

Métodos numéricos avanzados en física atómica

1 Necesidad de datos atómicos y dificultades para calcularlos

La única forma de hacer un diagnóstico (o sea, estudiar la constitución, temperatura, densidad electrónica, etc.) de una estrella o de un plasma como el que puede haber en un Tokamak[§], es analizando la luz emitida por este, o sea, por medio de la espectroscopía.

El método más general de diagnóstico, tanto en plasmas de laboratorio como en plasmas estelares, consiste en tomar dos líneas espectrales y comparar sus intensidades. Un ejemplo muy típico son las transiciones hidrogénicas K_α y K_β , como las que muestra la Figura 1, utilizadas comunmente para analizar plasmas astrofísicos, y de laboratorios de fusión. Algunos pares de líneas se escogen porque son independientes de la densidad electrónica y proporcionan un eficiente índice de la temperatura, y otras se escogen por lo contrario (con el objetivo de determinar la densidad). Las relaciones entre las intensidades de las líneas espectrales se pueden encontrar de

$$\frac{I_{ij}}{I_{kl}} = \frac{n_i \hbar \omega_{ij} A_{ij}}{n_k \hbar \omega_{kl} A_{kl}}, \quad (1)$$

donde n_i es la población relativa del nivel i , ω_{ij} es la frecuencia de la transición $i \rightarrow j$, y A_{ij} es la probabilidad de dicha transición (coeficientes de Einstein). Para

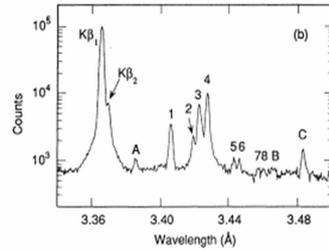
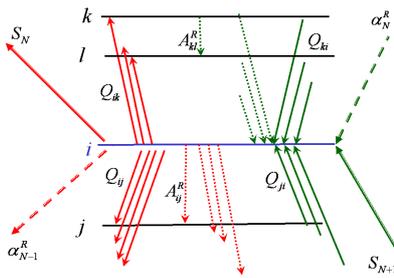


Figure 1: Líneas espectrales K_α y K_β del Mg^{+10} , obtenidas en experimentos de EBIT. (Beiersdorfer et. al. PRE 52, 1995)



$$\frac{\partial N_j}{\partial t} = \underbrace{\sum_{k \neq j} N_k n_e Q_{k \rightarrow j}}_{\text{Population by excitation } k \rightarrow j} + \underbrace{\sum_{k > j} N_k A'_{k \rightarrow j}}_{\text{Population by radiation } k \rightarrow j} - \underbrace{\sum_{k \neq j} N_j n_e Q_{j \rightarrow k}}_{\text{Depopulation by excitation } k \rightarrow j} - \underbrace{\sum_{i < j} N_j A'_{j \rightarrow i}}_{\text{Depopulation by radiation } k \rightarrow j}$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \sum_{k \neq i} N_k n_e Q_{k \rightarrow i} + \sum_{k > i} N_k A'_{k \rightarrow i} - \sum_{k \neq i} N_j n_e Q_{j \rightarrow i} - \sum_{i < i} N_i A'_{i \rightarrow i}$$

$$\frac{\partial N_l}{\partial t} = \dots$$

Figure 2: Procesos que depueblan (izquierda) y pueblan (derecha) un determinado nivel energético i . Las líneas de puntos representan transiciones radiativas (A), y las líneas llenas representan transiciones colisionales (Q). Las líneas S y α representan ionización y recombinación a los iones adyacentes, respectivamente.

conocer la población de los niveles energéticos n_i , se deben resolver sistemas de ecuaciones acopladas, donde los coeficientes vienen dados por las distintas probabilidades de transición – capaces de poblar o depoblar los estados – por medio de

[§]Para saber que es un Tokamak, su función y objetivo, y la importancia del ITER como probable solución al problema energético mundial, se recomienda el sitio <http://www.iter.org>

colisiones con electrones (Q) y fotones (A). Este sistema de ecuaciones consiste, en un caso típico, en cientos o miles de niveles. Si hablamos por ejemplo de un sistema de tan sólo 100 niveles, tendremos que incluir $\approx 10^5$ coeficientes (entre los Q_{ij} , A_{ij} , Q_{ji} , A_{ji} , etc.). Sin embargo, una gran parte de los datos atómicos que se utilizan en estos cálculos no han sido generados por métodos teóricos modernos, y en general estos valores pueden considerarse al menos como sospechosos. El objetivo actual de la física atómica es proveer estos coeficientes con un grado de error aceptable. Para que las soluciones tengan algún sentido práctico, este grado de error debe ser menor a un 10%, lo que se considera un **gran desafío**.

2 Los métodos de cálculo

Existen distintos modos de enumerar los diferentes métodos de cálculo en colisiones atómicas. yo propongo clasificarlos en dos grandes familias:

1. **Perturbativos**
2. **No-Perturbativos** (entre los cuales podemos también hacer una separación entre independientes y dependientes del tiempo).

Como es de suponer, cada uno de estos métodos tiene sus diferentes grados de desarrollo, ventajas y desventajas. En nuestro grupo hemos producido importantes contribuciones en cada uno de estos métodos. Elegiremos para este texto, hacer una breve exposición de tan solo uno de ellos: el método *Time-Dependent Close Coupling* (TDCC), que pertenece al segundo de los grupos citados.

2.1 Evolución de la ecuación de Schrödinger en el tiempo (método TDCC)

Los métodos de cálculo de colisiones atómicas no-perturbativos, son también llamados “puramente cuánticos” o “exactos”. Estos procedimientos no tienen aproximaciones incontroladas, y el efecto de las aproximaciones numéricas se puede hacer – en principio – arbitrariamente pequeño. Esto es lo que distingue a los “*métodos exactos*” de otros métodos teóricos. En el método TDCC, se trata de resolver en forma exacta la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. En los cursos básicos de cuántica hemos estudiado exhaustivamente ejemplos unidimensionales de este problema, por ejemplo analizando la propagación temporal de un paquete de ondas Gaussiano y su interacción con diversos tipos de pozos o barreras, o visualizando la evolución temporal de estados coherentes del oscilador armónico[†].

Como hemos visto, la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\Psi(r, t)}{dt} = \hat{H}\Psi(r, t), \quad (2)$$

cuya solución es

$$\Psi(r, t + \Delta t) = \hat{U}(t + \Delta t, t)\Psi(r, t) = e^{-\frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar}}\Psi(r, t) \quad (3)$$

describe la evolución de un estado cuántico $\Psi(r, t)$, determinando en qué estado se encontrará en un tiempo posterior ($t + \Delta t$). Esta función evolucionada en el tiempo, contiene toda la información física del problema. Es decir, dado un estado inicial y un potencial determinado, la función de onda evoluciona de acuerdo a lo que le dicte este potencial. Si estamos interesados en calcular algún proceso en particular,

[†]Ver, por ejemplo, mis páginas web de los cursos Física 4 y Física Teórica 2, donde se ofrecen diversos ejemplos, tanto en la parte de problemas, como en las prácticas computacionales

simplemente debemos proyectar a esta función de onda, obteniendo la amplitud (o sección eficaz) que dictamina la probabilidad de que este proceso particular ocurra. Por ejemplo, si queremos saber cuál es la probabilidad \mathcal{P}_n de que nuestra función de onda Ψ se encuentre en un estado final φ_n , debemos proyectar

$$\mathcal{P}_n(t) = |\langle \varphi_n(r) | \Psi(r, t) \rangle|^2. \quad (4)$$

Para el caso del cálculo de la ionización del átomo de hidrógeno es posible resolver *exactamente* la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Esto se hace representando al electrón incidente por medio de un paquete de ondas, produciendo la colisión con el átomo evolucionando el paquete en el tiempo, y finalmente extrayendo toda la información física de la función de onda final. En el caso particular de la ionización, se proyecta en estados en los cuales hay dos electrones libres (el incidente, y el ionizado).

3 Sorpresa: ¡El átomo de hidrógeno resiste!

Cualquiera de los alumnos de cuántica que haya resuelto ejercicios computacionales similares a los propuestos en mis cursos, habrá notado lo simple y rápido que resulta propagar la solución de la ecuación de Schrödinger en el tiempo. Mediante este cálculo, se pueden resolver numerosos problemas físicos, utilizando recursos computacionales mínimos (aún en los casos en que se ha sacrificado la optimización computacional por la claridad y simplicidad pedagógica). El mismo problema citado de ionización del hidrógeno (en un modelo unidimensional), puede ser resuelto con facilidad con un bajo costo computacional.

La ecuación de Schrödinger se conoce por más de 80 años. La solución de los estados ligados del Helio (el inicio de la química cuántica moderna) se pudo calcular con extraordinaria precisión en 1950. El ejemplo más simple de ruptura de ligaduras – la ionización de un átomo de hidrógeno por impacto de un electrón – es un problema que se remonta a los tiempos de la invención de la mecánica cuántica. Es de esperar que el paso de un modelo unidimensional, al cálculo real en un espacio de tres dimensiones, no ofrezca mayores dificultades.

Si bien debemos interpretar a la colisión electrón-átomo, como un problema de 3 partículas – el electrón incidente, y las dos partículas (electrón y protón) del átomo blanco – contamos con las herramientas necesarias para simplificar el problema. Hemos aprendido tanto en los cursos de mecánica como en los de cuántica, que podemos trabajar con las coordenadas del centro de masa, y de esta manera reducir, formalmente, este problema de tres partículas, a uno de sólo dos partículas. Tenemos entonces un problema de seis dimensiones (3 por cada partícula). Afortunadamente, también hemos aprendido en electromagnetismo (y en cuántica), que cuando tenemos un potencial central, podemos hacer uso de la expansión en armónicos esféricos, y así convertir este problema de seis dimensiones, en una suma de ondas parciales bidimensionales[¶]. Ahora nuestro problema tiene dos dimensiones, y no parece ser tan complicado como para no poder ser resuelto con computadoras simples modernas.

[¶]La función de onda total se expande en armónicos esféricos acoplados para cada momento angular orbital \hat{L} , y spin \hat{S}

$$\Psi^{LS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \sum_{l_1, l_2} \frac{P_{l_1 l_2}^{LS}(r_1, r_2, t)}{r_1 r_2} \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2 0}^{l_1 l_2 L} Y_{l_1}^{m_1}(\hat{r}_1) Y_{l_2}^{m_2}(\hat{r}_2) \quad (5)$$

donde $C_{m_1 m_2 0}^{l_1 l_2 L}$ son los coeficientes de Clebsch-Gordan, y $Y_l^m(\hat{r})$ los armónicos esféricos.

Sin embargo, llegamos a la última semana del siglo XX, y vemos la sorprendente tapa del último número del milenio de la prestigiosa revista Science, que dice:



"...Collisionally ionized hydrogen, the simplest nontrivial three-body Coulomb scattering problem in quantum mechanics, has now been solved from first principles..."

Figure 3: Science vol 286, 24 Diciembre 1999. Rescigno *et al.*, p. 2474.

Resulta increíble que un problema tan simple haya resistido su solución desde la invención de la mecánica cuántica hasta nuestros días. Supongo que resultará más sorprendente aún para aquellos que no conozcan el tema, leer en dicho artículo, que para lograr resolver este problema ¡se debió recurrir a la más poderosa de las supercomputadoras existentes en ese momento! (NERSC, en Berkeley, EEUU).

4 Y por qué supercomputadoras?

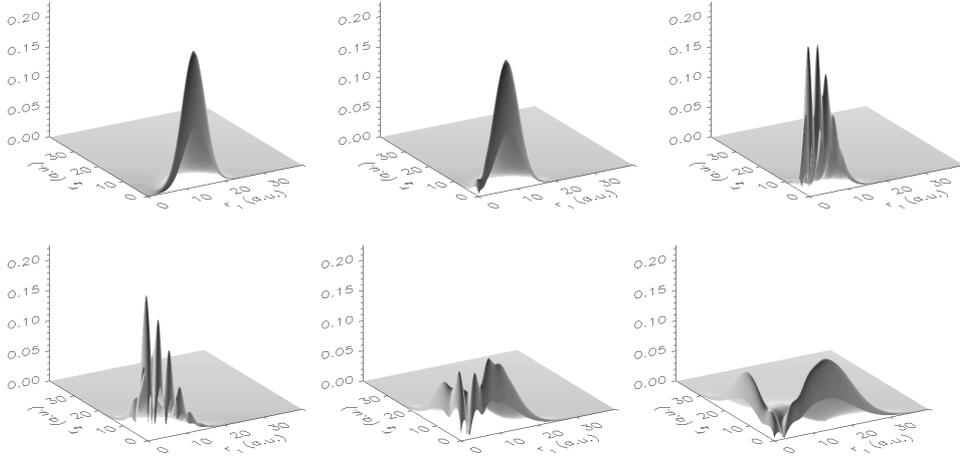
Explicaré en dónde reside la dificultad. Existe una variedad de métodos numéricos que permiten obtener la solución de la Ec. (2), pero en todos ellos, la estabilidad y precisión de los resultados dependen en gran medida de dos parámetros importantes: El primer parámetro es la cantidad de puntos que se utilizan en la grilla numérica, tanto para representar las funciones de onda como a los operadores. En los casos típicos más simples, se requieren $\approx 10^2 - 10^3$ puntos para obtener una representación decente de las funciones de onda. El segundo parámetro es la magnitud del paso temporal Δt , que obliga a propagar la solución en unos $10^3 - 10^4$ pasos temporales intermedios, ya que hacerlo en menos pasos produciría una solución muy inestable. En nuestro caso, se trata de representar la función de onda como una combinación lineal de funciones radiales con sus respectivos armónicos esféricos ("canales acoplados"). En un cálculo típico se necesitan alrededor de 10–15 canales. Las funciones radiales bidimensionales requieren como mínimo de una grilla numérica de $(r_1 \times r_2 \approx 10^5)$ puntos. ¡Imaginemos los recursos necesarios para realizar decenas de miles de propagaciones temporales, a una función de onda de millones de puntos!

5 Nuestros resultados

Continuando con el ejemplo más sencillo que se puede analizar en colisiones atómicas, veremos como se visualiza la colisión entre un electrón y un átomo de hidrógeno en el formalismo TDCC. En la Figura (4) vemos algunas imágenes** que ilustran este proceso. El electrón incidente está representado por un paquete de ondas Gaussiano (ya que, como hemos visto en los cursos de introducción a la física cuántica, esta es la función con menor dispersión). Lo que vemos entonces en el primer cuadro es una función inicial

$$\Psi(r_1, r_2, t = 0) = \varphi_{1s}(r_1) G_k(r_2) \quad (6)$$

**En mi página web se muestran películas

Figure 4: Evolución temporal de la función de onda $\Psi(t)$.

donde $\varphi_{1s}(r)$ es el estado fundamental del hidrógeno, y $G_k(r)$ representa al electrón incidente con momento $k^{\dagger\dagger}$. En los sucesivos marcos se puede visualizar cómo el electrón se acerca al origen (donde está ubicado el protón), interactúa con él, y finalmente, continúa su evolución. Proyectando esta función de onda en diferentes estados, obtendremos las probabilidades de excitación, dispersión elástica e ionización.

6 Conclusiones

El acceso a las supercomputadoras de última generación nos ha permitido, por decirlo de alguna manera, iniciar una nueva era en la física atómica. Ahora somos capaces de reelaborar métodos que antes resultaban imposibles de implementar, o de modificar los métodos existentes ampliándoles su rango de uso. En el caso particular de este tema de investigación, aprender a solucionar la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo nos ha permitido incursionar en un nuevo dominio. Tenemos actualmente la capacidad de monitorear completamente la evolución temporal de un proceso de colisión. Si bien se puede pensar que esto tiene más motivaciones académicas que prácticas, con las nuevas capacidades de los láseres de pulsos (que acceden al dominio de los *femto* y *atto* segundos), se abre un interesantísimo campo de interacción entre los experimentos y la teoría.

Pero más allá del análisis temporal, el método desarrollado es exacto. Hasta hace muy poco tiempo se consideraba al experimento como la última palabra con la que había que cotejar los cálculos. Como hemos mostrado en varios artículos, hoy en día ha cambiado este paradigma, y dada la excepcional coincidencia entre los nuevos resultados teóricos, son los experimentos los que tratan de ajustarse a los cálculos.

Para finalizar, daremos un ejemplo de la importancia de los métodos no perturbativos. Hemos estudiado exhaustivamente colisiones por impacto de electrones en el Litio y el Berilio. Estos elementos se usan en haces neutrales como diagnóstico para determinar los parámetros locales del plasma en experimentos de fusión. Estos elementos livianos se inyectan dentro de los plasmas del Tokamak, de manera que

^{††}Si bien la función de onda debe ser antisimétrica, por una conveniencia de visualización, y de economía de cálculo, nosotros realizamos la antisimetrización en la proyección, y no en la propagación.

su flujo y las subsecuentes ionizaciones se puedan monitorear espectroscópicamente. Las observaciones experimentales se comparan con los resultados de los cálculos de transportes de impurezas. Estos códigos son absolutamente dependientes de la precisión que puedan tener las bases de datos de las colisiones atómicas respectivas. Nuestros resultados muestran que utilizando los métodos de cálculo perturbativos (aproximación de Born, ondas distorsionadas, etc.), se obtienen grandes diferencias respecto a los resultados puramente cuánticos, diferencias que en algunos casos pueden llegar a más de un orden de magnitud.

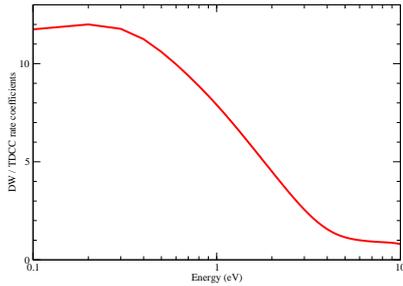


Figure 5: Comparación entre los coeficientes de ionización del Be, utilizando métodos perturbativos (DW) y cuánticos (TDCC).

Actualmente estamos extendiendo los métodos de cálculo para otros sistemas, incluyendo interacciones de pulsos láseres, sistemas con más partículas, átomos confinados en fullerenos, y colisiones de protones con superficies, entre otros. En un tiempo en el que las supercomputadoras son necesarias para investigar la “complejidad” del mundo físico estudiando sistemas que cada vez son más grandes, es importante destacar que el mismo poder computacional es necesario para dar respuesta a preguntas de física y química básica, aún para algunos de los sistemas más simples que podamos imaginar.