentais são valores normalizados e têm uma barra de erro bastante grande.

Todos os nossos resultados levam a crer que se tivéssemos uma malha mais densa e mais extensa conseguiríamos obter valores melhores. Em relação a isso serão feitas implementações de forma a aumentar a densidade e o tamanho das redes: (a) paralelização do programa, uma vez que nosso algoritmo é conveniente para isto, como visto na seção 3.2 e (b) alocação dinâmica de matrizes, permitindo que o espaço alocado por matrizes que não serão mais usadas ao longo do cálculo seja liberado.

Dando continuidade ao trabalho, pretendemos ampliar o estudo da excitação para estados mais energéticos, aumentar a faixa de velocidades da partícula incidente e calcular a seção de choque total. Vamos também dar início ao estudo de processos de troca de carga e ionização. Para o estudo de troca de carga mudaremos o referencial do sistema de coordenadas, colocando a origem no projétil. Quanto à ionização tentaremos resolver o problema no espaço de fase.

Estudos de excitação do átomo de hidrogênio por impacto de íons nús serão facilmente implementados com esta técnica, que poderão ser comparados com resultados experimentais disponíveis na literatura. Além disso, estudo de processo envolvendo alvos mais complexos (átomos com mais de um elétron) poderão ser analisados com a ajuda de potenciais-modelo, tipo Hartree-Fock.

Apêndice A

Unidades Atômicas

Em Física Atômica o cálculo de várias quantidade físicas pode ser simplificado introduzindo-se um sistema de unidades chamado *unidades atômicas*(u.a.).

O raio da órbita do elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio é conhecido como o primeiro raio de Bohr do hidrogênio e é denotado pelo símbolo a_0 .

$$a_0 = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{me^2} = 5.29177 \times 10^{-11}m$$

Neste sistema de unidades, a_0 é tido como a unidade de comprimento. A massa do elétron é usada como unidade de massa e \hbar como unidade de momento angular. Para completar o sistema a unidade de carga é tida como a magnitude absoluta e da carga eletrônica e a permissividade do espaço livre ϵ_0 é $1/(4\pi)$. Em unidades atômicas ($m = \hbar = e = 1, 4\pi\epsilon_0 = 1$), temos:

$$E_n = \frac{Z^2}{2n^2}u.a.$$

A energia do estado fundamental do hidrogênio ($Z = 1, n = 1$) é $-\frac{1}{2}u.a.$, e vemos então que a unidade atômica de energia é equivalente a 27.2 eV (Hartree). A unidade atômica de velocidade é igual à velocidade v_0 do elétron na primeira órbita

de Bohr do hidrogênio:

$$v_0 = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar} = \alpha c$$

onde

$$\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c}$$

que é conhecida como a *constante de estrutura fina* e tem valor $\alpha \simeq 1/137$.

A unidade de tempo expressa em unidades atômicas é

$$t_{u.a.} = \frac{a_0}{v_0}$$

Este é o tempo necessário para um elétron na primeira órbita de Bohr atravessar a distância equivalente a um raio de Bohr e equivale a $2,41888 \cdot 10^{-17}$ s.

Utilizaremos sempre o sistema de unidades atômicas.

Referências Bibliográficas

- [1] M. M. Sant'anna , F. Zappa, A. C. F. Santos, A. L. F. Barros, W. Wolff, L. F. S. Coelho e N.V. de-Castro-Faria, *Plasma Phys. And Control. Fusion* **46**, 1009 (2004)
- [2] J.S. Yoon e Y.D. Jung, *Phys. Plasma* **6**, 3391 (1999)
- [3] W.H. Liu e D.R. Schultz, *The Astrophys. J.* **530**, 500 (2000)
- [4] E. B. Jenkins , W. R. Oegerle, C. Gry, J. Vallergera, K.R. Sembach, R.L. Shelton,R. Ferlet, A. Vidal-Madjar, D.G. York, J.L. Linsky, K.C. Roth, A.K. Dupree e J. Edelman, *The Astrophys. J.* **538**, 81 (2000)
- [5] J. B. Greenwood, A. Chutjian e S.J. Smith., *The Astrophys. J.* **529**, 605 (2000)
- [6] R. Prioli, D. C. Reigada e F. L. Freire Jr., *Ap. Phys. Let.* **75**, 1317 (1999)
- [7] B. Coupier,B. Farizon, M. Farizon, M.J. Gaillard, F. Gobet, N.V. de-Castro-Faria, G. Jalbert, S. Ouaskit, M. Carre, P.Scheier e T. D. Mark, *European Phys. J. D* **20**, 459 (2002)
- [8] B.H. Bransden e C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, 2° ed, Pearson Education Limited
- [9] D.R. Bates e G. Griffing, *Proc. Phys. Soc. London. Sect. A* **66**, 961 (1953)
- [10] S.T. Manson e J.H. Macek,in: G.F.Drake (Ed.), *Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook*, AIP Press, Woodbury NY, 1996, p.598

- [11] W. Fritsch e C. D. Lin, Phys. Rep. **202**, 1 (1991)
- [12] A. L. Ford, J.F. Reading e K.A.Hall, J. Phys. B **26**, 4537 (1993)
- [13] J. Kuang e C.D.Lin, J. Phys B **29** 5443 (1996); **29**, 1207 (1996)
- [14] S.F.C. O'Rourke, D.M. McSherry e D.S.F. Crothers, Int. J. Quantum Chem. **99**, 569 (2004)
- [15] C. Harel, H. Jouin, B. Pons, L.F. Errea, L. Mendez e A. Riera, Phys. Rev. A **55**, 287 (1997)
- [16] C.Harel, L.F. Errea, C. Illescas, H. Jouin, L. Mendez, B. Pons e A. Riera, J. Phys. B **31**, 3199 (1998)
- [17] J.C. Wells, D.R. Schultz, P. Gravas e M.S. Pindzola, Phys. Rev. A **54**, 593 (1996)
- [18] D.R. Schultz, M.R. Strayer e J.C. Wells, Phys. Rev. Lett. **82**, 3976 (1999)
- [19] V. Mohan e N. Sathyamurthy, Comp. Phys. Rep. **7**, 213 (1988)
- [20] M.I. Hernández, A. García-Vela, J. Campos-Martínez, O. Roncero, P. Villarreal e G. Delgado-Barrio, Comp. Phys. Com **145**, 97 (2001)
- [21] T. Kirchner, H. J. Lüdde, O. J. Kroneisen e R.M. Dreizler, Nucl. Instrum. Meth. in Phys. Res. B **154**, 46 (1999)
- [22] J. Ullrich, R. Moshhammer, R. Dörner , O. Jagutzki, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking e L. Spielberger, J.Phys.B **30**, 2917 (1997); R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, J. Ullrich, R. Moshhammer e H. Schmidt-Böcking, Phys. Rep. **330**, 95 (2000)
- [23] H. M. Boechat Roberty e C. E. Bielschowsky, G. G. B. de Souza, Phys. Rev. A **44**, 1694 (1991)

- [24] A. F. Lago, A. C. F. Santos e G. G. B. de Souza, *J. of Chem. Phys.* **120**, 9547 (2004)
- [25] F. Zappa, G. Jalbert, L.F.S.Coelho, A.B. Rocha, S.D. Magalhães e N.V. de-Castro-Faria, *Phys. Rev. A* **68**, 012703 (2004)
- [26] F. Zappa, L.F.S. Coelho, S.D. Magalhães, W. M. S. Santos, A. M. Luiz, M. H. P. Martins, A. L. F. Barros, J. A. M. Pereira e N.V. de-Castro-Faria, *Phys. Rev. A* **67**, 012702 (2003)
- [27] G. Gasaneo, W. Cravero, M.D. Sanchez e C. R. Garibotti, *Phys. Rev. A* **54**, 439 (1996)
- [28] S.Y. Ovchinnikov, G.N. Ogurtsov, J.H. Macek e Yu.S. Gordeev, *Phys. Rep.* **389**, 119 (2004)
- [29] N. Toshima e A. Igarashi, *Phys. Rev. A* **45**, 6313 (1992)
- [30] R. F. Nascimento, G. Jalbert e A. Rocha, Tese de Mestrado (2004) - “Ionização do átomo de neônio por impacto de próton no formalismo CDW- EIS”
- [31] D.S.F. Crothers e J.F. MacCann, *J. Phys. B* **16**, 3229 (1983)
- [32] R. Abrines e I.C. Percival, *Proc. Phys. Soc. London* **88**, 873(1966)
- [33] D Eichenauer, N. Grun e W. Scheid, *J. Phys. B* **15**, 17 (1982)
- [34] C.J. Wood, C.R. Feeler e R.E. Olson, *Phys. Rev. A* **56**, 3701 (1997)
- [35] D.R. Bates e R. McCarroll, *Proc. R. Soc.* **245**, (1958)
- [36] M.S. Pindzola, *Phys. Rev. A* **60**, 3764 (1999)
- [37] V. Maruhn-Rezwani, N. Grün e W. Scheid, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 512 (1979)
- [38] C. Bottcher, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 85 (1982)

- [39] K.C. Kulander, K. R. Sandhya Devi e S. E. Koonin, Phys. Rev. A **25**, 2968 (1982)
- [40] A. Kolakowska, M.S. Pindzola, F. Robicheaux, D.R. Schultz e J. C. Wells, Phys. Rev. A **58**, 2872 (1998)
- [41] W.H. Press, S.A. Teulosky, W.T. Vetterling e B.P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran, Cambridge University Press (1997)
- [42] NAG Fortran Library - <http://www.nag.co.uk/numeric/fl/manual/pdf/D03/d03ecf.pdf>
- [43] H. L. Stone e J. Numer. Anal. **5**, 530 (1968)
- [44] D.P. Higgins, J. Geddes e H.B.Gilbody, J. Phys. B **29**, 1219 (1996)
- [45] T.F. Morgan, J. Geddes e H.B. Gilbody. J. Phys. B **6**, 2118 (1973)
- [46] D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner e K-H. Schartner, J. Phys. B **27**, 4195 (1994)
- [47] C. Cohen Tannoudji, B. Diu e F. Saloë, *Quantum Mechanics*-vol 1, pg 308 - complemento F_{III}

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)