

02.76.12

1 1976

SOBRE EL USO DE APROXIMANTES RACIONALES
EN EL CALCULO DE SECCIONES EFICACES DI-
FERENCIALES Y TOTALES DE PROCESOS DE
DISPERSION NO RELATIVISTAS

FERNANDO FRANKLIN GRINSTEIN

Noviembre 1976

oooOooo

Tesis presentada en el Instituto de Física
"Dr. J.A. Balseiro", Universidad Nacional de
Cuyo, Comisión Nacional de Energía Atómica,
para obtener el título de Doctor en Física.

a Julia

INTRODUCCION Y RESUMEN

En el cálculo de secciones eficaces diferenciales para // procesos de dispersión no relativistas, podemos distinguir, en líneas generales, tres rangos de energía. En la de bajas energías, / los cálculos pueden realizarse en forma satisfactoria, mediante el método de las ondas parciales, evaluando un número reducido de co - rrimientos de fase de las funciones de onda correspondientes a mo - mento angular definido. En la de altas energías, el primer térmi - no del desarrollo de la amplitud de dispersión, como serie de po - tencias de la constante de acoplamiento, proporciona resultados muy buenos, siendo a la vez, un método atrayente por su simplicidad / / formal y numérica. La región donde normalmente se presentan difi - cultades de cálculo, es en la zona que podríamos llamar, de ener - gías intermedias. Pretender extender el método de las ondas par - ciales a esta zona, involucra enfrentar el hecho de que al crecer / la energía, aumenta el número de ondas parciales necesarias para // obtener convergencia del desarrollo de la amplitud de dispersión, y con ello, el esfuerzo numérico. Por otro lado, al extender el mé - todo de las altas energías a esta zona, se necesitan órdenes per - turbativos superiores al primero en la serie de Born. Dada la di - ficultad inherente al cálculo de los órdenes altos, este método re - sulta adecuado solamente si la convergencia de dicha serie es monó - tona, y requiere unos pocos términos de la misma. En general, los límites correspondientes a las mencionadas regiones energéticas de - penden del proceso particular considerado. Valores típicos para // colisiones elásticas e inelásticas e-H y e-He , por ejemplo, son alrededor de 25 eV , para el límite superior de la zona de baja // energía, y del orden de 2 KeV , para el inferior de la de alta e - nergía.

Según los casos físicos considerados, en la zona de ener -

gías intermedias, otros métodos de aproximación, como el semiclásico JWKB , o el de la función de onda distorsionada, por ejemplo, / pueden describir el proceso de dispersión. Sin embargo, dado que / uno de los métodos usuales para resolver problemas físicos consiste en el desarrollo de la solución en algún tipo de serie, y la importancia de hallar mecanismos matemáticos que permitan sumar rápida y eficientemente la misma, en este trabajo nos limitaremos a una base matemática única, ésta es, el desarrollo de la amplitud de dispersión en serie de polinomios, sean éstos función de la intensidad / del potencial o del momento transferido, encarándose, el problema / de encontrar algoritmos matemáticos que posibiliten la extensión // adecuada de los métodos de la serie de Born y de las ondas parciales, a la región de energías intermedias.

En la sección 1 , se considera la extensión del primero de ellos, mediante el método de los aproximantes racionales de Padé. Se introducen las ecuaciones de Lippman-Schwinger para la función / de onda y para el operador de dispersión T , obteniéndose, por iteración de las mismas, las correspondientes series de Born. Para la dispersión por un potencial, se estudia, en particular, la convergencia del desarrollo perturbativo de la función de onda, y las / / condiciones suficientes que aseguran la misma. El análisis de trabajos recientes, en los que se intenta mejorar la primera aproximación de Born, considerando términos de orden superior en el desarrollo, indica que la convergencia de éste último, es lenta, no monótona, siendo en oportunidades divergente, aún para energías relativamente altas. Ello cuestiona seriamente la utilidad de los primeros términos de la serie de Born, para los cálculos de secciones eficaces diferenciales a energías intermedias.

En la sección 1.4 , se introducen los aproximantes racionales de Padé, y se establece su relación con la resolución del

problema de dispersión en subespacios de dimensión finita, a través del principio variacional de Schwinger. Dada la ya mencionada dificultad de cálculo de los órdenes perturbativos superiores al primero, el esquema es aplicado, a efectos de su ensayo, a ejemplos de dispersión por potenciales de corto alcance, para los cuales se // dispone del conocimiento de varios de esos órdenes, y en los cuales, las sumas parciales de la serie de Born, asociadas, presentan un // comportamiento anómalo en el sentido indicado más arriba. Para los potenciales de Yukawa y Exponencial, se evalúan las tablas de Padé, hasta los órdenes permitidos por los términos disponibles de los // respectivos desarrollos perturbativos. El estudio de las mismas, / demuestra que la sucesión de sumas parciales de la serie de Born es, al menos para los casos considerados, una de las sucesiones más pobremente convergentes. La convergencia de otras sucesiones de la / tabla, resulta ser rápida, y a los valores correctos, aún para ciertos casos asociados al potencial de Yukawa, para los cuales es sabido que la serie de Born para la función de onda es divergente. De este modo, el método de los aproximantes de Padé, resulta ser adecuado para extraer la información contenida en los primeros órdenes perturbativos, de manera tal, de permitir la obtención de resultados significativos para la sección eficaz diferencial a energías // intermedias.

En la sección 2 , se considera la extensión del método / de las ondas parciales a la zona de energías intermedias. Un campo donde resulta de fundamental importancia el poder efectuar una tal extensión, en forma eficiente, es en la física de las colisiones / atómicas y moleculares. En él, las interacciones son predominantemente de largo alcance, determinando ésto último, una contribución importante de los términos correspondientes a grandes valores del / momento angular, en los desarrollos en ondas parciales de la ampli-

tud de dispersión, y de la sección eficaz total, y una lenta con convergencia de los mismos. Esta situación requiere el cálculo de // cientos, y en oportunidades, de miles, de corrimientos de fase, con los consiguientes esfuerzos numéricos. En este trabajo, el problema de la aceleración de la convergencia de la serie que define la / amplitud de dispersión, se encara mediante el uso de dos algoritmos numéricos: el esquema de los aproximantes racionales polinomiales / (A.R.P.), y el de los aproximantes de Padé puntuales (A.P.P.).

El esquema de los A.R.P., que es considerado formalmente en la sección 2.3 , es, básicamente, una generalización natural // del método de los aproximantes de Padé, adaptando éste último, para su aplicación a series en polinomios ortogonales.

El de los A.P.P., y sus métodos recurrentes de cálculo, / los algoritmos Epsilon y Eta, se estudia en la sección 2.4 . Para potenciales con comportamiento asintótico del tipo $V(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} A/r^n$, y para los casos en que los correspondientes desarrollos en ondas / parciales de la amplitud de dispersión hacia adelante y hacia atrás, y de la sección eficaz total, son convergentes, se demuestran teo - remas que aseguran la convergencia de los A.P.P. a los valores co - rrectos, y que, en todos esos casos, la misma es más rápida que la / correspondiente a las respectivas sucesiones de sumas parciales de dichos desarrollos. De este modo, el método resulta apropiado, en particular, para el estudio de procesos de colisión entre partícu - las cargadas y átomos neutros polarizables, o entre moléculas, ca - sos para los cuales, se verifican las hipótesis de los teoremas.

En la sección 2.5 , se considera la aplicación numérica / de los A.R.P. y A.P.P. a distintos casos significativos desde el // punto de vista físico, en los cuales se hallan presentes dificultades en el cálculo de la amplitud de dispersión a través de su desa - rrollo en ondas parciales, provenientes de las propiedades de con - vergencia de éste último: el caso del potencial coulombiano, pre -

sente en las colisiones entre partículas cargadas, y caracterizado por un desarrollo divergente para la amplitud de dispersión; el del potencial $1/r^2$, que tiene asociado un desarrollo divergente, para la amplitud hacia adelante, oscilante hacia atrás, y lentamente convergente para ángulos de dispersión intermedios; dos casos típicos de procesos de colisiones atómicas y moleculares en la zona de energías intermedias, la colisión elástica H_2-H_g en el rango de 0.0011 - 0.11 eV, descrita por un potencial de Lennard-Jones, y la colisión elástica e-He, en el rango 100-400 eV, estudiada con el método del potencial de polarización extendida.

Ambos métodos de aproximación demuestran su valor como // mecanismos de regularización del desarrollo divergente de la amplitud, correspondiente al caso coulombiano, y del oscilante, asociado a la amplitud hacia atrás, para el $1/r^2$. Sin embargo, la importancia de ello es relativa, en el primer caso, ya que como se indica en la sección 2.5-I, el conocimiento de la amplitud exacta correspondiente al potencial $2\alpha/r$, permite su sustracción de la amplitud total de interés, cuando se hallan presentes, además del // coulombiano, otros potenciales de menor alcance.

La evidencia numérica indica, por otro lado, el valor de ambos tipos de aproximantes como métodos de suma de desarrollos en ondas parciales lentamente convergentes, aún, para casos para los // que no se dispone del conocimiento de las propiedades formales de // convergencia de aquellos. Ello se manifiesta, en particular, en un considerable aumento en la precisión final de los resultados, cuando obtenidos con los aproximantes a partir de un dado número de de corrimientos de fase, en relación con el cálculo tradicional con las // sumas parciales. Consecuentemente, los métodos de aproximación // // considerados, proporcionan medios eficientes para efectuar los // cálculos de procesos de colisiones atómicas y moleculares en la zona de energías intermedias, a partir del método de las ondas par- //

ciales, reduciendo considerablemente, el importante trabajo numérico usualmente involucrado en los mismos.

Se destacan las posibles aplicaciones de estos esquemas, a otros desarrollos en serie, que aparecen típicamente al resolver problemas físicos, donde pudieran estar presentes dificultades // provenientes de una pobre convergencia de los mismos.

Las conclusiones de la tesis expuesta, están dirigidas a enfatizar la importancia de introducir métodos numéricos más eficientes en el cálculo de procesos físicos. De este modo, pueden / reducirse los esfuerzos necesarios para obtener teóricamente las / cantidades medibles, y a la vez, ampliar el rango de procesos accesibles al cálculo numérico.

INDICE

1. EL METODO PERTURBATIVO.

| | |
|---|----|
| 1.1 - Ecuación integral de la dispersión. Principios varia- cionales | 1 |
| 1.2 - La serie de Born | 4 |
| 1.3 - Convergencia de la serie de Born | 6 |
| 1.4 - Aplicaciones prácticas de la serie de Born | 8 |
| 1.5 - El método de los aproximantes racionales de Padé | 10 |

2. EL METODO DE LAS ONDAS PARCIALES.

| | |
|---|----|
| 2.1 - Los desarrollos en ondas parciales de la amplitud de dispersión y de la sección eficaz total | 16 |
| 2.2 - Aplicaciones prácticas del método de las ondas parciales | 19 |
| 2.3 - Aproximantes racionales polinomiales (A.R.P.) | 22 |
| 2.4 - Aproximantes de Padé puntuales (A.P.P)\,..... | 27 |
| 2.5 - Aplicaciones numéricas de los A.R.P. y A.P.P. | 44 |

| | |
|------------------------------|----|
| Apéndice I | 60 |
| Apéndice II | 61 |
| Agradecimientos | 64 |
| Referencias | 65 |
| Explicación de tablas | 68 |
| Explicación de figuras | 80 |

1. EL METODO PERTURBATIVO

1.1 - Ecuación integral de la dispersión. Principios variacionales.

Comenzaremos con la consideración de la dispersión de una partícula de masa m por un potencial $gV(\underline{r})$. La ecuación de // Schrödinger correspondiente será

$$(H_0 + gV(\underline{r}) - E) \psi(\underline{r}) = 0 \quad (1.1.1)$$

A grandes distancias del centro de fuerzas, donde el potencial se // supone despreciable, las formas asintóticas para las funciones de // onda "entrante" (-), y "saliente" (+), serán

$$\psi^\pm(\underline{r}) \sim \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) + r^{-1} f^\pm(\theta, \phi) \exp(\pm ikr) \quad (1.1.2)$$

donde $\varphi_{\underline{k}}$ es autofunción de H_0 con autovalor E , $k = |\underline{k}|$, $k^2 = 2mE/\hbar^2$, $r = |\underline{r}|$, y se ha elegido la dirección de \underline{k} como eje po- // lar de un sistema de coordenadas esféricas. Sustituyendo (1.1.2) // en (1.1.1), y despreciando $gV(\underline{r})$ y términos de orden r^{-2} , es // fácil ver que soluciones $\psi(\underline{r})$ con comportamiento asintótico // (1.1.2) existen para $f^\pm(\theta, \phi)$ arbitrarios. Sin embargo, el desprec- // iar $gV(\underline{r})$ es consistente con ellas sólo si $V(\underline{r})$ verifica

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r |V(\underline{r})| = 0 \quad (1.1.3)$$

Esto excluye, en particular, el caso del potencial coulombiano, pe- // ro incluye todos los demás casos de interés físico.

Definiendo el vector \underline{k}' , tal que $|\underline{k}'| = |\underline{k}| = k$, y cuya // dirección es la caracterizada por (θ, ϕ) , la amplitud de disper- // sión $f^\pm(\theta, \phi)$ puede también definirse a partir del operador de // dispersión T mediante la expresión⁽¹⁾

$$f^+(\theta, \emptyset) = -m/2\pi \cdot \langle \underline{k}' | gV | \Psi^+(\underline{k}) \rangle = -m/2\pi \cdot \langle \underline{k}' | T | \underline{k} \rangle \quad (1.1.4)$$

donde hemos introducido los autovectores $|\underline{k}\rangle$ de H_0 , tales que $\varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle$. La sección eficaz diferencial $I(\theta, \emptyset)$ vendrá dada por

$$I(\theta, \emptyset) = |f^+(\theta, \emptyset)|^2 = m^2/4\pi^2 \cdot |\langle \underline{k}' | T | \underline{k} \rangle|^2 \quad (1.1.5)$$

mientras que la total, por

$$Q = \int I(\theta, \emptyset) d\Omega \quad (1.1.6)$$

Resolviendo formalmente la ecuación de Schrödinger (1.1.1) mediante el método de la función de Green⁽¹⁾, es posible obtener una ecuación integral para $\Psi(\underline{r})$ que incorpora la condición de contorno // (1.1.2)

$$|\Psi^\pm(\underline{k})\rangle = |\underline{k}\rangle + G_0^\pm gV |\Psi^\pm(\underline{k})\rangle \quad (1.1.7)$$

donde

$$G_0^\pm = (E - H_0 \pm i\epsilon)^{-1} ; \quad \epsilon > 0 \quad (1.1.8)$$

En particular, si $H_0 = -\hbar^2/2m \nabla^2$, $\varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \exp(i\underline{k} \cdot \underline{r})$, se tiene /

$$\Psi^\pm(\underline{r}) = \exp(i\underline{k} \cdot \underline{r}) + g \int G_0^\pm(\underline{r}, \underline{r}') U(\underline{r}') \Psi^\pm(\underline{r}') d\underline{r}' \quad (1.1.7')$$

con $U(\underline{r}) = 2m/\hbar^2 V(\underline{r})$, y

$$G_0^\pm(\underline{r}, \underline{r}') = -m/2\pi \cdot \exp(\pm i\underline{k} \cdot |\underline{r} - \underline{r}'|) / |\underline{r} - \underline{r}'| \quad (1.1.8')$$

La ecuación (1.1.7) es la llamada ecuación de Lippman-Schwinger // (L.S.), y en ella H_0 y V pueden eventualmente depender de grados internos de libertad, con lo que los procesos inelásticos pueden también ser considerados. Schwinger⁽²⁾ ha obtenido un principio variacional para las funciones Ψ^\pm . Definida la magnitud bifuncional

$$I_{\underline{k}', \underline{k}} = \langle \underline{k}' | gV | \Psi(\underline{k}) \rangle + \langle \Psi'(\underline{k}') | gV | \underline{k} \rangle - \langle \Psi'(\underline{k}') | gV - gVG_0^+ gV | \Psi(\underline{k}) \rangle \quad (1.1.9)$$

la misma resulta ser igual a $T_{\underline{k}', \underline{k}}$, el elemento de matriz del // operador T para la transición $\underline{k} \rightarrow \underline{k}'$, cuando $|\Psi(\underline{k})\rangle = |\Psi^+(\underline{k})\rangle$, y $\langle \Psi'(\underline{k}') | = \langle \Psi^-(\underline{k}') |$, siendo $|\Psi^+(\underline{k})\rangle$ y $|\Psi^-(\underline{k}')\rangle$ soluciones de las correspondientes ecuaciones (1.1.7). Por otro lado, $I_{\underline{k}', \underline{k}}$ es estacionaria en el entorno de $T_{\underline{k}', \underline{k}}$, de manera de que // si Ψ y Ψ' difieren de sus valores exactos en $\delta\Psi$, entonces $I_{\underline{k}', \underline{k}} = T_{\underline{k}', \underline{k}} + O(\delta\Psi^2)$, o sea, el error en $I_{\underline{k}', \underline{k}}$ es de segundo orden, cuando lo es de primero en Ψ .

Otro principio variacional de interés puede obtenerse // considerando la ecuación de L.S. para el operador T ⁽³⁾

$$T = gV + gVG_0^+ T \quad (1.1.10)$$

Manipulando esta ecuación, y tomando elementos de matriz entre estados no perturbados $|\underline{k}\rangle$ y $|\underline{k}'\rangle$, puede definirse la magnitud^(3,4)

$$I'_{\underline{k}', \underline{k}} = \langle \underline{k}' | gV | \underline{k} \rangle + \langle \underline{k}' | gVG_0^+ T | \underline{k} \rangle + \langle \underline{k}' | TG_0^+ gV | \underline{k} \rangle - \langle \underline{k}' | TG_0^+ T | \underline{k} \rangle + \langle \underline{k}' | TG_0^+ gVG_0^+ T | \underline{k} \rangle \quad (1.1.11)$$

y si se busca el operador $T^{(*)}$ tal que $I'_{\underline{k}', \underline{k}}$ sea extremal, la ecuación de Euler que se obtiene es la (1.1.10). Por lo tanto, si T satisface la ecuación de L.S., entonces $I'_{\underline{k}', \underline{k}} = T_{\underline{k}', \underline{k}}$, y la funcional $I'_{\underline{k}', \underline{k}}$ es estacionaria alrededor de $T_{\underline{k}', \underline{k}}$, o sea que si $T_{\text{prueba}} = T + \delta T$, siendo T solución de (1.1.10), se tiene $I'_{\underline{k}', \underline{k}} = T_{\underline{k}', \underline{k}} + O(\delta T^2)$.

Los principios variacionales aquí tratados pueden usarse, básicamente, con dos objetivos: i) conocidas ya sea, la función de onda o el operador T , con buena aproximación, es posible obtener una mejor aproximación para $T_{\underline{k}', \underline{k}}$ por reemplazo directo de las funciones de onda o el operador de prueba, en las respectivas funcionales; ii) se eligen funciones de onda u operador T de prueba, con parámetros variables, y se ajustan los mismos de manera de que aquellas sean estacionarias respecto a pequeñas variaciones de los mismos. Este último enfoque es particularmente interesante si los elementos de prueba tienen parámetros lineales a variar, ya que en este caso, el problema se reduce a resolver un sistema lineal de ecuaciones. Como veremos en la sección 1.5, los aproximantes racionales de Padé a la amplitud $T_{\underline{k}', \underline{k}}$, definida a través de su desarrollo perturbativo, se hallan estrechamente vinculados a la resolución del problema de dispersión a partir de ii).

1.2 - La serie de Born.

La serie de Born para la función de onda puede obtenerse iterando (1.1.7), y suponiendo que el término de orden cero en la misma es

$$\psi_0(\underline{r}) = \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle \quad (1.2.1)$$

(*) En rigor, sólo están definidos los elementos de matriz del operador T entre estados de la misma energía (cf. (1.1.4)).

resultando^(*)

$$\Psi(\underline{r}) = \Psi_0(\underline{r}) + g \Psi_1(\underline{r}) + \dots + g^n \Psi_n(\underline{r}) + \dots \quad (1.2.2)$$

Análogamente, iterando (1.1.10), se obtiene

$$T = gV + g^2 \mathbf{V} G_0 \mathbf{V} + \dots + g^n T_n + \dots \quad (1.2.3)$$

con

$$T_n = V(G_0 V)^{n-1} \quad (1.2.4)$$

Después de n iteraciones, la estimación de $\Psi(\underline{r})$ dada por la serie de Born es

$$\Psi^{(n)}(\underline{r}) = \sum_{i=0}^n g^i \Psi_i(\underline{r}) \quad (1.2.5)$$

y puede demostrarse fácilmente que

$$\Psi_j(\underline{r}) = \int G_0(\underline{r}, \underline{r}') V(\underline{r}') \Psi_{j-1}(\underline{r}') d\underline{r}' = \langle \underline{r} | (G_0 V)^j | \underline{k} \rangle \quad (1.2.6)$$

Consecuentemente con (1.2.2) obtendremos la serie de Born para la amplitud de dispersión en la forma

$$f(\theta, \phi) = g f_1(\theta, \phi) + g^2 f_2(\theta, \phi) + \dots \quad (1.2.7)$$

La aproximación n -ésima para la amplitud de dispersión, será entonces

(*) En lo que sigue, y cuando corresponde un supraíndice, se supone el (+).

$$f^{(n)}(\theta, \phi) = \sum_{i=1}^n g^i f_i(\theta, \phi) \quad (1.2.8)$$

e incluye los términos cuyo orden en el potencial es menor o igual que n.

1.3 - Convergencia de la serie de Born para la función de onda.

En lo que sigue nos restringiremos al caso en el que ψ_0 / $H_0 = -\hbar^2/2m\nabla^2$. Definimos las funciones

$$Z(\underline{r}) = g \int |G_0(\underline{r}, \underline{r}') V(\underline{r}')| d\underline{r}' = mg/2\pi \cdot \int \frac{|V(\underline{r}')|}{|\underline{r}-\underline{r}'|} d\underline{r}' \quad (1.3.1)$$

para k real,

$$C(\underline{r}, \underline{r}'', k) = \left[\int d\underline{r}' G_0(\underline{r}, \underline{r}') V(\underline{r}') G_0(\underline{r}', \underline{r}'') \right] / G_0(\underline{r}, \underline{r}'') \quad (1.3.2)$$

y la magnitud

$$\|h\| = \|h(\underline{x}, \underline{x}')\| = \text{Max}_{\underline{x}, \underline{x}'} |h(\underline{x}, \underline{x}')|$$

McDowell y Coleman⁽⁵⁾, demuestran que las condiciones

$$\|Z\| < 1 \quad (*) (1.3.3)$$

y

$$\|C\| \cdot \|Z\| < 1 \quad (1.3.4)$$

(*) La condición (1.3.3) asegura que el radio de convergencia de la serie en el plano complejo g es no nulo para energías mayores o iguales que cero.

son, alternativamente, suficientes para la convergencia de la serie de Born (1.2.2), y han obtenido una cota para el error cometido al tomar $\Psi(\underline{r}) = \Psi^{(n)}(\underline{r})$

$$\|\Psi - \Psi^{(n)}\| \leq t^{n+1} (1-t)^{-1} \|\Psi_0\| \quad (1.3.5a)$$

donde t es una magnitud positiva que verifica

$$t \leq \|C\| \cdot \|Z\| \quad (1.3.5b)$$

Por su parte, Zemach y Klein⁽⁶⁾, demuestran que si se verifica

$$Z(\underline{r}) < \infty \quad \text{para todo } \underline{r} \quad (1.3.6a)$$

$$Z(\underline{r}) \text{ función continua de } \underline{r} \quad (1.3.6b)$$

$$Z(\underline{r}) = O(1/r), \text{ para } r \rightarrow \infty \quad (1.3.6c)$$

entonces,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|C\| = 0 \quad (1.3.7)$$

Vemos entonces, que las condiciones (1.3.6) son suficientes para la convergencia de la serie para energías suficientemente grandes, creciendo el radio de convergencia de la misma con la energía. Por otro lado, de (1.3.5) resulta, que en ese límite, no sólo la serie converge, sino que además es de esperar que lo haga monótonamente.

Para el caso particular de potenciales de tipo central, es fácil ver que

$$Z(\underline{r}) = 4m g \pi^{\frac{1}{2}} \left[(1/r) \int_c^r dr r^2 V(r) + \int_r^\infty dr r V(r) \right] \quad (1.3.8)$$

por lo que las condiciones (1.3.3) y (1.3.6) se transforman en condiciones de verificación relativamente sencilla en función del potencial.

1.4 - Aplicaciones prácticas de la serie de Born.

Uno de los métodos más usados para calcular secciones // eficaces diferenciales, correspondientes a procesos de colisiones // atómicas para energías relativamente altas, es el cálculo de $f^{(1)}$ (cf. (1.2.8)), conocida como la primera aproximación de Born. // Los principales argumentos en su favor, son su simplicidad formal // y numérica, y el hecho de dar lugar a resultados razonables en muchos casos de interés físico. La forma natural de mejorar la aproximación sería considerar términos de orden superior en la serie // perturbativa. Para la dispersión de dos partículas por potenciales regulares, se ha visto en la sección anterior, que la serie converge en un disco $|g| < R$, siendo R un radio no nulo que crece con // la energía. Por otro lado, cuando la amplitud de dispersión es una función regular de g (*), puede definirse para todo g por continuación analítica, a partir de la serie perturbativa. Esto significa que los términos de esta serie tienen toda la información necesaria para resolver el problema de dispersión (8). Para potenciales no regulares, o para el caso de sistemas de más de dos partículas, no se conocen teoremas rigurosos. Sin embargo, puede pensarse que la amplitud de interés estará definida para todo g a // través de los términos de la correspondiente serie perturbativa, y de un mecanismo matemático que permita extraer de ellos la información significativa.

(*) Condición suficiente para ello, es que el potencial verifique

$$\int |V(\underline{r})|^2 d\underline{r} < \infty \quad , \quad (\text{ref. (7) }).$$

Dada la complejidad involucrada en la determinación de // los términos de orden alto de la serie de Born, al encararse el estudio de la convergencia de la misma en la zona de energías intermedias, ello ha sido realizado, usualmente, para casos de potenciales de corto alcance, y con formas analíticas sencillas. En aplicaciones concretas se observa, que aún para energías relativamente altas, la serie parece converger lentamente y en forma no monótona, siendo, incluso, divergente, en algunos casos ^(4,9,10). Holt y Santoso ⁽¹⁰⁾, en particular, calcularon $f^{(n)}$ para $n \leq 4$, para los potenciales $gr^{-1}\exp(-r/a)$ y $g'\exp(-r/a)$, y concluyeron, a partir // de sus resultados, que no existe un esquema consistente de convergencia de las sucesivas aproximaciones, y que, por lo tanto, el // cálculo de secciones eficaces diferenciales a partir de los primeros órdenes perturbativos, constituye un método no confiable en la región de energías intermedias. Dada la ya mencionada dificultad // de cálculo inherente a los órdenes altos, resulta así cuestionada // la utilidad de la serie de Born en dicha región.

Nos planteamos ahora, el problema de extraer de la serie de Born, la información contenida en los primeros órdenes perturbativos, de manera tal, de poder obtener valores significativos para la amplitud de dispersión, por ella definida, para distintos casos de interés físico. El método mas sencillo de cálculo, el de considerar la sucesión de sumas parciales de dicha serie, ha resultado // no ser adecuado para casos como los mencionados mas arriba. Se impone, por lo tanto, el pensar en una transformación de esa sucesión en otra cuya convergencia sea satisfactoria. Un mecanismo matemático que permite este tipo de cosa, es el de los aproximantes racionales de Padé (A.P.), que tiene, por otro lado, la virtud de aproximar también las propiedades analíticas de la amplitud ^(11,12). Aplicaciones de este esquema de aproximación a problemas como los // aquí planteados, han sido realizadas recientemente por Garibotti y //

Massaro⁽¹³⁾, Rosenthal⁽¹⁴⁾, y por Garibotti y Grinstein⁽¹⁵⁾, y se / consideran en la próxima sección.

1.5 - El método de los aproximantes racionales de Padé.

Dada una serie perturbativa formal

$$f(g) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n g^n \quad (1.5.1)$$

el A.P. $[N, M]_f$ a $f(g)$ se define unívocamente por la expresión

$$\begin{aligned} [N, M]_f &= P_M(g)/Q_N(g) \\ &= (p_0 + p_1 g + \dots + p_M g^M) / (1 + q_1 g + \dots + q_N g^N) \end{aligned} \quad (1.5.2a)$$

y el requerimiento

$$f(g) - [N, M]_f = o(g^{N+M+1}) \quad (1.5.2b)$$

siendo posible obtener la expresión compacta

$$[N, M]_f = \begin{vmatrix} f_{M-N+1} & \dots & f_{M+1} \\ \vdots & & \vdots \\ f_M & & f_{M+N} \\ \sum_{j=N}^M f_j g^j & \dots & \sum_{j=0}^M f_j g^j \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} f_{M-N+1} & \dots & f_{M+1} \\ \vdots & & \vdots \\ f_M & & f_{M+N} \\ g^N & \dots & 1 \end{vmatrix}^{-1} \quad (1.5.3)$$

Es de notar que la definición del A.P. $[N, M]_f$ requiere el conoci- / miento de los primeros $N+M+1$ coeficientes f_n . Las propiedades matemáticas de estos aproximantes pueden encontrarse en referencia 11, y en los trabajos allí citados.

Los A.P. pueden ser ordenados en una tabla⁽¹⁶⁾

$$\begin{array}{cccc}
 [0,0]_f & [0,1]_f & [0,2]_f & \dots \\
 [1,0]_f & [1,1]_f & [1,2]_f & \dots \\
 \vdots & \vdots & \vdots &
 \end{array} \quad (1.5.4)$$

Algunas sucesiones de esta tabla representan aproximaciones usuales. La dada por los A.P. $[0,N]_f$, en la primera fila, es la determinada por las sucesivas sumas parciales de la serie perturbativa. La sucesión $[0,0]_f$, $[1,0]_f$, $[1,1]_f$, $[2,1]_f$, \dots , $[N,N-1]_f$, $[N,N]_f$, \dots , es equivalente a un desarrollo de $f(g)$ en fracciones continuas del tipo

$$f(g) = 1 + a_1 g / F_1(g) \quad ; \quad F_k(g) = 1 + a_k g / F_{k+1}(g) \quad (1.5.5)$$

En particular, la sucesión $[N,N]_f$ es equivalente a una fracción / continua de tipo J ⁽¹⁶⁾

$$f(g) = a_1 g / F_1(g) \quad ; \quad F_k(g) = 1 + b_k g - a_{k+1} g^2 / F_{k+1}(g) \quad (1.5.6)$$

Cuando $f(g)$ es la amplitud de dispersión $f(g,E,\theta)$, cualquier // A.P. $[N,M]_f$ resulta de resolver las ecuaciones de dispersión // (1.1.7) en subespacios de dimensión finita, siguiéndose de ello, // que pueden ser obtenidos a partir del principio variacional de Schwinger usando funciones de prueba adecuadas en la funcional // (1.1.9)⁽¹⁷⁾. Los A.P. $[N,N]_f$, en particular, resultan de considerar las funciones de prueba de Cini y Fubini⁽¹⁸⁾, que involucran, / básicamente, combinaciones lineales finitas de los vectores $|j\rangle = (G_0^+ V)^j | \underline{k} \rangle$ y $\langle j' | = \langle \underline{k}' | (V G_0^+)^j$, con $j \leq N$. Alternativamente, la sucesión $[N,N+1]_f$ puede ser obtenida a partir del // principio variacional para el operador T , eligiendo

$$T_{\text{prueba}} = \sum_{i=1}^N x_i T_i$$

en la funcional (1.1.11), siendo las T_i , las definidas en (1.2.4). Los parámetros x_i se ajustan de manera de que $I'_{\underline{k}^i, \underline{k}}$ sea extremal al reemplazar T_{prueba} en (1.1.11), resultando, en ese caso.⁽⁴⁾ // $I'_{\underline{k}^i, \underline{k}} = [N, N+1]_f$.

No se conocen teoremas de convergencia generales para sucesiones arbitrarias de la tabla (1.5.4). Cuando la serie (1.5.1) es una serie de Stieltjes, la sucesión $[N, N+j]_f$ con $j \geq -1$, converge a $f(g)$ cuando $N \rightarrow \infty$ ⁽¹⁹⁾. Por otro lado, puede demostrarse // que si la dispersión es producida por un potencial de signo definido, la amplitud $g^{-1} f(g, E, \theta)$ es una serie de Stieltjes en g solamente si $\theta = 0$ y $E < 0$ ⁽¹¹⁾. Las propiedades analíticas de los A.P. en el plano complejo de la energía garantizan la convergencia de los mismos para energías positivas. Para ángulos de dispersión distintos de cero, no se ha probado la convergencia de estos aproximantes. Sin embargo, la evidencia numérica indica comportamientos similares para valores nulo y no nulos de θ .

En lo que sigue, particularizaremos a los casos de potenciales de tipo Yukawa y Exponencial, demostrando que el método de los A.P. proporciona sucesiones rápidamente convergentes en todo el rango de energías considerado. En las tablas 1.1, 1.2, y 1.3, se presentan las tablas de Padé para el potencial

$$V(r) = -2.365a_0 / (2ar) \cdot \exp(-r/a) \tag{1.5.7}$$

mientras que en la 1.4, se indican los resultados para

$$V(r) = -2a_0 / (2a) \cdot \exp(-r/a) \tag{1.5.8}$$

donde a es una longitud característica que depende del proceso //

particular considerado (*). Debido al hecho de que f_0 es nulo para el desarrollo (1.2.8), los A.P. $[N,0]_f$ se anulan idénticamente, y no han sido indicados. Los valores numéricos correspondientes a los $[0,N]_f$, o sea a los $f^{(N)}$, fueron calculados, en tablas 1.1 y / 1.2, a partir de los f_i determinados por Rosenthal⁽¹⁴⁾, mediante la iteración de una ecuación integral para la amplitud de dispersión, obtenida, a su vez, usando transformadas para la función de Green para partícula libre. Por su parte, los $[0,N]_f$ en tablas 1.3 y 1.4, son los de Holt y Santos⁽¹⁰⁾, obtenidos efectuando integraciones analíticas y numéricas en las sucesivas ecuaciones (1.2.6) / involucradas. Los valores "exactos", tomados como referencia, fueron calculados por éstos últimos, por integración numérica de las / ecuaciones correspondientes a las primeras 20 ondas parciales, en / algunos casos, y con el método de la integral de Fredholm, en otros en los cuales, ese número no fue suficiente para obtener una convergencia satisfactoria⁽²¹⁾.

Del estudio de las tablas, se sigue que incluso para energías no demasiado bajas ($ka = 0.663$ corresponde a 20 McV en la dispersión nucleón-nucleón), la convergencia de la sucesión de Born (A.P. $[0,N]_f$), es muy pobre. Es de notar que cálculos realizados por Rabitz y Conn⁽⁴⁾, indican que para el potencial (1.5.7) la serie converge para $ka \gtrsim 2.5$, por lo que los casos considerados en // tablas 1.1 y 1.2 ($ka = 0.663$ y 1.816) corresponden a situaciones en las cuales la misma es divergente. En general, la convergencia / de otras sucesiones de A.P. es mas rápida. No existe un criterio /

(*) Con esta elección de las constantes de acoplamiento, típica // del estudio de la dispersión nucleón-nucleón,⁽²⁰⁾ por ejemplo, se parametrizan los cálculos en función de la magnitud adimensional ka . // Valores típicos para a son, del orden de 10^{-13} cm para procesos / nucleares, y de 10^{-8} cm para los atómicos.

exacto para preferir una dada sucesión de la tabla. Desde el punto de vista matemático resulta muy difícil tener, a priori, un criterio comparativo para las velocidades de convergencia de desarrollos diferentes en fracciones continuas de una dada función. Incluso, al considerar la serie perturbativa, se ha visto que no es posible asegurar que la aproximación de un dado orden será mejor que otra de orden mas bajo. Desde el punto de vista físico, se debería dar preferencia a la sucesión de los A.P. $[N, N]_f$, que son, en particular, las soluciones obtenidas con el "ansatz" de Cini y Fubini a partir del principio variacional de Schwinger.

El principal punto a destacar, de la consideración de los resultados, es que las sumas parciales de Born constituyen, al menos para los casos considerados, una de las sucesiones mas pobremente convergentes de la tabla de Padé. Por otro lado, si bien $f^{(1)}$ no resulta ser una buena aproximación a la amplitud de dispersión, particularmente para $\theta = 0$, ya que al ser $\text{Im } f^{(1)} = 0$, se viola el teorema óptico (cf. (2.1.9) en la próxima sección), y con ello el principio de conservación de la probabilidad, la consideración de las tablas 1.1b, 1.2b, 1.3b, y 1.4b, muestra que $|f^{(1)}|^2$ resulta, en lo que respecta a su precisión, generalmente superior, o a lo sumo comparable, a los $|f^{(N)}|^2$ ($N > 1$) considerados. Este hecho es comprensible desde el punto de vista de la tabla de Padé. En lugar de considerar $f^{(1)}$ como la primera aproximación a la serie de Born, se la puede reinterpretar como el primer miembro de la sucesión $[0, 1]_f, [1, 1]_f, [1, 2]_f, [2, 2]_f, \dots^{(15)}$, o, alternativamente, de la $[N, N+1]_f^{(14)}$, que parecen converger satisfactoriamente.

Algo puede decirse, además, respecto del comportamiento de los A.P. ante la variación de g . Partiendo del conocimiento de los f_i ($i \leq 7$) en el caso del potencial de Yukawa (1.5.7), para $ka = 0.663$, y $\theta = 0, \pi/2$, y π , caso en que la serie de Born //

resulta ser la mas pobremente convergente de las consideradas, se / han estudiado las tablas de Padé correspondientes a $g/2$ y $g/3$, / siendo g el valor de la constante de acoplamiento en (1.5.7). Los resultados se indican en las tablas 1.5 y 1.6, donde se han tabulado las magnitudes de $|\left[[N,M]_f \right]|^2$. Del estudio de ellas, surgen, en líneas generales, las mismas propiedades relativas de convergencia de las distintas sucesiones de las tablas, que ya fueran observadas, verificándose la estabilidad de las mismas con la variación de g .

Considerando ahora, las colisiones electrón-átomo, y o- / tros procesos de colisión mas complicados, donde a lo sumo se dispone del conocimiento de f_2 , es importante notar que el A.P. // $[1,1]_f$ se compara favorablemente con la tercera aproximación de // Born, y en algunos casos, incluso con las de orden superior. Este / hecho es cierto, tanto para la parte real, como para la imaginaria / de la amplitud de dispersión. La precisión de este A.P. ha sido // también verificada al estudiar las colisiones e-H y e-He ⁽¹³⁾.

2. EL METODO DE LAS ONDAS PARCIALES

2.1 - Los desarrollos en ondas parciales para la amplitud de dispersión y la sección eficaz total.

En lo que sigue, se supondrá que el potencial de interacción es esféricamente simétrico, siendo por ello posible, representarlo por $V(r)$. Si el eje polar de un sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) es elegido de manera tal de que se encuentre en la dirección del haz incidente de partículas, el problema tendrá // simetría azimutal, y la función de onda $\psi^+(\underline{r})$ puede desarro- // llarse en la forma

$$\psi^+(\underline{r}) = (1/r) \sum_{L=0}^{\infty} A_L P_L(\cos \theta) u_L(r) \quad (2.1.1)$$

donde $P_L(\cos \theta)$ es el polinomio de Legendre de orden L y argumento $\cos \theta$, y los A_L dependen solamente de L y k^2 . Sustituyendo (2.1.1) en (1.1.1) expresada en coordenadas esféricas^(*), / se obtiene la ecuación que debe satisfacer $u_L(r)$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - L(L+1)/r^2 - U(r) \right] u_L(r) = 0 \quad (2.1.2)$$

siendo $U(r) = 2mV(r)/\hbar^2$.

Como $\psi^+(\underline{r})$ debe ser finita en todo el espacio, y en / particular, en el origen, la solución físicamente admisible de // (2.1.2) debe satisfacer la condición de contorno

$$u_L(0) = 0 \quad (2.1.3)$$

(*) Supondremos $g=1$, y $H_0 = -\hbar^2/2m \cdot \nabla^2$ en (1.1.1), y, consecuen- / temente con el sistema de coordenadas elegido, $\varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \exp(ikz)$.

Si el potencial $U(r)$ es tal que puede considerarse despreciable / para r mayor que un cierto r_0 , la ecuación radial (2.1.2) para $r > r_0$ se reducirá a (*)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - L(L+1)/r^2 \right] u_L(r) = 0$$

cuyas soluciones independientes son $krj_L(kr)$ y $krn_L(kr)$, siendo $j_L(x)$ y $n_L(x)$ las funciones esféricas de Bessel y de Neumann, // respectivamente, definidas por

$$j_L(x) = (\pi/2x)^{\frac{1}{2}} J_{L+\frac{1}{2}}(x) ; \quad n_L(x) = (\pi/2x)^{\frac{1}{2}} J_{L+\frac{1}{2}}(x)$$

en función de las $J_\nu(x)$ de Bessel (22). De acuerdo con ello, te- / niendo en cuenta los comportamientos asintóticos de estas funcio- / nes, se obtiene

$$\begin{aligned} u_L(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} kr \left[\cos \delta_L j_L(kr) - \text{sen } \delta_L n_L(kr) \right] \\ = \text{sen} \left[kr - L\pi/2 + \delta_L \right] \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

que define los corrimientos de fase δ_L .

A fin de determinar la amplitud de dispersión $f(\cos \theta)$ en función de los δ_L , debemos elegir los coeficientes A_L en // (2.1.1) de manera de que $\Psi^+(\underline{r})$ tenga el comportamiento asintótico dado por (1.1.2). A esos efectos, desarrollamos la onda plana // $\exp(ikz)$, en esta última expresión, en ondas esféricas

$$\exp(ikz) = \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) i^L j_L(kr) P_L(\cos \theta) \quad (2.1.5)$$

e igualamos los coeficientes de las ondas esféricas entrantes en // (1.1.2) y (2.1.1), con lo cual se obtiene, usando (2.1.4) y (2.1.5)

$$A_L = k^{-1} \cdot (2L+1) i^L \exp(i \delta_L) \quad (2.1.6)$$

Determinamos ahora $f(\cos \theta)$ a partir de la forma asintótica

$$\Psi^+(\underline{r}) - \exp(ikz) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} r^{-1} f(\cos \theta) \exp(ikr)$$

ya que se ha garantizado que la componente esférica entrante del // miembro de la izquierda sea cero. De (2.1.1) y (2.1.6) obtenemos / finalmente

$$f(\cos \theta) = (1/2ik) \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \left[\exp(2i \delta_L) - 1 \right] P_L(\cos \theta) \quad (2.1.7)$$

que es el desarrollo en ondas parciales de la amplitud de disper- / sión (D.O.P. de la A.D.).

La sección eficaz total definida por (1.1.6) se obtiene / usando las relaciones de ortogonalidad de los polinomios de Legendre, resultando

$$Q = (4\pi/k^2) \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \text{sen}^2 \delta_L \quad (2.1.8)$$

De las expresiones (2.1.7) y (2.1.8), se sigue que los defasajes // determinan completamente las secciones eficaces diferencial y total. En general, no es posible contar con una expresión analítica para / los mismos, en función del potencial $U(r)$. Para su determinación, se debe integrar numericamente la ecuación radial (2.1.2) desde el origen, imponiendo la condición de contorno (2.1.3), y ajustar la / solución fuera del alcance del potencial a la forma asintótica // (2.1.4)^(**).

(*) Puede demostrarse que este desarrollo es válido para potencia-
les tales que $r^{1+\epsilon} U(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$, siendo $\epsilon > 0$.

(**) Un esquema alternativo de cálculo exacto de los δ_L , es el pro-

Para potenciales reales, la dispersión es puramente elástica, y los defasajes δ_L son reales, siendo posible derivar una importante relación a partir de (2.1.7) y (2.1.8), el llamado teorema óptico

$$\text{Im } f(l) = (k/4\pi) Q \quad (2.1.9)$$

Esta relación, que es generalizable para el caso en que puedan estar involucrados también procesos inelásticos^(***), es de gran utilidad en las aplicaciones de relaciones de dispersión a la teoría de colisiones, reflejando, esencialmente, la conservación de la probabilidad.

2.2 - Aplicaciones prácticas del método de las ondas parciales.

El número L_{\max} de defasajes necesarios para obtener una convergencia satisfactoria del desarrollo (2.1.7), viene determinado por la relación semiclásica $L_{\max} \sim ka$, siendo a el rango efectivo del potencial. Consecuentemente, L_{\max} crece con la energía y la masa reducida del sistema considerado, como así también, con el alcance del potencial que describe las interacciones en sí mismo. Un campo en el cual son típicos los requerimientos de un número elevado de defasajes, es en el de las colisiones atómicas y moleculares, donde aquellas están determinadas predominantemente por potenciales de largo alcance. En las colisiones entre partículas cargadas y sistemas neutros polarizables, por ejemplo, el efecto de polarización inducida en los mismos, determina un comportamiento asintótico del tipo $1/r^4$, para el potencial, mientras

porcionado por la ecuación de la fase de Calogero⁽²³⁾.

(***) En este caso, Q será la sección eficaz total, elástica más inelástica, y f solamente la amplitud elástica. Ver, por ejemplo, Brandsen⁽²⁴⁾, pag. 26.

que la interacción de Van der Waals entre moléculas, tiene una dependencia del tipo $1/r^6$, a grandes distancias⁽²⁵⁾. Por otro lado, potenciales con comportamiento del tipo $1/r^2$, se encuentran presentes en la colisión e-H al estudiar procesos de excitación a // energías intermedias⁽²⁶⁾, y procesos elásticos cerca del umbral // inelástico⁽²⁷⁾, y en el caso e-He⁺⁽²⁸⁾, donde también se halla // presente el tipo $1/r$, coulombiano.

La convergencia del desarrollo (2.1.7) depende, en general, del ángulo de dispersión θ . La sucesión de sumas parciales es, // cuando convergente, asintóticamente monótona para $\theta=0$, y oscilante para $\theta=\pi$ (*). Debido a ello, la convergencia del D.O.P. de la A.D. suele ser lenta para pequeños ángulos, y lenta y poco precisa, en lo que respecta a su cálculo numérico, para grandes ángulos, debido a la fuerte cancelación de términos de magnitudes similares y signos opuestos. Ejemplos típicos de estas situaciones son: requerimientos de 10051 defasajes para el cálculo de la sección eficaz diferencial elástica para $\theta=0$, correspondiente al proceso e-He, // en el rango de 100-400 eV⁽²⁹⁾; el uso de 500 ondas parciales en la colisión e-H a 300 eV⁽²⁷⁾, número que a pesar de ser tan alto no permitió una evaluación precisa de la sección eficaz diferencial de excitación para grandes ángulos; en ciertas colisiones moleculares, aún para ángulos de dispersión intermedios, conocidos como ángulos de "arco iris", L_{\max} puede oscilar entre 1000 y 20000⁽³⁰⁾.

En general, el cálculo exacto de los corrimientos de fase para estos casos resulta numericamente prohibitivo, y en la práctica se efectúa para las primeras ondas parciales, evaluándose las // restantes por métodos aproximados⁽³¹⁾. Aún así, el esfuerzo numérico involucrado resulta considerable. Ello es particularmente crítico, cuando a partir de las secciones eficaces diferenciales obte-

(*) Ello se demuestra en la sección 2.4-II, para el caso de potenciales tales que $V(r) \sim -C/r^n$, para $r \rightarrow \infty$.

nidas experimentalmente, se plantea el problema de determinar la // reconstrucción de los potenciales. Usualmente^(32,33), se supone // una forma funcional dependiente de parámetros para el potencial, se calculan numericamente los defasajes por el método de aproximación semiclassical JWKB⁽³⁴⁾, y se efectúa la suma del D.O.P. de la A.D., // de manera de obtener la sección eficaz diferencial. Este procedi- miento es repetido variando los parámetros del potencial, determi- nándose los mismos por el método de "prueba y error".

Problemas similares de lenta convergencia, se encuentran presentes al calcular la sección eficaz total Q mediante el desa- rrollo (2.1.8), para casos del tipo de los mencionados^(*). En el // caso de colisiones inelásticas en el proceso $H-He^+$ en el rango de 0.1-10 eV, por ejemplo, se presentan requerimientos típicos de 100 a 200 defasajes para obtener una convergencia satisfactoria del de- sarrollo de la Q correspondiente al canal en cuestión. Como Q // resulta ser una función oscilante de la energía, y para cada valor de la misma, es necesario determinar el correspondiente juego de // defasajes, el trabajo numérico necesario es considerable⁽³⁵⁾.

De lo aquí expuesto, se sigue que resulta de fundamental importancia encontrar métodos matemáticos que permitan la acelera- ción de la convergencia del D.O.P. de la A.D., en casos como los // mencionados. Dado que los polinomios de Legendre son combinaciones lineales finitas de potencias, podría plantearse, en primera ins- // tancia, la transformación de la serie original en otra de potencias adecuada para la aplicación a ella, de los aproximantes racionales de Padé, cuya eficiencia ha sido vista en la sección 1.5. Sin em- bargo, es inmediato observar que

$$\sum_{L=0}^{\infty} f_L P_L(z) = \sum_{L=0}^{\infty} f_L \sum_{j=0}^L a_j^L z^j = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \sum_{i=j}^{\infty} f_i a_j^i$$

(*) Para el caso de colisiones elásticas, ello está directamente relacionado con la lenta convergencia de $\text{Im } f(l)$ (cf. (2.1.9)).

quedando así restringido el rango de aplicación de este enfoque, a aquellos casos en que se conocen todos los coeficientes f_L . Este no es el caso real, ya que la información de la que normalmente se dispone, es la dada por un número finito de coeficientes obtenidos a partir del cálculo numérico de los correspondientes defasajes.

Planteado el problema, pasamos a considerar esquemas de / aproximación posibles para el D.O.P. de la A.D. En la sección 2.3 se considerará el método de los aproximantes racionales polinomial- les, apto para su aplicación a series en polinomios ortogonales, y en particular, al desarrollo (2.1.7); en la sección 2.4, el de los aproximantes de Padé puntuales, método aplicable, en principio, a / todo tipo de series, y con ello, tanto a (2.1.7) como a (2.1.8); en la sección 2.5 se considerará la aplicación numérica comparativa de los esquemas, a distintos casos significativos.

2.3 - Aproximantes racionales polinomiales (A.R.P.)

Volvemos a analizar la definición de los aproximantes de Padé para series de potencias. Como ya fuera visto en la sección / 1.5, dada una tal serie

$$g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n \quad (2.3.1)$$

el aproximante $[N, M]_g$ a $g(z)$ es definido como el cociente

$$[N, M]_g = P_M(z)/Q_N(z) \quad ; \quad Q_N(0) = 1 \quad (2.3.2)$$

donde los polinomios $P_M(z)$ y $Q_N(z)$, de órdenes respectivos $M //$ y N , son determinados a partir de

$$g(z) - [N, M]_g = O(z^{M+N+1}) \quad (2.3.3)$$

o, equivalentemente

$$g(z) \cdot Q_N(z) - P_M(z) = O(z^{M+N+1}) \quad (2.3.4)$$

Estos aproximantes son bien conocidos como una valiosa herramienta para acelerar la convergencia de la serie (2.3.1), cuando la misma es convergente, regularizarla cuando es divergente, y para la prolongación analítica de $g(z)$. Resulta natural pensar en una extensión de este tipo de aproximantes a series en polinomios ortogonales, y en particular, a las series de Legendre, que son aquí de nuestro interés.

Dada una serie en polinomios ortogonales, pretendemos introducir aproximantes a la misma, en forma análoga a las ecuaciones (2.3.2), (2.3.3), y (2.3.4). Sea la serie

$$f(z) = \sum_{L=0}^{\infty} f_L p_L(z) \quad (2.3.5)$$

donde $\{p_L(z)\}$ es un conjunto de polinomios ortogonales. Definimos

$$\{N, M\} = A_M(z)/B_N(z) = \sum_{n=0}^M c_n p_n(z) / \sum_{m=0}^N d_m p_m(z) ; d_0 = 1 \quad (2.3.6)$$

La gran diferencia con el caso anterior, provendrá ahora del hecho de que para los polinomios ortogonales se puede demostrar^(39a), que en general, vale la relación

$$p_i(z)p_j(z) = \sum_{L=|i-j|}^{i+j} r_L^{i,j} p_L(z) \quad (2.3.7)$$

donde los $r_L^{i,j}$ son coeficientes constantes que dependen del tipo de polinomios en cuestión, en lugar de una expresión del tipo

$$z^i z^j = z^{i+j}$$

Como consecuencia de ello, las análogas de (2.3.3) y (2.3.4) no serán equivalentes en este caso, y darán lugar a tipos distintos de / aproximantes.

En el primer caso, se exige

$$f(z) - \{N, M\}^* = B_{M+N+1} p_{M+N+1}(z) + C_{M+N+2} p_{M+N+2}(z) + \dots \quad (2.3.8)$$

Estos aproximantes fueron estudiados por Fleischer⁽³⁶⁾ para el caso de series de Legendre, y a pesar de poseer propiedades satisfactorias en cuanto a convergencia y analiticidad, tienen el gran inconveniente de que su definición, a partir de (2.3.8), requiere la solución de un sistema no lineal de ecuaciones, con las consiguientes complicaciones que provienen de este hecho, en lo que respecta a su cálculo numérico.

En segundo término consideramos los aproximantes definidos por

$$f(z) - B_N(z) - A_M(z) = b_{M+N+1} p_{M+N+1}(z) + \dots \quad (2.3.9)$$

Ellos han sido estudiados por Holdeman⁽³⁷⁾, Fleischer⁽³⁸⁾, y por // Corbella, Garibotti y Grinstein⁽³⁹⁾. Estos últimos los han pro- // puesto como método para sumar el D.O.P. de la A.D. correspondiente a potenciales de largo alcance, problema que aquí nos ocupa.

Usando (2.3.7) y (2.3.9), se obtiene un sistema lineal de ecuaciones

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^M d_i a_{L,i} &= 0 \quad ; \quad N+1 \leq L \leq N+M \\ \sum_{i=0}^M d_i a_{L,i} &= c_L \quad \quad \quad 0 \leq L \leq N \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

donde

$$a_{L,i} = \sum_{n=|L-i|}^{L+i} r_L^{i,n} f_n \quad (2.3.11)$$

pudiendo obtenerse el aproximante $\{N,M\}$ en forma compacta

$$\{N,M\} = \begin{vmatrix} a_{M+1,N} & \cdots & a_{M+1,0} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{M+N,N} & \cdots & a_{M+N,0} \\ \sum_{L=0}^M a_{L,N} p_L & \cdots & \sum_{L=0}^M a_{L,0} p_L \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_{M+1,N} & \cdots & a_{M+1,0} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{M+N,N} & & a_{M+N,0} \\ p_N & \cdots & p_0 \end{vmatrix}^{-1} \quad (2.3.12)$$

De la consideración de (2.3.12) resulta que los $\{N,M\}$ coinciden formalmente con los $[N,M]$ de Padé (cf. (1.5.3)) cuando se sustituye $p_L(z)$ por z^L . Sin embargo, los primeros $N+M+1$ coeficientes del desarrollo de $\{N,M\}$ en polinomios $p_L(z)$ no coinciden con los correspondientes de $f(z)$, y debido a ello, no es posible extender en forma inmediata los teoremas de convergencia / conocidos para los $[N,M]$, a los $\{N,M\}$ aquí definidos. Si bien no se conocen tales teoremas en general, la evidencia numérica indica que para muchos casos de interés, los $\{N,M\}$ convergen satisfactoria - mente, conociéndose, además, las siguientes propiedades:

Propiedad 1 ⁽³⁷⁾ (relación de los A.R.P. con aproximaciones de cuadrados mínimos): Para M fijo, y en el límite $N \rightarrow \infty$, los aproxima - ntes definidos por (2.3.9) hacen mínima la integral

$$I(t_i, x_i) = \int_a^b |B(z)f(z) - A(z)|^2 W(z) dz$$

donde $B(z) = \sum_{n=0}^M t_n p_n(z)$; $A(z) = \sum_{m=0}^N x_m p_m(z)$, y $\{p_n(z)\}$ es un / conjunto de polinomios ortogonales en el intervalo $[a,b]$ con fun - ción de peso $W(z)$.

Propiedad 2 (Apéndice I): Si los f_n son tales que dependen de un parámetro E , y para un cierto m , y un dado valor E_m del para -

metro, se tiene,

$$\lim_{h_m \rightarrow 0} (h_m f_n) = y_m \int_{mn} ; \text{ con } h_m = E - E_m$$

entonces para $0 \leq m \leq M$, se verifica

$$\lim_{h_m \rightarrow 0} h_m \{N, M\} = \lim_{h_m \rightarrow 0} (h_m f(z)) = y_m p_m(z)$$

Esta propiedad resulta particularmente interesante en el caso en // que la serie en cuestión es el D.O.P. de la A.D., y E es la energía. En este caso, cuando E se halla en el entorno de E_L , la // energía de un estado ligado o resonancia, de momento angular L , / se cumple la condición exigida y los $\{N, M\}$ dan el residuo correcto, pudiendo esperarse que sean una buena aproximación de la amplitud / cuando $M \gg L$, en dicho entorno. Notemos que la definición de los aproximantes es formal e independiente de la energía.

Propiedad 3 ⁽³⁷⁾: Si los f_n tienen un comportamiento asintótico // del tipo

$$f_n \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} cn^v$$

y la serie (2.3.5) converge absolutamente, entonces, para el aproximante $\{1, M\} = A_M(z)/B_1(z)$, se verifica, en el límite $M \rightarrow \infty$

$$B_1(z) \longrightarrow K(z-a)$$

$$A_M(z) \longrightarrow K \sum_{m=0}^M f'_m p_m(z)$$

donde los f'_m son los coeficientes de la serie

$$(z-a)f(z) = \sum_{m=0}^{\infty} f'_m p_m(z)$$

que tienen un comportamiento asintótico

$$f'_n \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} c'n^{v-1}$$

y a es una constante que depende del tipo de polinomios en cuestión^(*). Notamos que esta propiedad garantiza que los $\{1, M\}$ convergen asintóticamente con mayor rapidez que las sumas parciales de la serie (2.3.5). Cabe destacar, que para series en polinomios de Legendre, $a=1$, y las condiciones que aseguran la convergencia absoluta de la serie son, $v < -1$ para $z = \pm 1$, y $v < -1/2$ para $-1 < z < 1$.

2.4 - Aproximantes de Padé puntuales (A.P.P.)

El interés por este tipo de aproximaciones surge con un trabajo de Shanks⁽⁴⁰⁾ en el que se estudian transformaciones no lineales de sucesiones lentamente convergentes o divergentes. Shanks inicia su estudio considerando sucesiones que pueden expresarse en la forma

$$S_n = S + \sum_{i=1}^k a_i q_i^n \quad |q_i| \neq 1 \quad (2.4.1)$$

donde S es la "base" de la sucesión, y los q_i parametrizan los "transitorios" de la misma. Si los q_i son tales que $|q_i| < 1$, entonces la sucesión es convergente, y se tiene

$$\lim_{n \rightarrow \infty} S_n = S \quad (2.4.2)$$

o sea, que S es el límite de la sucesión. Si algún q_i es tal que $|q_i| > 1$, la sucesión es divergente, pero puede ser regularizada, asignándole el valor S , llamado antilímite, por Shanks, como

(*) $a = \lim_{m \rightarrow \infty} (1/A_{m-1} + C_{m+1}/A_{m+1} - B_m/A_m)$, siendo A_n, B_n , y C_n los

aquél desde el cual diverge. El problema planteado así, consiste / en desarrollar una transformación de una dada sucesión S_n , en o - tra, que teniendo como límite S , tienda a ese valor rápidamente, a partir del "filtrado" de los transitorios matemáticos.

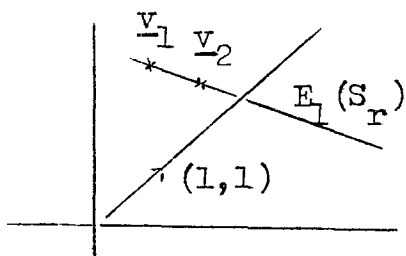
Las transformaciones estudiadas por Shanks consisten, ba - sicamente, en generalizaciones formales del conocido método de ex - trapolación de Aitken⁽⁴¹⁾. Veremos, a continuación, un modelo geo - métrico de las mismas debido a Johnson⁽⁴²⁾. Consideremos una suce - sión formal S_n , y supongamos que partimos del conocimiento de S_r , S_{r+1} , y S_{r+2} . Construimos los vectores

$$\underline{v}_1 = (S_r, S_{r+1}) \quad ; \quad \underline{v}_2 = (S_{r+1}, S_{r+2})$$

Si la sucesión es convergente, y tiene límite S , entonces

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \underline{v}_1 = \lim_{r \rightarrow \infty} \underline{v}_2 = S(1,1)$$

Partiendo de esta observación, construimos la recta generada por // $\{\underline{v}_1, \underline{v}_2\}$, y buscamos la intersección con la dirección del vector / $(1,1)$, resultando



$$E_1(S_r) = \frac{S_{r+1}^2 - S_r \cdot S_{r+2}}{2S_{r+1} - S_r - S_{r+2}}$$

La intersección $E_1(S_r)$ es la transformación de 1er. orden de // Shanks, y coincide con la fórmula de extrapolación de Aitken. Vea - mos una aplicación particular de la misma. Supongamos que

coeficientes en la fórmula de recurrencia

$$p_{n+1}(z) = (A_n z + B_n) p_n(z) - C_n p_{n-1}(z)$$

$$S_r = \sum_{k=0}^r z^k = \frac{1 - z^{r+1}}{1 - z} = \frac{1}{1 - z} - \frac{z}{1 - z} z^r$$

En este caso, para $|z| < 1$, $\lim_r S_r = S = 1/(1-z)$, y S_r tiene la forma

$$S_r = S + aq^r \quad ; \quad \text{con } S=1/(1-z), \quad a=-z/(1-z), \quad \text{y } q=z$$

Es fácil ver que en este caso

$$S_{r+1} - qS_r = S(1-q)$$

o sea, que todo par de elementos sucesivos se hallan relacionados // linealmente, y que, por consiguiente,

$$\underline{v}_1 - \underline{v}_2 = (1-q) \left[(S_r, S_{r+1}) - S(1,1) \right]$$

que nos permite visualizar el resultado

$$E_1(S_r) = S \quad \text{para todo } r \geq 0$$

Lo importante a destacar, es que este resultado será cierto tam- // bién para $|z| = |q| > 1$, caso en el cual la sucesión es divergente. Ello se debe al hecho de que la transformación $E_1(S_r)$ es inva- // riante ante la permutación de índices $(r, r+1, r+2) \leftrightarrow (r+2, r+1, r)$. Dicho de otro modo, $E_1(S_r)$ da el valor de la serie prolongada ana- // líticamente fuera de su radio de convergencia, valor, que en este / caso, es el 'antilímite' de la sucesión.

En el caso general, partimos del conocimiento de $S_r, // S_{r+1}, \dots, S_{r+2n}$. Definimos en un espacio $n+1$ - dimensional, los / vectores

$$\underline{v}_k = (S_{r+k}, \dots, S_{r+k+n}) \quad ; \quad k=0, 1, 2, \dots, n$$

y construimos el hiperplano de dimensión n generado por los mismos, buscando su intersección con la dirección del vector $/// (1,1,\dots,1)$, perteneciente a ese espacio. Esa intersección, $E_n(S_r)$, es la transformación de orden n -ésimo de Shanks, y puede expresarse en la forma

$$E_n(S_r) = \begin{vmatrix} DS_r & \dots & DS_{r+n-1} & S_r \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ DS_{r+n-1} & \dots & DS_{r+2n-2} & S_{r+n-1} \\ DS_{r+n} & \dots & DS_{r+2n-1} & S_{r+n} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} DS_r & \dots & DS_{r+n-1} & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ DS_{r+n-1} & \dots & DS_{r+2n-2} & 1 \\ DS_{r+n} & \dots & DS_{r+2n-1} & 1 \end{vmatrix}^{-1} \quad (2.4.3)$$

donde

$$DS_m = S_{m+1} - S_m \quad (2.4.4)$$

pudiendo escribirse, $E_n(S_r) = p_1 S_r + p_2 S_{r+1} + \dots + p_{n+1} S_{r+n}$, con $p_1 + p_2 + \dots + p_{n+1} = 1$. Resulta, entonces, que puede interpretarse a $E_n(S_r)$ como un promedio pesado de $S_r, S_{r+1}, \dots, S_{r+n}$. El mismo es, sin embargo, no lineal en los S_i , ya que los pesos p_j serán función de ellos.

Es fácil ver, a partir de (2.4.3) y (1.5.3), que si

$$S_r = \sum_{j=0}^r a_j z^j \quad ; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} S_r = S(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j z^j \quad (2.4.5)$$

entonces

$$E_n(S_r) = [n, n+r]_S \quad (2.4.6)$$

es decir el método de aproximación coincide, en este caso, con el de los A.P. En general, si

$$S_r = \sum_{j=0}^r a_j \tag{2.4.7}$$

podemos definir

$$h(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j z^j \tag{2.4.8}$$

de tal modo de que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} S_r = h(1)$$

y tendremos, de acuerdo con (2.4.5) y (2.4.6)

$$E_n(S_r) = [n, n+r]_{h(1)} \tag{2.4.9}$$

De (2.4.9) resulta la razón por la cual los $E_n(S_r)$ son llamados / aproximantes de Padé puntuales. De este modo, los A.P. adquieren / un significado como método de transformación de sucesiones, y en // este sentido deben considerarse en las secciones siguientes.

Por completitud, daremos ahora un teorema debido a Shanks que es una generalización de lo visto para el caso de la sucesión / de sumas parciales de la serie geométrica.

Teorema 1 ; Si S_r tiene la forma

$$S_r = S + \sum_{i=1}^m a_i q_i^r$$

entonces, $E_m(S_r) = S$.

Cabe destacar, que en una tal sucesión, cualesquiera $m+1$ elemen- / tos sucesivos se hallan relacionados linealmente ⁽⁴²⁾.

2.4-I Sucesiones de Newton

Demostraremos dos teoremas que nos permitirán, mas ade- / lante, asegurar la convergencia del esquema a los valores correc- / tos, cuando S_r es la sucesión de sumas parciales del desarrollo /

(2.1.7) para $\theta = 0, \tilde{\gamma}$, o del (2.1.8), correspondientes a potenciales de largo alcance.

Por conveniencia de notación, introducimos los determinantes de Hankel

$$H_k^m(f_r) = \begin{vmatrix} f_m & f_{m+1} & \cdots & f_{m+k-1} \\ f_{m+1} & f_{m+2} & \cdots & f_{m+k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_{m+k-1} & f_{m+k} & \cdots & f_{m+2k-2} \end{vmatrix} \quad (2.4.10)$$

y el operador diferencia, definido por

$$D_m^p S_m = D_m^{p-1} S_{m+1} - D_m^{p-1} S_m ; D_m^1 S_m = D S_m ; D_m^0 S_m = S_m \quad (2.4.11)$$

siendo $D S_m$ el dado por (2.4.4). Entonces, puede demostrarse⁽⁴³⁾ que

$$E_n(S_m) = [n, n+m] = H_{n+1}^m(S_r) / H_n^m(D_r^2 S_r) ; m=0,1,2,\dots ; n=0,1,2,\dots \quad (2.4.12)$$

o, equivalentemente, operando sobre los determinantes en (2.4.12)

$$E_n(S_m) = H_{n+1}^0(D_m^r S_m) / H_n^2(D_m^r S_m) \quad (2.4.13)$$

Supongamos ahora que la sucesión S_m de interés, es tal, que asintóticamente se tiene^(*)

$$S_m \sim S + a_k / (m + \mu)^k ; k \geq 1, \mu \geq 0 \quad (2.4.14)$$

(*) Diremos que S_m tiende asintóticamente a B_m , y lo indicamos $S_m \sim B_m$, si dado $\epsilon > 0 \exists m_0$ tal que $|S_m - B_m| / |S_m| < \epsilon$ para $m > m_0$

Considerando las diferencias como diferenciales, es inmediato verificar, por derivación directa, que

$$D_m^p S_m \sim \frac{a_k (k+p-1)! (-)^p}{(k-1)! (m+\mu)^{k+p}} \quad ; \quad p \geq 0 \quad (2.4.15)$$

Por otro lado, sustrayendo filas y operando algebraicamente en el / determinante (2.4.10) podemos demostrar que para $n, k \geq 0$

$$H_{k+1}^n(r!) = n!(n+1)! \dots (n+k)! k!(k-1)! \dots 2!1! \quad (2.4.16)$$

Reemplazando (2.4.15) en (2.4.13), y usando (2.4.16), obtenemos, // finalmente

Teorema 2 (sucesiones de Newton monótonas)^(*): Si S_m viene dada asintóticamente por (2.4.14), entonces, para n fijo, se tiene

$$E_n(S_m) \sim S + \frac{a_n n! k!}{(m+\mu)^k (k+n)!} \quad (2.4.17)$$

Analicemos ahora el caso de la sucesión oscilante

$$R_m \sim R + (-)^m \frac{a_k}{(m+\mu)^k} \quad ; \quad k \geq 1, \mu \geq 0 \quad (2.4.18)$$

Usando (2.4.15) y (2.4.18) obtenemos

$$D_m^p ((-)^m R_m) \sim \frac{a_k (k+p-1)! (-)^p}{(k-1)! (m+\mu)^{k+p}} \quad (2.4.19)$$

y partiendo de la expresión (2.4.12) para $E_n(R_m)$ y operando algebraicamente sobre ella de manera tal de poder aprovechar (2.4.19), resulta, usando (2.4.16)

(*) Wynn ha demostrado teoremas análogos, para el caso $k=1$ (43).

Teorema 3 (sucesiones de Newton oscilantes) : Si S_m viene dada asintóticamente por (2.4.18), entonces, para n fijo, se tiene

$$E_n(R_m) \sim R + \frac{a_k (-)^m}{2^{2n} (m+\mu)^{2n+k}} \frac{n!(k+n-1)!}{(k-1)!} \quad (2.4.20)$$

A partir de los resultados de los teoremas 2 y 3 , podemos comparar ahora las velocidades de convergencia de las sucesiones obtenidas a partir de las transformaciones de Shanks, relativas, a las correspondientes a las sucesiones originales. Para ello comparamos $E_n(S_m)$ con S_{m+2n} , el elemento de orden mas alto de la sucesión requerido para el cálculo del primero.

Para el caso de las sucesiones monótonas de Newton, de (2.4.14) y (2.4.17), obtenemos asintóticamente, para n fijo

$$\frac{|E_n(S_m) - S|}{|S_{m+2n} - S|} \sim \frac{k!}{(n+k) \dots (n+1)} \left(1 + \frac{2n}{m+\mu}\right)^k = \Delta \quad (2.4.21a)$$

y como k es fijo, y mayor o igual que 1

$$\Delta < \frac{k!}{n^k} \left(1 + \frac{2n}{m+\mu}\right)^k = k!(1/n + 2/(m+\mu))^k \quad (2.4.21b)$$

Vemos que para $n \gg k$ este cociente resulta ser asintóticamente, menor que 1 , disminuyendo al crecer n . De este modo, las sucesiones obtenidas convergen, asintóticamente, con mayor rapidez que las originales.

Análogamente, para las sucesiones de Newton oscilantes, puede verse de (2.4.18) y (2.4.20) que para n fijo, resulta

$$\frac{|E_n(R_m) - R|}{|R_{m+2n} - R|} \sim \frac{n!(k+n-1)!}{(k-1)!} \frac{1}{2^{2n} (m+\mu)^{2n}} \quad (2.4.22)$$

Notamos que de acuerdo con (2.4.22), el cociente tiende a cero para $m \rightarrow \infty$, a diferencia de lo obtenido en (2.4.21), donde tiende a un //

valor finito que disminuye con n . Es de esperar, como consecuencia de ello, un aumento relativo de la velocidad de convergencia / mas enérgico en el caso oscilante, que en el monótono.

2.4-II La sucesión de sumas parciales de los desarrollos de $f(l)$, $f(-l)$, y Q .

En lo que sigue, demostraremos que para potenciales tales que

$$V(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -C/r^n \quad (2.4.23)$$

la sucesión de sumas parciales del D.O.P. de la A.D. para los casos $\theta = 0$ y $\theta = \tilde{\pi}$, tiene asintóticamente la forma dada por (2.4.14) y (2.4.18), respectivamente, mientras que la correspondiente al desarrollo (2.1.8) de la sección eficaz total, tiene la forma / / / (2.4.14). La demostración es válida para los casos en que los desarrollos involucrados son convergentes. Queda así, en estos casos, asegurada la convergencia de los A.P.P., a los valores correctos, a través de los teoremas 2 y 3.

De acuerdo con (2.1.7), definimos

$$\begin{aligned} f_M(\cos \theta) &= 1/(2ik) \cdot \sum_{L=0}^M (2L+1) \left[\exp(2i \delta_L) - 1 \right] P_L(\cos \theta) \\ &= f(\cos \theta) \\ &\quad - 1/(2ik) \cdot \sum_{L=M+1}^{\infty} (2L+1) \left[\exp(2i \delta_L) - 1 \right] P_L(\cos \theta) \end{aligned} \quad (2.4.24a)$$

para los casos en que la serie (2.1.7) es convergente (*).

Para potenciales con el comportamiento (2.4.23), y $n \geq 2$ los defasajes tienden asintóticamente a la expresión de Massey- / / Mohr⁽⁴⁴⁾

(*) Para $f(l)$ y $f(-l)$, ello exige $n > 3$ y $n > 2$, respectivamente.

$$\delta_L \sim Cw(n)k^{n-2} / \left[2(L + 1/2)^{n-1} \right] \quad (2.4.25)$$

siendo

$$w(n) = \begin{cases} \frac{n-3}{n-2} \frac{n-5}{n-4} \dots \frac{1}{2} \frac{\pi}{2} & n \text{ par } > 2 \\ \frac{n-3}{n-2} \frac{n-5}{n-4} \dots \frac{2}{3} & n \text{ impar } > 3 \\ 1 \text{ (n=3)} ; \quad \pi/2 \text{ (n=2)} & \end{cases}$$

Vemos así, que los corrimientos de fase decrecen como potencias inversas al aumentar el momento angular.

Si en (2.4.24a) consideramos M suficientemente grande, podemos desarrollar $\exp(2i \delta_L)$ en potencias de δ_L , para obtener

$$f_M(\cos \theta) \simeq f(\cos \theta) - 1/k \cdot \sum_{L=M+1}^{\infty} (2L+1) \delta_L P_L(\cos \theta) + i/k \cdot \sum_{L=M+1}^{\infty} (2L+1) \delta_L^2 P_L(\cos \theta) \quad (2.4.24b)$$

Notamos que la velocidad de convergencia de $f_M(\cos \theta)$ está esencialmente dominada por la correspondiente a su parte real, siendo / mas rápida la de su parte imaginaria.

Vamos a considerar ahora, valores particulares de $\cos \theta$ para los cuales pueden aplicarse los teoremas 2 y 3 a las sucesiones $f_M(\cos \theta)$. Concretamente, los casos $\cos \theta = \pm 1$, para los // cuales se tiene, además,

$$P_L(1) = 1 \quad ; \quad P_L(-1) = (-1)^L \quad (2.4.25)$$

Amplitud hacia adelante $f(1)$ y sección eficaz total Q

Usando (2.4.25) y (2.4.26) en (2.4.24), obtenemos

$$f_M(1) \sim f(1) - 2/k \cdot \sum_{L=M+1}^{\infty} (L+1/2) \delta_L \sim f(1) - A \sum_{L=M+1}^{\infty} (L+1/2)^{-n+2} \quad (2.4.27)$$

con $A = Ck^{n-3} w(n)$, y usando la fórmula de suma de Euler-McLaurin (E.M.)⁽⁴⁵⁾, resulta

$$\begin{aligned} f_M(1) \sim f(1) + A(n-3)(M+\frac{1}{2})^{-n+3} + A/2 \cdot (M+\frac{1}{2})^{-n+2} \\ + Ab_2(-n+2)(M+\frac{1}{2})^{-n+1} + Ab_4(-n+2)(-n+1)(-n)(M+\frac{1}{2})^{-n-1} \\ + \dots \end{aligned}$$

donde $b_{2i} = B_{2i}/(2i)!$, y los B_{2i} son los números de Bernoulli // li ⁽⁴⁵⁾. O sea que tenemos,

$$f_M(1) \sim f(1) + A(n-3)(M+\frac{1}{2})^{-n+3} + o((M+\frac{1}{2})^{-n+2}) \quad (2.4.28)$$

que es una sucesión de la forma (2.4.14).

Por otro lado, de acuerdo con (2.1.8), y para $n > 2$, caso en que ese desarrollo es convergente⁽⁴⁷⁾, podemos definir

$$\begin{aligned} Q_M &= Q - (4\pi/k^2) \sum_{L=M+1}^{\infty} (2L+1) \text{sen}^2 \delta_L \\ &\sim Q - (8\pi/k^2) \sum_{L=M+1}^{\infty} (L+\frac{1}{2}) \delta_L^2 \\ &\sim Q - B \sum_{L=M+1}^{\infty} (L+\frac{1}{2})^{-2n+3} \end{aligned}$$

con $B = 2\pi C^2 k^{2n-6} w^2(n)$, y usando la fórmula de E.M., en forma // análoga, demostramos que la sucesión de sumas parciales para la sección eficaz total Q es también de la forma (2.4.14), es decir

$$Q_M \sim Q + 2B(n-2)(M+\frac{1}{2})^{-2(n-2)} + o((M+\frac{1}{2})^{-2n+3}) \quad (2.4.29)$$

Como consecuencia del teorema óptico (2.1.9), (2.4.29) refleja también el comportamiento asintótico de $\text{Im } f_M(-1)$.

Amplitud hacia atrás $f(-1)$

En este caso de (2.4.24) se tiene, usando como antes // (2.4.25) y (2.4.26)

$$\begin{aligned} f_M(-1) &\sim f(-1) - 2/k \cdot \sum_{L=M+1}^{\infty} (L+\frac{1}{2}) \sigma_L(-1)^L \\ &= f(-1) - 2/k \cdot \sum_{L=M+1}^{\infty} (L+\frac{1}{2}) \delta_L \cos \tilde{\pi} L \\ &\sim f(-1) - A \sum_{L=M+1}^{\infty} (L+\frac{1}{2})^{-n+2} \cos \tilde{\pi} L \end{aligned} \quad (2.4.30)$$

Llamando $h(x) = (x+\frac{1}{2})^{-s} \cos \tilde{\pi} x$, con $s = n-2$, la fórmula de E.M. nos da

$$f_M(-1) \sim f(-1) - A \left[\int_M^{\infty} dx h(x) - h(M)\frac{1}{2} - \sum_{i=1}^{\infty} b_{2i} h^{(2i-1)}(M) \right] \quad (2.4.31)$$

Integrando por partes, y usando las expresiones asintóticas ⁽⁴⁶⁾ para

$$C(z) = \int_z^{\infty} x^{-1} \cos \tilde{\pi} x \, dx \quad \text{y} \quad S(z) = \int_z^{\infty} x^{-1} \text{sen } \tilde{\pi} x \, dx$$

puede demostrarse que

$$\int_M^{\infty} dx (x+\frac{1}{2})^{-s} \cos \tilde{\pi} x \sim (-)^M s K_s \tilde{\pi}^{-2} (M+\frac{1}{2})^{-s-1} + O((M+\frac{1}{2})^{-s-3}) \quad (2.4.32)$$

con

$$K_s = \begin{cases} (-)^{\frac{1}{2}s+1}, & s \text{ par} \\ (-)^{\frac{1}{2}(s-1)}, & s \text{ impar} \end{cases}$$

y por otro lado, es fácil ver que

$$h^{(2i-1)}(M) = O\left(\left(M+\frac{1}{2}\right)^{-s-1}\right), \quad i \geq 1 \quad (2.4.33)$$

En definitiva, usando (2.4.32) y (2.4.33) en (2.4.31), resulta

$$f_M(-1) \sim f(-1) + A/2 \cdot (-)^M \left(M+\frac{1}{2}\right)^{-n+2} + O\left(\left(M+\frac{1}{2}\right)^{-n+1}\right) \quad (2.4.34)$$

que es de la forma (2.4.18). Así, $f_M(-1)$ converge con mayor rapidez que $f_M(1)$.

Cabe destacar, que entre los casos para los cuales resultan válidos los teoremas de convergencia demostrados, quedan incluidos los bastante usuales en el estudio de las colisiones atómicas y moleculares, aquellos en los cuales los potenciales dominantes a grandes distancias son del tipo $1/r^4$ y $1/r^6$. Por otro lado, como veremos en la sección 2.5, los rangos de convergencia del algoritmo son en realidad mas amplios, ya que la evidencia numérica indica una convergencia satisfactoria del mismo para todo θ , aún para los potenciales $1/r$ y $1/r^2$ (para $\theta \neq 0$).

2.4-III Métodos recurrentes de cálculo de los A.P.P.

En la sección anterior hemos demostrado formalmente la importancia de los A.P.P. Para efectivizar su cálculo numérico, bastaría con usar la expresión (2.4.3). Sin embargo, por un lado, al aumentar r y n las diferencias DS_m decrecen, exigiendo trabajar con números muy pequeños al calcular los determinantes, además de las consabidas pérdidas de precisión. Queda así limitado el proceso de cálculo a valores relativamente chicos de r y n . Por otro lado, el tiempo de cálculo aumenta con n , al crecer el orden de los determinantes involucrados. Por fortuna, existen algoritmos que permiten el cálculo recurrente de los A.P.P. evitando en buena medida los mencionados inconvenientes.

Consideraremos dos de esos métodos, los algoritmos Epsilon y Eta, debidos a Wynn⁽⁴⁸⁾ y Bauer⁽⁴⁹⁾, respectivamente.

En el primero de ellos, se definen las magnitudes

$$\epsilon_{2n}^r = F_n(S_r) \quad ; \quad \epsilon_0^r = S_r \quad ; \quad \epsilon_{-1}^r = 0 \quad (2.4.35)$$

y otras auxiliares ϵ_{2n+1}^r , sin significado directo, construyéndose la tabla

$$\begin{array}{cccccc} \epsilon_{-1}^0 & \epsilon_0^0 & \epsilon_1^0 & \epsilon_2^0 & \epsilon_3^0 & \\ \epsilon_{-1}^1 & \epsilon_0^1 & \epsilon_1^1 & \epsilon_2^1 & \vdots & \\ \epsilon_{-1}^2 & \epsilon_0^2 & \epsilon_1^2 & \vdots & & \\ \epsilon_{-1}^3 & \epsilon_0^3 & \vdots & & & \\ \epsilon_{-1}^4 & \vdots & & & & \\ \vdots & & & & & \end{array} \quad (2.4.36)$$

usando la fórmula de recurrencia

$$\epsilon_{n+1}^m = \epsilon_{n-1}^{m+1} + 1 / (\epsilon_n^{m+1} - \epsilon_n^m) \quad (2.4.37)$$

Mediante el uso reiterado de (2.4.37) y de la relación entre estas transformaciones y los aproximantes de Padé (cf. (2.4.6) y (2.4.9)) Wynn derivó⁽⁵⁰⁾ fórmulas de recurrencia entre estos últimos

$$\begin{aligned} & ([i+1, j] - [i, j])^{-1} - ([i, j] - [i-1, j])^{-1} \\ & = ([i, j+1] - [i, j])^{-1} - ([i, j] - [i, j-1])^{-1} \quad (2.4.38) \end{aligned}$$

que con las condiciones de contorno $[0, k] = S_k$; $[-1, j] = \infty$; $[i, -1] = 0$, permiten determinar la parte triangular superior derecha de la tabla de Padé (1.5.4).

El algoritmo Epsilon es una transformación no lineal de una dada sucesión, y si bien permite a través de (2.4.37) o // / (2.4.38) un cálculo relativamente sencillo de la sucesión resultante de la misma, para ciertos casos, no resulta ser estable desde el punto de vista numérico, particularmente para las sucesiones asintóticamente monótonas⁽⁴³⁾. Ello proviene, básicamente, del hecho / de que cuando se está llegando a la zona de convergencia, las cancelaciones entre términos similares en las fórmulas de recurrencia, determinan la pérdida de cifras significativas, siendo este efecto cada vez mas crítico a medida que se progresa en la tabla (2.4.36), de izquierda a derecha.

Una variante más estable, numericamente, es el algoritmo Eta, que consiste en una transformación no lineal de una dada serie. En este esquema, a partir de la serie $S = \sum_{n=0}^{\infty} a_n$, se construye la tabla

$$\begin{array}{cccccc}
 \eta_0^0 & \eta_1^0 & \eta_2^0 & \eta_3^0 & \eta_4^0 & \\
 \eta_0^1 & \eta_1^1 & \eta_2^1 & \eta_3^1 & \vdots & \\
 \eta_0^2 & \eta_1^2 & \eta_2^2 & \vdots & & \\
 \eta_0^3 & \eta_1^3 & \vdots & & & \\
 \eta_0^4 & \vdots & & & & \\
 \vdots & & & & &
 \end{array} \tag{2.4.39}$$

mediante las fórmulas de recurrencia

$$\eta_{2n+1}^m + \eta_{2n}^m = \eta_{2n}^{m+1} + \eta_{2n-1}^{m+1}$$

$$\left(\eta_{2n+2}^m\right)^{-1} + \left(\eta_{2n+1}^m\right)^{-1} = \left(\eta_{2n+1}^{m+1}\right)^{-1} + \left(\eta_{2n}^{m+1}\right)^{-1} \quad (2.4.40)$$

y las condiciones de contorno $\eta_0^m = \infty$, $\eta_1^m = a_m$. Se verifica entonces (51)

$$E_n(S_m) = [n, n+m] = \sum_{k=0}^{m-1} \eta_1^k + \sum_{k=1}^{2n+1} \eta_k^m \quad (2.4.41a)$$

$$E_{n+1}(S_{m-1}) = [n+1, n+m] = \sum_{k=0}^{m-1} \eta_1^k + \sum_{k=1}^{2n+2} \eta_k^m$$

o, equivalentemente

$$E_n(S_m) = E_n(S_{m-1}) + \eta_{2n+1}^m$$

$$E_{n+1}(S_{m-1}) = E_n(S_m) + \eta_{2n+2}^m \quad (2.4.41b)$$

$$E_0(S_m) = \sum_{k=0}^m \eta_1^k = \sum_{k=0}^m a_k$$

donde la primera suma en (2.4.41a) corresponde solamente para $m \geq 1$ y $S_{-1} = 0$.

Con ambos algoritmos, la determinación de $E_n(S_m)$ involucra el conocimiento de $S_m, S_{m+1}, \dots, S_{m+2n}$, o lo que es lo mismo, de $S_m, a_{m+1}, a_{m+2}, \dots, a_{m+2n}$. En el paso n -ésimo del cálculo, se debe agregar una nueva diagonal a la tabla, que se obtiene a partir de la anterior y del nuevo elemento de la sucesión o serie mediante las fórmulas romboidales (2.4.37) o (2.4.10). De esta forma, solo se requiere, a los efectos del cálculo, el almacenamiento de la última diagonal en cuestión, que fuera determinada. Operando de este modo, en el caso del algoritmo Eta, que es el mé-

todo recurrente usado en este trabajo, de (2.4.41) puede visualizarse que en la práctica $E_n(S_m)$ y $E_{n+1}(S_{m-1})$ van apareciendo / intercaladas, como elementos sucesivos de la sucesión resultante / de la transformación, siendo irrelevante a cual de ellas se asigna mayor importancia (*).

Teniendo en cuenta el modelo geométrico de las transformaciones $E_n(S_m)$, puede visualizarse la importancia de la elección del índice m correspondiente al elemento de orden mas bajo de la sucesión, involucrado en su cálculo. Por otro lado, si bien la velocidad de convergencia de los $E_n(S_m)$, crece con n , como lo sugiere tanto el modelo, como las estimaciones (2.4.21) y // (2.4.22), es claro que el trabajo numérico también aumenta con // n (**). Por ello, y dado que en general no se conocen, a priori, / los valores óptimos de m y n para una dada sucesión, un procedimiento adecuado de cálculo resulta ser el siguiente. Se parte / de $m = m_0$, y se determinan las $E_n(S_m)$ y $E_{n+1}(S_{m-1})$, para valores sucesivos de n . Si al llegar a un dado n_0 , no se ha logrado ningún tipo de convergencia, se reinician las transformaciones desde $n = 1$, y a partir del elemento de la sucesión siguiente al último considerado. El procedimiento se repite, hasta lograr convergencia dentro de límites prefijados. Llegado a ese / punto, se sigue aumentando el orden de extrapolación hasta lograr-

(*) En el caso del algoritmo Eta, por ejemplo, y para $m=0$, la / nueva diagonal será $\eta_1^n, \eta_2^{n-1}, \dots, \eta_{n+1}^0$, que se calcula a partir de la $\eta_1^{n-1}, \dots, \eta_n^0$, y $\eta_1^n = a_n$ (cf. (2.4.39)). De estas diagonales, los elementos de interés para el cálculo sucesivo con las ecs. (2.4.41), son, en este caso ($m=0$), los η_k^0 .

(**) El número de operaciones elementales requeridas para el cálculo de $E_n(S_m)$ es del orden de n^2 .

se la precisión requerida. La estimación (2.4.21) sugiere, además, que no es conveniente aumentar n por encima de un número del orden de $m/2$. Resulta más redituable, desde el punto de vista numérico, en caso de requerirse transformaciones de orden superior al mismo, el recomenzar las iteraciones en la forma indicada más arriba. En los cálculos realizados, el valor m_0 fue tomado usualmente igual a cero, mientras que n_0 osciló entre 5 y 10. La evidencia numérica indica que para la aplicación del algoritmo a los desarrollos en ondas parciales, que aquí interesan, los valores de m para los cuales se comienza a tener convergencia para las $E_n(S_m)$, son aquellos tales que los corrimientos de fase son funciones monótonas de L , para todo $L > m$. Ello corresponde, a considerar elementos de la sucesión dada, relativamente cercanos a su forma asintótica.

2.5 - Aplicaciones numéricas de los A.R.P y A.P.P.

En esta sección, consideraremos la aplicación numérica // de los métodos de aproximación vistos en 2.3 y 2.4, a distintos casos significativos desde el punto de vista físico, donde se hallan presentes problemas de convergencia de los respectivos D.O.P. de la A.D.:

- I) el potencial coulombiano, presente en las colisiones entre partículas cargadas, y asociado a un D.O.P. divergente;
- II) el potencial g/r^2 , caracterizado por un D.O.P. de la A.D. // lentamente convergente para $0 < \theta < \pi$, divergente para $\theta = 0$, y oscilante para $\theta = \pi$;
- III) la colisión elástica H_2-H_g , en el rango de 0.0011 - 0.11 eV, caso representativo de las colisiones entre sistemas neutros polarizables, descritas con potenciales con comportamiento asintótico del tipo $V(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} A/r^6$;
- IV) la colisión elástica e-He, en el rango de 100-400 eV, ejemplo de procesos de dispersión entre partículas cargadas y átomos //

neutros polarizables, donde las interacciones dominantes a grandes distancias, son tales que, $V(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} B/r^4$.

En referencia (39a), los A.R.P. $\{N,N\}$ fueron estudiados para el potencial $1/r^2$, representativo de potenciales de largo // alcance, y para el $g \hat{\sigma}(r-a)$, caso límite de un potencial de corto alcance. Los resultados indicaron que en ambos casos, los aproxima-
mantes convergen a los valores correctos, demostrando la estabilidad de los A.R.P. $\{N,N\}$ ante la variación del rango del potencial. Sin embargo, si bien en el primer caso, pudo observarse una impor-
tante reducción en el número de ondas parciales requeridas para obtener una dada precisión en el cálculo de la A.D., en el segundo, la velocidad de convergencia resultó ser menor que la correspondiente a las sumas parciales. Esto indujo a pensar que pudieran existir // situaciones de interés, en las cuales el método no tuviera utilidad real.

Usando el hecho de que para potenciales con comportamiento del tipo (2.4.23), con $n \geq 2$, vale asintóticamente la fórmula (2.4.25) para los defasajes, y que la convergencia de la serie // (2.1.7) está determinada en última instancia, por las ondas parciales con $L \gg 1$, se efectuaron cálculos que permitieron observar, // numéricamente, que en general, el comportamiento de los A.R.P. $\{N,N\}$ para los casos $n > 3$ resulta relativamente incierto, en lo que // respecta a su velocidad de convergencia. La misma resultó ser, según los casos, algo mejor, comparable, o aún inferior, a la correspondiente a las sumas parciales. Por otro lado, los $\{1,N\}$, que resultaron mas lentamente convergentes que los $\{N,N\}$ para $n = 1,2$, resultan adecuados para los casos en que $n > 3$, por verificarse // en ellos las hipótesis de la propiedad 3 de los A.R.P. (pag. // 26)^(*). Por ello, en los casos I y II se consideran los $\{N,N\}$ //

(*) Notar que para este tipo de potenciales, de acuerdo con // //

como representativos de los A.R.P., mientras que en la III y IV, // los $\{1, N\}$.

Por completitud, analizamos, en primer lugar, la aplicación de los A.P.P. y los A.R.P. $\{1, N\}$, para sumar el D.O.P. de la A.D. asociado al potencial

$$V(r) = g \delta(r-a)$$

representativo, de potenciales de corto alcance. Los defasajes δ_L vienen dados, en este caso, por ^(39a)

$$\delta_L = \text{tg}^{-1} \left[\frac{gka j_L^2(ka)}{1 + gka j_L(ka) n_L(ka)} \right]$$

donde j_L y n_L son las funciones esféricas de Bessel y de Neumann definidas en la sección 2.1. En la tabla 2.1 se indican // resultados para el caso $g = -100$ y $k = 10a^{-1}$, típicos de los obtenidos para θ en el rango $0 \leq \theta \leq \pi$, estudiado. Los valores exactos, tomados como referencia, corresponden a los calculados con las sumas parciales $f_M(\cos \theta)$ (cf. (2.4.24a)), con $M = 18$, // que verifican $|f_M - f_{18}| / |f_{18}| < 10^{-6}$, para $M > 18$, $0 \leq \theta \leq \pi$. Puede apreciarse, del estudio de los resultados, que la convergen-
cia de los A.P.P. y los $\{1, N\}$ es comparable a la de las sumas par-

(2.4.24a) y (2.4.25), los coeficientes del desarrollo en serie de // polinomios de Legendre de la A.D. correspondiente, tienen un com-
portamiento asintótico del tipo

$$f_m \underset{m \rightarrow \infty}{\sim} cm^{2-n}$$

Cabe destacar, además, que los $\{1, N\}$, son los A.R.P no triviales, de cálculo mas sencillo.

ciales, tanto para la parte real, como para la imaginaria, para la cuál es más rápida en todos los casos. Esto último, que fuera observado numéricamente también en las situaciones consideradas más adelante, es consistente con el hecho de que, de acuerdo con (2.4.24), y con las estimaciones (2.4.17) y (2.4.20), en sus respectivos rangos de validez, en primera aproximación, las desviaciones de las sumas parciales y de los A.P.P., respecto de los valores exactos, son reales.

Dado que para el cálculo de secciones eficaces diferenciales, es de principal interés la determinación de $|f(\cos \theta)|^2$, en los casos que se analizan a continuación, se estudian las desviaciones relativas de los distintos métodos de aproximación, al calcular esa magnitud, a través de

$$\epsilon(f_A(\cos \theta)) = \frac{||f_A(\cos \theta)|^2 - |f(\cos \theta)|^2|}{|f(\cos \theta)|^2}$$

donde $f_A(\cos \theta)$ es, según el caso, la aproximación a $f(\cos \theta)$ proporcionada por $f_M(\cos \theta)$, un A.R.P. $\{N, M\}$, o un A.P.P. $E_n(f_m(\cos \theta))$.

2.5-I: Potencial coulombiano.

Es bien sabido, que en este caso, el D.O.P. de la A.D. es divergente, siendo posible, sin embargo, obtener exactamente la A.D., por resolución de la ecuación de Schrödinger correspondiente. Tomando $V(r) = 2\alpha/r$, y k numéricamente, en unidades de α , el D.O.P. de la A.D., para ángulos de dispersión no nulos, viene dado por⁽⁵²⁾

$$f_c(\cos \theta) = \frac{-\eta^2}{1 - \cos \theta} \exp \left[2i \sigma_0 - i \eta \log \left(\frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \right) \right] \\ \doteq |\eta|/2i \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \exp(2i \sigma_L) P_L(\cos \theta) \quad (2.5.1)$$

donde $\epsilon_L = \arg \Gamma(L+1+i\eta)$, y siendo $\eta = \alpha/k = \text{signo}(\alpha)/k$, con la elección de unidades realizada. Los coeficientes de la serie (2.5.1) tienen un comportamiento asintótico del tipo $L^{1+i2\eta}$ // para $L \rightarrow \infty$. La serie es divergente, pero representa, de todas // maneras, a $f_c(\cos \theta)$.

En la Fig. 2.1 se han graficado las magnitudes de los // errores relativos al calcular $|f_c(\cos \theta)|^2$, para los A.R.P. $\{2,2\}$, $\{3,3\}$, y $\{5,5\}$, y los A.P.P. $[3,3]$, $[5,4]$, $[8,7]$, y $[12,12]$, para el caso $\eta=1$. También se han indicado, entre paréntesis, los // números de ondas parciales requeridas para el cálculo de cada aproximante. De la consideración de la figura, resulta la utilidad de // ambos tipos de aproximantes para regularizar el desarrollo divergente (2.5.1) para $\theta \neq 0$. Para $\cos \theta = 1$, la A.D. tiene un // punto de ramificación (cf. (2.5.1)), y consecuentemente, al tener $\cos \theta \rightarrow 1$, ninguna configuración racional en $\cos \theta$ puede // aproximarla, incrementándose el error sin límite. Cabe destacar, // además, que la velocidad de convergencia de los A.R.P. resulta ser algo mayor que la correspondiente a los A.P.P., para los valores // intermedios de θ , y aparentemente menor, para ángulos cercanos a π . Por otro lado, ambos tipos de aproximantes presentan una // tendencia a incrementar su precisión al aumentar θ , siendo ello más marcado para los A.P.P.

Desde el punto de vista práctico, podría pensarse que estos métodos podrían ser de gran valor, no tanto para el caso en que el potencial en cuestión es coulombiano puro, ya que se conoce en // este caso la amplitud exacta, sino para los casos en que a grandes distancias del centro de fuerzas

$$V(r) \sim 2\alpha/r + V_m(r)$$

donde $V_m(r)$ verifica, $\lim_{r \rightarrow \infty} r |V_m(r)| = 0$. En este caso, la solu -

ción de la ecuación radial (2.1.2) para r suficientemente grande, será, en lugar de (2.1.4), de la forma

$$u_L(r) = A_L F_L(r) + B_L K_L(r)$$

donde $F_L(r)$ y $K_L(r)$ son las soluciones regular e irregular, // respectivamente, de (2.1.2) para el potencial coulombiano, y puede demostrarse⁽⁵³⁾ que para $\theta \neq 0$, la amplitud coulombiana puede // sustraerse de la total, obteniéndose

$$f(\cos \theta) = f_c(\cos \theta) + f_m(\cos \theta)$$

donde

$$f_m(\cos \theta) = 1/(2ik) \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \exp(2i \sigma_L) [\exp(2i \delta_L) - 1] P_L$$

con $\delta_L = \text{tg}^{-1}(B_L/A_L)$. Vemos, entonces, que la importancia de // los A.R.P. y A.P.P. como mecanismos de regularización, es relativa, en este caso, aunque si podrían ser de interés como aceleradores de la convergencia del D.O.P. de $f_m(\cos \theta)$.

2.5-II: Potencial g/r^2 .

Teniendo un largo alcance, este potencial presenta muchas de las características de varios potenciales de interés físico, que determinan una lenta convergencia del D.O.P. de la A.D. Al mismo // tiempo, los corrimientos de fase pueden ser evaluados en forma // exacta, en este caso, permitiendo ello, una precisa comparación entre distintos métodos de aproximación, y el tradicional de las su - mas parciales.

En algunos aspectos, este potencial se comporta en forma singular, y no puede ser tratado en la forma convencional^(54,55). Las dificultades se presentan, al pretender definir un Hamiltoniano

autoadjunto para este caso. El mismo, está bien definido, a priori, para el caso $g > 3/4$. Para $g < 3/4$ se deben buscar argumentos físicos que aseguren una definición unívoca. Los mismos existen en forma satisfactoria, solamente para $g > -1/4$. En este caso, la definición es unívoca, si se pretende que el Hamiltoniano sea lo // mas similar posible al correspondiente a partícula libre⁽⁵⁵⁾, y // los corrimientos de fase pueden ser obtenidos en forma inmediata

$$\delta_L = (\pi/2) \left[L + \frac{1}{2} - \left(\left(L + \frac{1}{2} \right)^2 + g \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (2.5.2)$$

notándose, que son independientes de la energía.

En función de los δ_L el D.O.P. de la A.D. será el // (2.1.7) que reescribimos en la forma

$$f(\cos \theta) = 1/k \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \exp(i\delta_L) \text{sen } \delta_L P_L(\cos \theta) \quad (2.5.3)$$

Siendo el potencial considerado de largo alcance, habrá una gran // probabilidad de dispersión según pequeños ángulos, reflejándose // ello, en particular, en el hecho de que $f(\cos \theta)$ diverge para // $\theta=0$ ⁽⁴⁷⁾. A fin de estudiar la convergencia de la serie para $\theta \neq 0$, consideramos la contribución a la misma proveniente de las ondas // parciales para las cuales, $L \gg 1, g$. En este límite, se sigue de (2.4.25), que

$$\delta_L \approx -\pi g / (4L) \quad (2.5.4)$$

Definimos las sumas parciales $f_M(\cos \theta)$

$$f_M(\cos \theta) = 1/k \sum_{L=0}^M (2L+1) \exp(i\delta_L) \text{sen } \delta_L P_L(\cos \theta) \quad (2.5.5)$$

y el resto, $R_M(\cos \theta)$

$$f(\cos \theta) = f_M(\cos \theta) + R_M(\cos \theta) \quad (2.5.6)$$

Usando (2.5.4), obtenemos, para $M \gg 1, g$

$$R_M(\cos \theta) \simeq -\tilde{\pi}g/(2k) \sum_{L=M+1}^{\infty} P_L(\cos \theta) + i \tilde{\pi}^2 g^2/(8k) \sum_{L=M+1}^{\infty} P_L(\cos \theta)/L \quad (2.5.7)$$

Para $\theta \neq 0$, se conocen las igualdades (56,57)

$$1/\sin(\theta/2) = \sum_{L=0}^{\infty} P_L(\cos \theta), \quad \theta \neq \tilde{\pi} \quad (2.5.8)$$

$$-\log \left[\sin(\theta/2) \left[1 + \sin(\theta/2) \right] \right] = \sum_{L=1}^{\infty} P_L(\cos \theta)/L \quad (2.5.9)$$

El hecho de que (2.5.8) y (2.5.9) son desarrollos convergentes para $0 < \theta < \tilde{\pi}$, asegura que las partes real e imaginaria de $R_M(\cos \theta)$ pueden hacerse arbitrariamente pequeñas con tal de tomar M suficientemente grande. Esto prueba la convergencia de la serie (2.5.3) para esos ángulos. Es de notar, que para $\theta = \tilde{\pi}$ la parte real de $R_M(\cos \theta)$ es oscilante, por lo cual, en este caso, $f(\cos \theta)$ no está definida a través de su D.O.P.

Usando ahora (2.5.8) y (2.5.9) en (2.5.7), y reemplazando la expresión aproximada, así obtenida, para $R_M(\cos \theta)$ en (2.5.6), resulta

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} f^M(\cos \theta) &= k^{-1} \sum_{L=0}^M \left[(2L+1) \sin \delta_L \cos \delta_L + \tilde{\pi}g/2 \right] P_L(\cos \theta) \\ &\quad - \tilde{\pi}g / (4k \sin(\theta/2)) \end{aligned} \quad (2.5.10a)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} f^M(\cos \theta) &= k^{-1} \sum_{L=1}^M \left[(2L+1) \sin^2 \delta_L - \tilde{\pi}^2 g^2 / (8L) \right] P_L(\cos \theta) \\ &\quad - \tilde{\pi}^2 g^2 / (8k) \log \left[\sin(\theta/2) \left[1 + \sin(\theta/2) \right] \right] + k^{-1} \sin^2 \delta_0 \end{aligned} \quad (2.5.10b)$$

La precisión de la aproximación (2.5.10) fue estudiada^(39a), encontrándose que para $M > 25$ la misma es estable dentro de seis cifras significativas. Se tomó ese valor estable de $f^M(\cos \theta)$, como valor exacto de referencia, para $0 < \theta < \pi$.

En la Fig. 2.2 se indican las gráficas de magnitud de // error relativo, correspondientes a los A.R.P. $\{2,2\}$, $\{3,3\}$, $\{4,4\}$ los A.P.F. $[7,7]$, $[14,14]$, y la suma parcial calculada con 1000 ondas parciales, para el caso $g=1$ y $k=10$. Análogamente al caso coulombiano, $f(\cos \theta)$ tiene un punto de ramificación para $\cos \theta = 1$ (cf. (2.5.10)), y ello explica, nuevamente, el aumento de las // magnitudes de los errores de los aproximantes para $\theta \rightarrow 0$. Cabe destacar, que ambos tipos de aproximantes convergen, y al mismo valor, para $\theta = \pi$, proporcionando así, una regularización del desarrollo (2.5.3) para ese ángulo. También en este caso, se observa que los A.R.P. convergen con mayor rapidez que los A.P.F., aún para // $\theta \approx \pi$, siendo la comparación de ambos, con la suma parcial, notablemente favorable para los aproximantes. Es de notar, finalmente, / la tendencia del error relativo de la suma parcial a crecer para / grandes ángulos, y la de los aproximantes a disminuir en ese límite, al igual que en el caso coulombiano. Como veremos en 2.5-III y 2.5-IV, se trata de comportamientos de tipo general.

2.5-III: Colisión elástica H_2-H_g .

Siendo representativa de las colisiones entre moléculas, ha sido descrita por Hostettler y Bernstein⁽⁵⁸⁾ mediante un potencial de Lennard-Jones

$$V(r) = 4V_0 \left[(s/r)^{12} - (s/r)^6 \right] \quad (2.5.11)$$

con $V_0 = 2.46 \times 10^{-14}$ erg y $s = 2.91 \times 10^{-8}$ cm, que se ha graficado // en Fig. 2.3. De la consideración de ella, se sigue que los parámetros V_0 y s , están relacionados directamente con el valor del

mínimo del potencial, y con la posición del mismo, respectivamente.

Para este sistema, Bernstein⁽⁵⁹⁾ ha hecho cálculos de // secciones eficaces diferenciales y totales a partir del método de // las ondas parciales. Los mismos, fueron parametrizados con las variables adimensionales

$$B=2V_0 s^2 m/\hbar^2 ; \quad A=ks \quad ; \quad E/V_0 =A^2/B \quad (2.5.12)$$

(m = masa reducida del sistema), tomándose $B=125$, valor aproximadamente igual al que corresponde al sistema H_2-H_g (124.1), y // varios valores de A entre 3 y 30 . Ello corresponde a un rango de energía de 0.0011 - 0.11 eV .

Los corrimientos de fase para $L \lesssim 50$, fueron calculados por Bernstein, por integración numérica de la ecuación radial de // Schrödinger (2.1.2), para ciertos valores de L , e interpolando los restantes. Para $L > 50$, fue empleada una generalización inmediata de la aproximación de Massey-Mohr (2.4.25), por la cual

$$\delta_L \sim (3\pi/8)BA^4L^{-5} - (63\pi/256)BA^{10}L^{-11} \quad (2.5.13)$$

En la Fig. 2.4 se ha graficado δ_L como función de L , para los // casos $A=10, 20$, y 30 , representativos del rango estudiado. Puede observarse, que para bajos valores de L , los defasajes son negativos, crecen con L , pasan por un máximo, y finalmente tienden a cero asintóticamente según (2.5.13). Los δ_L negativos de bajo L , están asociados a la parte repulsiva de corto alcance del potencial, mientras que los de orden alto, positivos, con la parte atractiva // de largo alcance. Por otro lado, el número de defasajes negativos disminuye con A , y por lo tanto, con la energía, manifestando // ello, el hecho de que al reducirse ésta última, aumenta la importancia del pozo atractivo del potencial.

En las Figs. 2.5 se muestran resultados numéricos significativos de la aplicación de los A.R.P. y A.P.P. al D.O.P. de la / A.D. En todos los casos, se destaca notablemente el aumento logrado en la precisión de los resultados, al utilizar los aproximantes como método de suma de los desarrollos, a partir de un número finito de corrimientos de fase. Algo análogo, puede decirse, respecto de la aplicación de los A.P.P. para sumar el D.O.P. de Q . Resultados que muestran esto último, se indican en la tabla 2.2 , para el caso $A=30$.

Es de notar, que en los cálculos realizados por Bernstein, se adoptó como criterio para cortar los desarrollos, el considerar solamente los defasajes tales que $\delta_L \geq 0.03$. En el caso $A=30$, por ejemplo, ello corresponde a tomar 85 ondas parciales, y a obtener la amplitud de dispersión con una precisión que oscila entre el 1 y el 8%, dependiendo de θ , siendo ella considerablemente // menor que la obtenida con 61, a partir de $E_4(f_{52})$ (cf.Fig. 2.5c)

2.5-IV: Colisión elástica e-He a energías intermedias.

Este caso es típico de aquellos de colisiones entre partículas cargadas y átomos neutros polarizables, en cuyo estudio, // se tropieza con dificultades numéricas debidas a la lenta convergencia del D.O.P. de la A.D.

La colisión fue estudiada por LaBahn y Callaway⁽²⁹⁾, // usando el método del potencial de polarización extendida⁽⁶⁰⁾. Básicamente, el tratamiento permite reducir el problema al estudio de una ecuación monocanal para el electrón dispersado. Aparte de la / interacción de intercambio, se describe la colisión elástica a través de un potencial efectivo

$$V = V_e + V_{pe} = V_e + V_p + V_d \quad (2.5.15)$$

El primer término, V_e , de corto alcance, incluye los efectos de /

tipo estático del átomo no perturbado sobre el electrón. El segundo, V_{pe} , contiene las componentes de largo alcance, y es el llamado potencial de polarización extendida, siendo el que tiene en cuenta la distorsión de la función de onda atómica por la presencia de la carga. Se compone, a su vez, de dos términos, el primero de los cuales (V_p) es la polarización estática, que no tiene en cuenta la velocidad finita del electrón, mientras que el segundo (V_d), es la polarización dinámica, y representa, precisamente, la corrección a aquél, debida a la deformación de la distribución electrónica del átomo al variar la posición del electrón incidente. Asintóticamente, V_p y V_d tienen desarrollos multipolares de la forma

$$\begin{aligned} V_p(r) &\sim - \sum_{n=1}^{\infty} a_n / r^{2n+2} ; a_n > 0 \\ V_d(r) &\sim \sum_{n=1}^{\infty} b_n / r^{2n+4} ; b_n > 0 \end{aligned} \quad (2.5.15)$$

donde las componentes correspondientes a $n=0$ no aparecen, por anularse exponencialmente para $r \rightarrow \infty$. En particular, merece destacarse, que a_1 es la polarizabilidad estática dipolar del átomo, y a_2 , la cuadrupolar. Los cálculos fueron efectuados de la manera siguiente. La ecuación de la dispersión para el electrón fue considerada, incluyendo las componentes $n=0, 1$, y 2 para V_p y V_d , y resuelta numericamente para las primeras 11 ondas parciales. Para $L \gg 11$, se aprovechó del hecho de que los efectos de intercambio resultan despreciables, y los defasajes fueron evaluados mediante aproximaciones analíticas que incluyeron, la aproximación de Born y la semiclassical JWKB, para los mismos. Los autores afirmaron haber necesitado 51 corrimientos de fase para los cálculos de secciones eficaces diferenciales para ángulos de dispersión no nulos, para asegurar la convergencia del D.O.P. de la A.D.

con una precisión del 1.5%. Para $\theta=0$, las contribuciones de // las sucesivas ondas parciales se suman constructivamente, determinando ello, una muy lenta convergencia de la serie, habiéndose requerido 10051 defasajes, para garantizar la convergencia del desarrollo.

En el trabajo mencionado, se tabulan los corrimientos de fase correspondientes a $L=0, 1, \dots, 10, 15, 25, \text{ y } 50$, correspondientes a los casos de 100, 150, 200, 300, y 400 eV. Teniendo en cuenta que de acuerdo con (2.5.15), en primera aproximación, // $V(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -a_1/r^4$, y consecuentemente con (2.4.25) $\delta_L \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} c/L^3$, se efectuó un ajuste de los defasajes para $L \geq 11$, a partir de // de $\delta_{10}, \delta_{15}, \delta_{25}, \delta_{50}$, mediante la expresión

$$\delta_L = x_1 / (1 + x_2 L + x_3 L^2 + x_4 L^3) \quad (2.5.16)$$

En Fig. 2.6 se ha graficado δ_L como función de L , para los casos de $E=100$, y 400 eV. El comportamiento, característico de todos los casos en el rango de energías considerado, muestra que los defasajes son monótonamente decrecientes y positivos. Ello refleja el hecho de que el potencial es predominantemente atractivo.

En la Fig. 2.7 se analiza, en particular, la aplicación // de los A.P.P. y A.R.P. $\{1, N\}$ para el cálculo de $f(l)$, para $E=400$ eV, caso en el cual, el D.O.P. de la A.D. es el mas pobremente convergente. De la consideración de la figura, puede verse que para // $m=60$, aproximadamente, la sucesión $f_m(l)$ ya se encuentra, prácticamente, en su forma asintótica (la (2.4.28) con $n=4$ y $C=a_1$), y de acuerdo con ello, se verifican las estimaciones dadas por

$$(2.4.21a) \quad (\text{ para } k=1, \text{ y } 2n \ll m) \quad \text{ para } E_1(f_m(l)) \text{ y } E_2(f_m(l))$$

(*). Los $\{1, N\}$, por su lado, si bien convergen con mayor rapidez que $f_m(l)$, se muestran menos efectivos que los A.P.P. Usando //

(*) De (2.4.24), se sigue, que en primera aproximación,

(2.4.21a), podemos evaluar las desviaciones relativas de las transformaciones $E_n(f_m(1))$ calculadas a partir de $m=60$, según el procedimiento indicado al final de la sección 2.4-III. En la tabla siguiente, se indican las mismas, para los aproximantes de mayor // orden considerados ($n=m/2$).

| n | No. de O.P. | $ \epsilon(f_{4n}) $ | $ \epsilon(E_n(f_{2n})) $ | J |
|-----|-------------|----------------------|---------------------------|-------|
| 30 | 121 | 5.6×10^{-2} | 3.7×10^{-3} | 1815 |
| 60 | 241 | 2.8×10^{-2} | 9.3×10^{-4} | 7230 |
| 120 | 481 | 1.4×10^{-2} | 2.3×10^{-4} | 28860 |

$$|f_M - f| \simeq |\operatorname{Re} f_M - \operatorname{Re} f| = \Delta \operatorname{Re} f_M$$

y consecuentemente con ello, se tiene

$$\left| |f_M|^2 - |f|^2 \right| \simeq 2(|\operatorname{Re} f| \Delta \operatorname{Re} f_M + |\operatorname{Im} f| \Delta \operatorname{Im} f_M) \simeq 2 |\operatorname{Re} f| \Delta \operatorname{Re} f_M$$

de donde, con buena aproximación

$$\left| |f_M|^2 - |f|^2 \right| / |f|^2 \propto |f_M - f| / |f|$$

y algo análogo puede decirse respecto de las desviaciones asintóticas relativas de los $E_n(f_m(1))$. Cabe destacar, que ello es consistente con los resultados numéricos obtenidos.

En la última columna de la derecha, se han tabulado los números (J) de ondas parciales requeridos para obtener las desviaciones relativas de los A.P.P. con las sumas parciales. En particular, se sigue que con 481 ondas parciales, se logra una precisión mayor en la evaluación de $f(1)$, a partir de los A.P.P., que con la suma parcial de 10051 términos, que fuera usada por LaBahn y Callaway en su trabajo.

En las Figs. 2.8 se indican los resultados de la aplicación de los aproximantes para el cálculo de $f(\cos \theta)$ usando hasta las primeras 20 ondas parciales en su D.O.P. En líneas generales, se observa el mismo tipo de comportamientos en función de θ que ya fueran vistos en los casos anteriores. En el caso de los // A.P.P., es de notar que esta tendencia de la magnitud del error relativo a disminuir al crecer θ , es consistente con las estimaciones (2.4.21) y (2.4.22), que preveen un aumento relativo de la velocidad de convergencia mucho mayor para $\theta = \pi$ que para $\theta = 0$. Por otro lado, si bien los resultados obtenidos en este caso y los anteriores no son concluyentes en cuanto a destacar, en general, un // tipo de aproximante respecto al otro, para valores intermedios de θ , ellos parecen indicar que los A.P.P. resultan mas efectivos para // $\theta \simeq 0$ (en los casos en que el D.O.P. de la A.D. es convergente) y // para $\theta \simeq \pi$, situaciones en las cuales, los problemas de convergencia, suelen ser especialmente críticos.

Finalmente, en la tabla 2.3 se presentan los resultados // obtenidos con los A.P.P. para el cálculo de Q , en el caso de $E = 400$ eV. La consideración de la misma, muestra que es posible obtener Q con 5 cifras significativas, a partir de las primeras 20 ondas parciales, cuando se usan los A.P.P. como método de suma de // su D.O.P. Cabe destacar, que para obtener una precisión similar // con las sumas parciales, se requieren aproximadamente 40 .

Hemos visto la conveniencia de usar los A.R.P. y A.P.P., como métodos de suma del desarrollo en ondas parciales de la amplitud de dispersión, o aún, del correspondiente a la sección eficaz / total (en el caso de los A.P.P.), para procesos descritos por // potenciales de largo alcance. Es claro, sin embargo, que debido a la existencia de algoritmos recurrentes de cálculo para los A.P.P., estos últimos resultan más atractivos por su mayor simplicidad.

Dado que el uso de series y sucesiones en los cálculos de procesos físicos, es bastante frecuente, resulta importante destacar las posibles aplicaciones de estos esquemas de aproximación, a aquellos casos donde pudieran estar presentes problemas de convergencia. El método de los A.P.P. es aplicable, en principio, a todo tipo de series y sucesiones, mientras que el de los A.R.P., de // aplicación mas restringida, a series en polinomios ortogonales. // Pueden mencionarse algunos de estos desarrollos en serie, para los cuales, podrían ser de utilidad: los desarrollos en polinomios de / Jacobi de la amplitud de dispersión correspondiente a procesos de / colisión electrón - molécula polar , o entre núcleos con acopla - miento L - S ; las series trigonométricas, que aparecen frecuentemente en Electromagnetismo, y que pueden expresarse como series en polinomios de Chebyshev.

APENDICE I : Demostración de la propiedad 2 de los A.R.P.

Partiendo de (2.3.12), y usando el hecho de que para $N > 0$

$$\begin{vmatrix} a_{M+1,N} & \dots & a_{M+1,0} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{M+N,N} & \dots & a_{M+N,0} \\ \sum_{i=1}^N a_{M+i,N} p_i & \dots & \sum_{i=1}^N a_{M+i,0} p_i \end{vmatrix} = 0 \quad (I.1)$$

por ser la última fila del determinante combinación lineal de las / restantes, se verifica

$$\{N, M\} = \begin{vmatrix} a_{M+1,N} & \dots & a_{M+1,0} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{M+N,N} & \dots & a_{M+N,0} \\ \sum_{i=0}^{M+N} a_{i,N} p_i & \dots & \sum_{i=0}^{M+N} a_{i,0} p_i \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_{M+1,N} & \dots & a_{M+1,0} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{M+N,N} & \dots & a_{M+N,0} \\ p_N & \dots & p_0 \end{vmatrix}^{-1} \quad (I.2)$$

Supongamos ahora que $0 \leq L \leq M$, E_L una dada magnitud, E un parámetro del que dependen los coeficientes f_n de la serie (2.3.5), y que se tiene ($h_L = E - E_L$)

$$\lim_{h_L \rightarrow 0} h_L f_n = y_L \delta_{nL} \quad (I.3)$$

se sigue entonces, usando (2.3.7) y (2.3.11), que para $0 \leq t \leq N$,

$$\lim_{h_L \rightarrow 0} \sum_{i=0}^{M+N} h_L a_{i,t} p_i = \sum_{i=|t-L|}^{t+L} r_i^{t,L} y_L p_i = y_L \cdot \sum_{i=|t-L|}^{t+L} r_i^{t,L} p_i = y_L p_t p_i \quad (I.4)$$

que nos permite demostrar, usando la forma (I.2) de los $\{N, M\}$, que

$$\lim_{h_L \rightarrow 0} h_L \{N, M\} = y_L p_L = \lim_{h_L \rightarrow 0} h_L f(z) \quad (I.5)$$

donde $f(z)$ es la definida por la serie (2.3.5), y hemos usado // (I.3). Para $N = 0$, la demostración es trivial, dado que

$$\{0, M\} = \sum_{i=0}^M f_i p_i \quad (I.6)$$

APENDICE II : Cálculo de los A.R.P.

El cálculo de los aproximantes $\{N, M\}$ para valores grandes de N a partir de la expresión (2.3.12) no resulta conveniente desde el punto de vista numérico, dadas las dificultades relativas al cálculo de determinantes de orden alto, particularmente, en lo que respecta a la precisión del mismo. Por otro lado, si consideramos el sistema lineal de ecuaciones en las incógnitas x_1, x_2, \dots, x_{N+1}

$$\begin{array}{rcccc} a_{M+1, N} x_1 + \dots + a_{M+N, N} x_N + p_N x_{N+1} & = & \sum_{L=0}^M a_{L, N} p_L & & \\ \vdots & & \vdots & & \\ \vdots & & \vdots & & \\ \vdots & & \vdots & & \end{array} \quad (II.1)$$

$$a_{M+1, 0} x_1 + \dots + a_{M+N, 0} x_N + p_0 x_{N+1} = \sum_{L=0}^M a_{L, 0} p_L$$

entonces, usando (2.3.12), se sigue que

$$\{N, M\} = x_{N+1} \quad (II.2)$$

Numéricamente, resulta mas adecuado resolver el sistema (II.1), por

el método de eliminación de Gauss, requiriéndose, de este modo, un menor número de operaciones que en el cálculo de los determinantes en (2.3.12). Por otro lado, existen métodos de refinamiento iterativo de las soluciones de dicho sistema, que permiten controlar / la precisión de los resultados (61).

La determinación de los coeficientes $a_{i,j}$ puede efectuarse a partir de (2.3.11), conocidos los $r_L^{m,n}$. Para un conjunto de polinomios ortogonales es sabido que vale la relación (62)

$$p_{n+1}(z) = (A_n z + B_n) p_n(z) - C_n p_{n-1}(z) \quad (\text{II.2})$$

y, a su vez, los $r_L^{m,n}$ pueden generarse a partir de la fórmula de recurrencia (39a)

$$\begin{aligned} r_j^{m+1,n} &= r_{j+1}^{m,n} C_{j+1} A_m / A_{j+1} + r_j^{m,n} (B_m - B_j A_m / A_j) \\ &+ r_{j-1}^{m,n} A_m / A_{j-1} - C_m r_j^{m-1,n} \end{aligned} \quad (\text{II.3})$$

donde $r_j^{m,n} = 0$, si $j < |n-m|$, ó $j > |n+m|$, y $r_n^{0,n} = p_0(z) = p_0$. Para el caso particular de los polinomios de Legendre, se conoce / una expresión compacta para los $r_m^{i,k}$ (63)

$$r_m^{i,k} = \begin{cases} \frac{2m+1}{i+m+k+1} \frac{R[\frac{1}{2}(m+k-i)] R[\frac{1}{2}(i+k-m)] R[\frac{1}{2}(i+m-k)]}{R[\frac{1}{2}(i+k+m)]}, & i+m+k \text{ par} \\ 0, & i+m+k \text{ impar} \end{cases} \quad (\text{II.4})$$

siendo $R(m) = (2m-1)!! / (2^m m!)$.

Alternativamente, pueden generarse directamente los $a_{i,j}$ mediante la fórmula de recurrencia (37)

$$(B_n / A_n - B_m / A_m) a_{m,n} + (C_{m+1} / A_{m+1}) a_{m+1,n} + a_{m-1,n} / A_{m-1} =$$

$$= a_{m,n+1}/\Lambda_n + C_n a_{m,n-1}/\Lambda_n \quad (\text{II.5})$$

con las condiciones iniciales $a_{m,-1} = 0$, $a_{-1,n} = 0$, y $a_{m,0} = //$
 $p_0 f_m$ (cf. (2.3.5)) .

Agradecimientos

Al Dr. C.R. Garibotti, quien me propusiera el tema de investigación, y guiara su desarrollo.

A los Dres. J.A. Mignaco, R.D. Piacentini y O.D. Corbella, por importantes discusiones y sugerencias, en el transcurso de este trabajo.

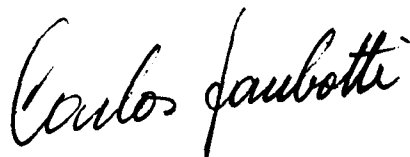
A los Lics. E. Piacentini y C. Falcón, y al Ing. H. G. Bellmann, por sus invalorable asistencias con el trabajo de Computación.

A los Centros de Cómputos de la Universidad Nacional de Rosario y del Centro Atómico Bariloche, donde se efectuaron los cálculos numéricos.

Al personal del Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas e Ingeniería, de la Universidad Nacional de Rosario, donde se realizaron los trabajos de Investigación, sobre los que está basado el presente Trabajo de Tesis, y al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas por las Becas que posibilitaron la realización de los mismos.



Fernando F. Grinstein
Doctorando



Dr. Carlos R. Garibotti
Asesor Científico

REFERENCIAS

- 1.- H.R.McDowell, J.P.Coleman, "Introduction to the theory of ion-atom collisions", North Holland, Amsterdam, 1970, pag. 220.
- 2.- B.A.Lippman, J.Schwinger, Phys. Rev. 79, 469 (1950).
- 3.- R.G.Newton, "Scattering theory of waves and particles", McGraw Hill, New York, 1966.
- 4.- H.Rabbitz, R.Conn, Phys. Rev. A7, 577 (1973).
- 5.- Ref. 1, pag. 234.
- 6.- Ch.Zemach, A.Klein, N.Cim. 10, 1078 (1958).
- 7.- S.Weinberg, Phys. Rev. 131, 440 (1963).
- 8.- T.Kato, "Perturbation theory for linear operators", Springer-Verlag, Berlin, 1966.
- 9.- C.Joachin, Nucl. Phys. 64, 529 (1965).
- 10.- A.R.Holt, B.Santoso, J.Phys.B 7, 1018 (1974).
- 11.- J.Zinn Justin, Phys. Rep. 10, 70 (1971).
- 12.- C.R.Garibotti, J.A.Mignaco, Nucl.Phys. A244, 449 (1975).
- 13.- C.R.Garibotti, P.Massarò, J.Phys.B 4, 79 (1971); 4, 1270 (1972)
- 14.- C.M.Rosenthal, Phys. Rev. A11, 2209 (1975).
- 15.- C.R.Garibotti, F.F.Grinstein, Lett.N.Cim.16, 59 (1976).
- 16.- H.S.Wall, "Analytic theory of continued fractions", Van Nostrand, New Jersey, 1948.
- 17.- C.R.Garibotti, Ann.Phys. 71, 486 (1972).
- 18.- M.Cini, S.Fubini, N.Cim.11, 142 (1954).
- 19.- G.Baker, "Advances in Theoretical Physics", vol.1, 1, Academic Press, New York, 1965.
- 20.- E.Gerjuoy, D.S.Saxon, Phys.Rev.94, 478 (1954).
- 21.- A.R.Holt, B.Santoso, J.Phys.B 6, 2010 (1973).
- 22.- M.Abramovitz, I.Segun, "Handbook of mathematical functions", // Dover, New York, 1965, pag. 355.
- 23.- F.Calogero, "Variable phase approach to potential scattering",

Academic Press, New York, 1967.

- 24.- B.H.Brandsen, "Atomic collision theory", Benjamin, New York, // 1970, pag. 56.
- 25.- Ref. 24, pag. 114.
- 26.- A.E.Kingston, W.C.Fon, P.G.Burke, J.Phys.B 9, 605 (1976).
- 27.- S.Geltman, "Topics in atomic and collision physics", Academic / Press, New York, 1969, pag. 152.
- 28.- P.G.Burke, D.D.McVicar, K.Smith, Proc.Phys.Soc. 83, 397 (1964); 84, 749 (1964).
- 29.- R.W.LaBahn, J.Callaway, Phys.Rev. 180, 91 (1969).
- 30.- R.J.Munn, F.J.Smith, Molec.Phys. 10, 163 (1966).
- 31.- H.Pauly, J.P.Toennies, "Advances in atomic and molecular physics", Academic Press, New York, 1965, vol. 1, pag. 266.
- 32.- R.E.Olson, C.R.Mueller, J.Chem.Phys. 46, 3810 (1967).
- 33.- G.G.Weber, N.H.Gordon, R.B.Bernstein, J.Chem.Phys. 44, 2814 / / (1966).
- 34.- Ref. 1, pag. 76.
- 35.- C.Falcón, R.D.Piacentini, comunicación privada.
- 36.- J.Fleischer, J.Math.Phys. 14, 246 (1973); N.Cim. 24A,73 (1974).
- 37.- J.T.Holdeman, Math.Comp. 23, 275 (1969).
- 38.- J.Fleischer, Nucl.Phys. B37, 59 (1972); Erratum, Nucl.Phys. B44, 640 (1972).
- 39.- a) O.D.Corbella, C.R.Garibotti, F.F.Grinstein, Z.Phys.A 277, 1 (1976); b) F.F.Grinstein, C.R.Garibotti, Comunic.AFA, vol. 1, / no. 4 (1976).
- 40.- D.Shanks, J.Math.Phys.(MIT) 34, 1 (1955).
- 41.- A.C.Aitken, Proc.Roy.Soc.Edinburgh 46, 289 (1926).
- 42.- R.C.Johnson, "Padé approximants and their applications", editado por P.R.Graves-Morris, Academic Press, New York, 1972, pag. 53.
- 43.- P.Wynn, Siam J.Num.Anal. 3, 91 (1966).

- 44.- E.W.McDaniel, "Collision phenomena in ionized gases", Wiley, //
New York, 1964, pag. 153.
- 45.- Ref. 22, pag. 804.
- 46.- Ref. 22, pag. 231.
- 47.- L.D.Landau, E.M.Lifschitz, "Mecánica cuántica no relativista",
Reverté, Barcelona, 1967, pag. 547.
- 48.- P.Wynn, "Mathematical tables and aids for computation", 10, 91
(1956).
- 49.- F.L.Bauer, "Aproximation of functions", editado por H.L.Garabe-
dian, Elsevier, Amsterdam, 1965, pag. 134.
- 50.- P.Wynn, Numer.Math. 8, 246 (1966).
- 51.- W.B.Gragg, Siam review 14, 1 (1972).
- 52.- Ref. 47, pag. 548.
- 53.- Ref. 1, pag. 246.
- 54.- K.M.Case, Phys.Rev. 80, 797 (1950); P.H.Morse, H.Feshbach, "Me-
thods of theoretical physics", McGraw Hill, New York, 1959, pag.
1665.
- 55.- K.Meetz, N.Cim. 34, 690 (1964).
- 56.- G.Sansone, "Orthogonal functions", Interscience, New York, 1959
pag. 242.
- 57.- I.S.Gradshteyn, I.M.Rizhik, "Table of integrals series and pro-
ducts", Academic Press, New York, 1965, pag. 1029.
- 58.- H.U.Hostettler, R.B.Bernstein, J.Chem.Phys. 31, 1422 (1959).
- 59.- R.B.Bernstein, J.Chem.Phys. 33, 795 (1960); 34, 361 (1961).
- 60.- J.Callaway, R.W.LaBahn, R.T.Pu, W.M.Duxler, Phys.Rev. 168, 12 /
(1968).
- 61.- G.E.Forsythe, C.B.Moler, "Solución mediante computadoras de //
sistemas algebraicos lineales", Eudeba, Buenos Aires, 1973, //
pag. 59.
- 62.- G.Szego, "Orthogonal polynomials", Am.Math.Soc.Col.Pub., vol. /
XXIII, 1939, pag. 41.
- 63.- Ref. 57, pag. 1026.

EXPLICACION DE TABLAS

- Tabla 1.1a : $[N, M]_f$ para $V(r)=gr^{-1}\exp(-r/a)$, $ka=0.663$, $\Theta=0$, $\frac{1}{2}\pi$, y π , siendo g y a los parámetros de $V(r)$ en (1.5.7).
- Tabla 1.1b : Idem 1.1a , para $\left|[N, M]_f\right|^2$.
- Tabla 1.2a : Idem 1.1a , para $ka = 1.816$.
- Tabla 1.2b : Idem 1.2a , para $\left|[N, M]_f\right|^2$.
- Tabla 1.3a : Idem 1.1a , para $ka = 3.000$.
- Tabla 1.3b : Idem 1.3a , para $\left|[N, M]_f\right|^2$.
- Tabla 1.4a : $[N, M]_f$ para $V(r)=g'\exp(-r/a)$, $ka=1.000$, y 2.000 , $\Theta=0$, $\frac{1}{2}\pi$, y π , siendo g' y a , los parámetros de $V(r)$ en (1.5.8).
- Tabla 1.4b : Idem 1.4a , para $\left|[N, M]_f\right|^2$.
- Tabla 1.5 : $\left|[N, M]_f\right|^2$ para $V'(r)=\frac{1}{2}gr^{-1}\exp(-r/a)$, $ka=0.663$, // $\Theta=0$, $\frac{1}{2}\pi$, y π , siendo g y a los parámetros de / $V(r)$ en (1.5.7).
- Tabla 1.6 : Idem 1.5 , para $V''(r)=(g/3)r^{-1}\exp(-r/a)$.
- Tabla 2.1 : Comparación de las sumas parciales f_M , los A.P.P. $E_n(f_m)$, y los A.R.P. $\{1, M\}$, para sumar el D.O.P. de la A.D. asociado al potencial $V(r)=-100\delta(r-a)$, $ka=10$, $\Theta=0^\circ$, 60° , 120° , y 180° .
- Tabla 2.2 : Comparación de las sumas parciales $Q_M = 10^{-4}$. / $\sum_{L=0}^M (2L+1)\text{sen}^2\delta_L$, y los A.P.P. $E_n(Q_m)$, para sumar / el D.O.P. de la sección eficaz total Q , para el / potencial de Lennard-Jones (2.5.11), en el caso $A=30$.
- Tabla 2.3 : Comparación de las sumas parciales $Q_M =$ // // // / $\sum_{L=0}^M (2L+1)\text{sen}^2\delta_L$, y los A.P.P. $E_n(Q_m)$, para sumar / el D.O.P. de Q , para la colisión elástica e-He , / en el caso $E=400$ eV .

TABLA 1.1a

ka = 0.663

| N/M | $\theta=0$ | | | | | | |
|-------------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|-----------------------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 0 | 2.365+i0.000 | 3.379+i1.344 | 3.169+i2.963 | 1.909+i4.067 | 0.167+i4.100 | -1.254+i2.962 | -1.647+i1.100 |
| 1 | 2.080+i2.070 | 1.284+i1.986 | 1.144+i1.789 | 1.139+i1.708 | 1.156+i1.679 | 1.177+i1.668 | |
| 2 | 1.438+i2.113 | 1.154+i1.731 | 1.159+i1.682 | 1.175+i1.676 | 1.199+i1.690 | | |
| 3 | 1.201+i1.963 | 1.158+i1.685 | 1.176+i1.679 | 1.159+i1.714 | | | |
| 4 | 1.122+i1.843 | 1.172+i1.676 | 1.171+i1.713 | | | | |
| 5 | 1.105+i1.760 | 1.192+i1.676 | | | | | |
| 6 | 1.115+i1.706 | | | | | | |
| | | | | | | | EXACTO: 1.134+i1.673 |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | | | | | | | |
| 0 | 1.259+i0.000 | 2.128+i1.231 | 1.897+i2.811 | 0.635+i3.904 | -1.108+i3.933 | -2.528+i2.794 | -2.921+i0.932 |
| 1 | 0.370+i1.169 | 0.071+i1.570 | -0.083+i1.565 | -0.117+i1.529 | -0.112+i1.510 | -0.095+i1.500 | |
| 2 | 0.021+i1.428 | -0.088+i1.522 | -0.111+i1.512 | -0.102+i1.510 | -0.090+i1.540 | | |
| 3 | -0.071+i1.495 | -0.108+i1.510 | -0.104+i1.511 | -0.116+i1.519 | | | |
| 4 | -0.098+i1.508 | -0.104+i1.511 | -0.110+i1.510 | | | | |
| 5 | -0.103+i1.510 | -0.099+i1.509 | | | | | |
| 6 | -0.095+i1.510 | | | | | | |
| | | | | | | | EXACTO: -0.140+i1.504 |
| $\theta=\pi$ | | | | | | | |
| 0 | 0.857+i0.000 | 1.619+i1.139 | 1.369+i2.682 | 0.105+i3.763 | -1.637+i3.789 | -3.057+i2.649 | -3.450+i0.786 |
| 1 | 0.054+i0.641 | -0.345+i1.234 | -0.562+i1.370 | -0.628+i1.374 | -0.635+i1.363 | -0.622+i1.354 | |
| 2 | -0.534+i0.718 | -0.646+i1.326 | -0.642+i1.361 | -0.633+i1.361 | -0.625+i1.365 | | |
| 3 | -1.049+i1.080 | -0.646+i1.362 | -0.633+i1.357 | -0.656+i1.357 | | | |
| 4 | -0.794+i1.572 | -0.631+i1.363 | -0.675+i1.339 | | | | |
| 5 | -0.568+i1.447 | -0.610+i1.362 | | | | | |
| 6 | -0.575+i1.364 | | | | | | |
| | | | | | | | EXACTO: -0.669+i1.358 |

TABLA 1.1b

ka = 0.663

| N/M | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | |
|-------------------------|---|-------|-------|-------|-------|-------|---------|-------|
| $\theta=0$ | 0 | 5:593 | 13:22 | 18:82 | 20:18 | 16:84 | 10:35 | 3.920 |
| | 1 | 8:611 | 5:593 | 4:509 | 4:215 | 4:155 | 4:168 | |
| | 2 | 6:533 | 4:328 | 4:172 | 4:190 | 4:294 | | |
| | 3 | 5:296 | 4:180 | 4:202 | 4:281 | | | |
| | 4 | 4:656 | 4:183 | 4:306 | | | | |
| | 5 | 4:319 | 4:230 | | | | | |
| | 6 | 4:154 | | | | | EXACTO: | 4.085 |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 | 1:585 | 6:044 | 11:50 | 15:64 | 16:70 | 14:20 | 9.401 |
| | 1 | 1:503 | 2:470 | 2:456 | 2:352 | 2:293 | 2:259 | |
| | 2 | 2:040 | 2:324 | 2:298 | 2:291 | 2:380 | | |
| | 3 | 2:240 | 2:292 | 2:294 | 2:321 | | | |
| | 4 | 2:284 | 2:294 | 2:292 | | | | |
| | 5 | 2:291 | 2:287 | | | | | |
| | 6 | 2:289 | | | | | EXACTO: | 2.282 |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0:734 | 3:918 | 9:067 | 14:17 | 17:04 | 16:36 | 12.52 |
| | 1 | 0:414 | 1:642 | 2:193 | 2:282 | 2:261 | 2:220 | |
| | 2 | 0:801 | 2:176 | 2:264 | 2:253 | 2:254 | | |
| | 3 | 2:267 | 2:272 | 2:242 | 2:272 | | | |
| | 4 | 3:102 | 2:256 | 2:249 | | | | |
| | 5 | 2:416 | 2:227 | | | | | |
| | 6 | 2:191 | | | | | EXACTO: | 2.292 |

TABLA 1.2a

ka = 1.816

| | N/M | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|------------------------|-----|---------------|---------------|-----------------------|---------------|---------------|
| $\theta=0$ | 0 | 2.365+i0.000 | 2.562+i0.716 | 2.276+i0.923 | 2.114+i0.827 | 2.124+i0.816 |
| | 1 | 2.326+i0.768 | 2.191+i0.766 | 2.182+i0.743 | 2.125+i0.818 | |
| | 2 | 2.202+i0.785 | 2.185+i0.741 | 2.187+i0.739 | | |
| | 3 | 2.175+i0.754 | 2.183+i0.787 | | | |
| | 4 | 2.123+i0.806 | | EXACTO: 2.188+i0.739 | | |
| $\theta=\frac{\pi}{2}$ | 0 | 0.311+i0.000 | 0.388+i0.378 | 0.150+i0.527 | 0.004+i0.432 | 0.017+i0.331 |
| | 1 | 0.115+i0.185 | 0.114+i0.327 | 0.087+i0.351 | 0.080+i0.349 | |
| | 2 | 0.127+i0.281 | 0.079+i0.343 | 0.080+i0.347 | | |
| | 3 | 0.045+i0.363 | 0.079+i0.347 | | | |
| | 4 | 0.083+i0.360 | | EXACTO: 0.079+i0.347 | | |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0.167+i0.000 | 0.214+i0.269 | 0.007+i0.366 | -0.126+i0.294 | -0.111+i0.196 |
| | 1 | 0.038+i0.511 | 0.006+i0.195 | -0.034+i0.221 | -0.048+i0.218 | |
| | 2 | -0.041+i0.102 | -0.046+i0.198 | -0.048+i0.212 | | |
| | 3 | -0.129+i0.143 | -0.053+i0.212 | | | |
| | 4 | -0.101+i0.279 | | EXACTO: -0.050+i0.213 | | |

TABLA 1.2b

$ka = 1.816$

| | Γ/M | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|-------------------------|------------|---------|---------|---------|-----------------|---------|
| $\theta=0$ | 0 | 5.593 | 7.077 | 6.032 | 5.153 | 5.177 |
| | 1 | 6.000 | 5.387 | 5.373 | 5.185 | |
| | 2 | 5.465 | 5.323 | 5.329 | | |
| | 3 | 5.299 | 5.385 | | | |
| | 4 | 5.157 | | | EXACTO: 5.333 | |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 | 0.0967 | 0.2934 | 0.3002 | 0.1866 | 0.1099 |
| | 1 | 0.0475 | 0.1200 | 0.1308 | 0.1282 | |
| | 2 | 0.0797 | 0.1239 | 0.1268 | | |
| | 3 | 0.1338 | 0.1267 | | | |
| | 4 | 0.1365 | | | EXACTO: 0.1267 | |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0.02789 | 0.1182 | 0.1506 | 0.1023 | 0.05074 |
| | 1 | 0.00884 | 0.03806 | 0.05000 | 0.04983 | |
| | 2 | 0.01209 | 0.04132 | 0.04725 | | |
| | 3 | 0.03709 | 0.04775 | | | |
| | 4 | 0.08804 | | | EXACTO: 0.04787 | |

TABLA 1.3a

ka = 3.000

| | N/M | 1 | 2 | 3 | 4 |
|-------------------------|-----|---------------|--------------|--------------|---------------|
| $\theta=0$ | 0 | 2.365+i0.000 | 2.441+i0.454 | 2.313+i0.505 | 2.284+i0.468 |
| | 1 | 2.351+i0.466 | 2.300+i0.464 | 2.298+i0.458 | |
| | 2 | 2.302+i0.470 | 2.298+i0.458 | | |
| | 3 | 2.296+i0.460 | | EXACTO: | 2.299+i0.459 |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 | 0.124+i0.000 | 0.138+i0.139 | 0.059+i0.164 | |
| | 1 | 0.054+i0.068 | 0.062+i0.117 | | |
| | 2 | 0.028+i0.108 | | EXACTO: | 0.053+i0.125 |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0.064+i0.000 | 0.072+i0.089 | 0.011+i0.106 | -0.006+i0.078 |
| | 1 | 0.021+i0.033 | 0.019+i0.066 | 0.010+i0.073 | |
| | 2 | -0.003+i0.049 | 0.009+i0.068 | | |
| | 3 | -0.007+i0.076 | | EXACTO: | 0.008+i0.072 |

TABLA 1.3b

ka = 3.000

| | N/M | 1 | 2 | 3 | 4 |
|-------------------------|-----|---------|---------|---------|---------|
| $\theta=0$ | 0 | 5.593 | 6.165 | 5.605 | 5.436 |
| | 1 | 5.744 | 5.505 | 5.491 | |
| | 2 | 5.520 | 5.491 | | |
| | 3 | 5.483 | | EXACTO: | 5.496 |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 | 0.01538 | 0.03837 | 0.03038 | |
| | 1 | 0.00754 | 0.01753 | | |
| | 2 | 0.01245 | | EXACTO: | 0.01843 |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0.00410 | 0.01311 | 0.01136 | 0.00612 |
| | 1 | 0.00153 | 0.00472 | 0.00543 | |
| | 2 | 0.00241 | 0.00471 | | |
| | 3 | 0.00583 | | EXACTO: | 0.00525 |

TABLA 1.4a

ka = 1.000

| | 1 | 2 | 3 | 4 | |
|-------------------------|---|---------------|---------------|---------------|---------------|
| $\theta=0$ | 0 | 4.000 | 4:275+i1:323 | 3:755+i1:495 | 3.679+i1.270 |
| | 1 | 3:814+i1:355 | 3:748+i1:281 | 3.773+i1.277 | |
| | 2 | 3:741+i1:284 | 3.771+i1.282 | | |
| | 3 | 3.775+i1.272 | | EXACTO: | 3.773+i1.289 |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 | 0:444 | 0:428+i0:564 | 0.045+i0.582 | |
| | 1 | 0:171+i0:210 | 0.152+i0.386 | | |
| | 2 | 0.062+i0.304 | | EXACTO: | 0.116+i0.403 |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0:160 | 0:102+i0:297 | -0:178+i0:247 | -0.161+i0.053 |
| | 1 | 0:041+i0:056 | -0:021+i0:128 | -0.068+i0.120 | |
| | 2 | -0:004+i0:055 | -0.054+i0.099 | | |
| | 3 | -0.033+i0.047 | | EXACTO: | -0.069+i0.102 |

ka = 2.000

| | | | | | |
|-------------------------|---|--------------|--------------|---------------|--------------|
| $\theta=0$ | 0 | 4:000 | 4:064+i0:667 | 3:940+i0:682 | 3.939+i0.660 |
| | 1 | 3:952+i0:670 | 3:941+i0:659 | 3.943+i0.661 | |
| | 2 | 3:941+i0:659 | 3.942+i0.661 | | |
| | 3 | 3.943+i0.661 | | EXACTO: | 3.941+i0.661 |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 | 0:049 | 0:037+i0:051 | 0.014+i0.041 | |
| | 1 | 0:023+i0:019 | 0.022+i0.036 | | |
| | 2 | 0.015+i0.029 | | EXACTO: | 0.019+i0.036 |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0:014 | 0:008+i0:016 | 0.0004+i0.009 | 0.004+i0.007 |
| | 1 | 0:006+i0:005 | 0:005+i0:009 | 0.004+i0.008 | |
| | 2 | 0:004+i0:007 | 0.004+i0.008 | | |
| | 3 | 0.004+i0.008 | | EXACTO: | 0.004+i0.008 |

TABLA 1.4b

ka = 1.000

| | N/M | 1 | 2 | 3 | 4 |
|-------------------------|-----|--------|--------|---------|--------|
| $\theta=0$ | 0 | 16:00 | 20.03 | 16:34 | 15.15 |
| | 1 | 16:38 | 15:69 | 15.87 | |
| | 2 | 15:64 | 15.86 | | |
| | 3 | 15.87 | | EXACTO: | 15.90 |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 | 0:1971 | 0.5013 | 0.3407 | |
| | 1 | 0:0733 | 0.1721 | | |
| | 2 | 0.0963 | | EXACTO: | 0.1759 |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0:0256 | 0.0986 | 0.0927 | 0.0287 |
| | 1 | 0:0048 | 0.0168 | 0.0190 | |
| | 2 | 0:0030 | 0.0127 | | |
| | 3 | 0.0033 | | EXACTO: | 0.0152 |

ka = 2.000

| | | | | | |
|-------------------------|---|----------|----------|----------|----------|
| $\theta=0$ | 0 | 16:00 | 16:96 | 15.99 | 15.95 |
| | 1 | 16:07 | 15:97 | 15.98 | |
| | 2 | 15:97 | 15.98 | | |
| | 3 | 15.98 | | EXACTO: | 15.97 |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 | 0:0024 | 0:0040 | 0.00188 | |
| | 1 | 0:0009 | 0:00178 | | |
| | 2 | 0.0011 | | EXACTO: | 0.00166 |
| $\theta=\pi$ | 0 | 0:00020 | 0:00032 | 0:000081 | 0.000065 |
| | 1 | 0:000061 | 0:000106 | 0.000080 | |
| | 2 | 0:000065 | 0.000080 | | |
| | 3 | 0.000080 | | EXACTO: | 0.000080 |

TABLA 1.5

ka = 0.663

| N/M | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | |
|---------------------------------|---|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $\theta=0$ | 0 | 1.3983 | 2.1750 | 2.2771 | 2.1405 | 1.9997 | 1.9222 | 1.8976 |
| | 1 | 2.0032 | 1.9507 | 1.9228 | 1.9162 | 1.9147 | 1.9143 | |
| | 2 | 1.9731 | 1.9181 | 1.9150 | 1.9145 | 1.9143 | | |
| | 3 | 1.9389 | 1.9151 | 1.9145 | 1.9143 | | | |
| | 4 | 1.9232 | 1.9145 | 1.9143 | | | | |
| | 5 | 1.9172 | 1.9143 | | | | | |
| | 6 | 1.9150 | | | | | | |
| $\theta=\frac{1}{2}\tilde{\pi}$ | 0 | 0.3960 | 0.8115 | 0.9239 | 0.8749 | 0.7985 | 0.7484 | 0.7284 |
| | 1 | 0.5929 | 0.7260 | 0.7355 | 0.7350 | 0.7345 | 0.7343 | |
| | 2 | 0.7158 | 0.7340 | 0.7346 | 0.7344 | 0.7343 | | |
| | 3 | 0.7322 | 0.7345 | 0.7344 | 0.7346 | | | |
| | 4 | 0.7342 | 0.7344 | 0.7347 | | | | |
| | 5 | 0.7344 | 0.7344 | | | | | |
| | 6 | 0.7343 | | | | | | |
| $\theta=\tilde{\pi}$ | 0 | 0.1838 | 0.4643 | 0.5736 | 0.5561 | 0.5045 | 0.4657 | 0.4479 |
| | 1 | 0.2450 | 0.4231 | 0.4477 | 0.4500 | 0.4499 | 0.4498 | |
| | 2 | 0.4344 | 0.4496 | 0.4500 | 0.4499 | 0.4498 | | |
| | 3 | 0.4650 | 0.4500 | 0.4499 | 0.4490 | | | |
| | 4 | 0.4527 | 0.4499 | 0.4494 | | | | |
| | 5 | 0.4496 | 0.4497 | | | | | |
| | 6 | 0.4496 | | | | | | |

TABLA 1.6

ka = 0.663

| N/M | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
|-------------------------|----------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $\theta=0$ | 0 0.6215 | 0.8341 | 0.8416 | 0.8200 | 0.8075 | 0.8034 | 0.8027 |
| | 1 0.8065 | 0.8056 | 0.8036 | 0.8032 | 0.8031 | 0.8031 | |
| | 2 0.8074 | 0.8033 | 0.8031 | 0.8031 | 0.8031 | | |
| | 3 0.8046 | 0.8031 | 0.8031 | 0.8031 | | | |
| | 4 0.8035 | 0.8031 | 0.8031 | | | | |
| | 5 0.8032 | 0.8031 | | | | | |
| | 6 0.8031 | | | | | | |
| $\theta=\frac{1}{2}\pi$ | 0 0.1760 | 0.2851 | 0.2958 | 0.2856 | 0.2787 | 0.2761 | 0.2756 |
| | 1 0.2518 | 0.2746 | 0.2758 | 0.2758 | 0.2758 | 0.2758 | |
| | 2 0.2740 | 0.2757 | 0.2758 | 0.2758 | 0.2758 | | |
| | 3 0.2756 | 0.2758 | 0.2758 | 0.2758 | | | |
| | 4 0.2758 | 0.2758 | 0.2758 | | | | |
| | 5 0.2758 | 0.2758 | | | | | |
| | 6 0.2758 | | | | | | |
| $\theta=\pi$ | 0 0.0817 | 0.1532 | 0.1642 | 0.1582 | 0.1533 | 0.1514 | 0.1510 |
| | 1 0.1181 | 0.1485 | 0.1509 | 0.1511 | 0.1510 | 0.1510 | |
| | 2 0.1515 | 0.1510 | 0.1511 | 0.1510 | 0.1510 | | |
| | 3 0.1520 | 0.1511 | 0.1510 | 0.1510 | | | |
| | 4 0.1511 | 0.1510 | 0.1510 | | | | |
| | 5 0.1510 | 0.1510 | | | | | |
| | 6 0.1510 | | | | | | |

TABLA 2.1

$$n=(N-10)/2, m=N-3$$

$$\theta=0^\circ$$

| N | f_{N-1} | $E_n(f_g)$ | $\{l,m\}$ |
|----|--------------------|--------------------|------------------|
| 12 | -1.85400 +i6.14923 | -2.13807 +i6.07428 | -2.0306 +i5.3609 |
| 14 | -2.01129 +i6.15587 | -2.01420 +i6.15762 | -2.0527 +i6.1416 |
| 16 | -2.01895 +i6.15589 | -2.01917 +i6.15590 | -2.0196 +i6.1559 |
| 18 | -2.01911 +i6.15589 | -2.01912 +i6.15589 | -2.0191 +i6.1559 |
| 19 | -2.01912 +i6.15589 | | |

$$\theta=60^\circ$$

| N | f_{N-1} | $E_n(f_g)$ | $\{l,m\}$ |
|----|--------------------|--------------------|------------------|
| 12 | 0.547994-i0.272653 | 0.551121-i0.272524 | 0.47358-i0.29855 |
| 14 | 0.513432-i0.271128 | 0.517362-i0.269625 | 0.51261-i0.27163 |
| 16 | 0.514035-i0.271120 | 0.514004-i0.271130 | 0.51412-i0.27113 |
| 18 | 0.514056-i0.271129 | 0.514055-i0.271129 | 0.51405-i0.27113 |
| 19 | 0.514056-i0.271129 | | |

$$\theta=120^\circ$$

| N | f_{N-1} | $E_n(f_g)$ | $\{l,m\}$ |
|----|---------------------|---------------------|--------------------|
| 12 | -0.040967-i0.503697 | -0.036756-i0.503215 | -0.068252-i0.50405 |
| 14 | -0.064771-i0.502301 | -0.063507-i0.501808 | -0.063422-i0.50200 |
| 16 | -0.064622-i0.502301 | -0.064621-i0.502303 | -0.064632-i0.50230 |
| 18 | -0.064599-i0.502301 | -0.064600-i0.502301 | -0.064599-i0.50230 |
| 19 | -0.064599-i0.502301 | | |

$$\theta=180^\circ$$

| N | f_{N-1} | $E_n(f_g)$ | $\{l,m\}$ |
|----|---------------------|---------------------|--------------------|
| 12 | -0.267712+i0.472385 | -0.141598+i0.472402 | -0.10293 +i0.47662 |
| 14 | -0.119176+i0.478246 | -0.124292+i0.478506 | -0.12111 +i0.47919 |
| 16 | -0.124671+i0.478260 | -0.124811+i0.478262 | -0.12467 +i0.47826 |
| 18 | -0.124802+i0.478260 | -0.124804+i0.478260 | -0.12480 +i0.47826 |
| 19 | -0.124804+i0.478260 | | |

TABLA 2.2

| M | Q_{M-1} | $E_n(Q_{49})$ | |
|----|-----------|---------------|--------------|
| 52 | 0.15202 | 0.15880 | |
| 54 | 0.15378 | 0.15843 | |
| 56 | 0.15507 | 0.15945 | |
| 58 | 0.15601 | 0.15890 | $n=(M-50)/2$ |
| 60 | 0.15670 | 0.15897 | |
| 62 | 0.15721 | 0.15893 | |
| 64 | 0.15760 | 0.15893 | |

| M | Q_{M-1} | $E_{n'}(Q_{64})$ | |
|----|-----------|------------------|---------------|
| 67 | 0.15801 | 0.15883 | |
| 69 | 0.15821 | 0.15892 | $n'=(M-65)/2$ |
| 71 | 0.15836 | 0.15894 | |
| 73 | 0.15848 | 0.15894 | |

EXACTO: 0.15894

TABLA 2.3

| M | Q_{M-1} | $E_n(Q_{-1})$ | |
|----|-----------|---------------|---------|
| 2 | 0.69696 | 0.15009 | |
| 4 | 0.91915 | 0.99951 | |
| 6 | 0.98712 | 1.03070 | $n=M/2$ |
| 8 | 1.01270 | 1.03000 | |
| 10 | 1.02330 | 1.03050 | |

| M | Q_{M-1} | $E_{n'}(Q_8)$ | |
|----|-----------|---------------|---------------|
| 12 | 1.02790 | 1.03150 | |
| 14 | 1.03000 | 1.03250 | |
| 16 | 1.03110 | 1.03280 | $n'=(M-10)/2$ |
| 18 | 1.03180 | 1.03280 | |
| 20 | 1.03210 | 1.03290 | |

EXACTO: 1.03290

EXPLICACION DE FIGURAS

$$\epsilon_{|f|^2} = \epsilon(f_A(\cos\theta)) = \left| |f_A|^2 - |f|^2 \right| / |f|^2$$

- Fig. 2.1 : Comparación gráfica de $\epsilon(E_n(f_m))$ y $\epsilon(\{N,N\})$, al sumar el D.O.P. de la A.D. correspondiente al potencial $V(r)=2\alpha/r$, $\gamma = \alpha/k = 1$, en función de θ . (*)
- Fig. 2.2 : Comparación gráfica de $\epsilon(E_n(f_m))$, $\epsilon(\{N,N\})$, y $\epsilon(f_{ggg})$, al sumar el D.O.P. de la A.D. correspondiente a $V(r)=1/r^2$, $k=10$, en función de θ . (*)
- Fig. 2.3 : Gráfica del potencial de Lennard-Jones (2.5.11).
- Fig. 2.4 : Gráfica de los corrimientos de fase asociados al potencial (2.5.11), en función de L , para los casos $A=10$, 20 , y 30 .
- Fig. 2.5 : Comparación gráfica de $\epsilon(f_m)$, $\epsilon(E_n(f_m))$, y $\epsilon(\{1,M\})$, al sumar el D.O.P. de la A.D. correspondiente al potencial (2.5.11), en función de θ . (*)
a) $A=10$; b) $A=20$; c) $A=30$.
- Fig. 2.6 : Gráfica de los corrimientos de fase correspondientes a la colisión elástica e-He, para $E=100$, y 400 eV, en función de L .
- Fig. 2.7 : Comparación gráfica de $\epsilon(f_m)$, $\epsilon(E_n(f_m))$, y $\epsilon(\{1,M\})$, al sumar el D.O.P. de la A.D. para la colisión elástica e-He, $E=400$ eV, $\theta=0^\circ$.
- Fig. 2.8 : Comparación gráfica de $\epsilon(f_m)$, $\epsilon(E_n(f_m))$, y $\epsilon(\{1,M\})$, al sumar el D.O.P. de la A.D. correspondiente a la colisión elástica e-He, en función de θ . (*) a) $E=100$ eV; b) $E=200$ eV; c) $E=300$ eV; d) $E=400$ eV.

(*) Entre parentésis, se indican los números de ondas parciales / involucradas en el cálculo de la aproximación correspondiente.

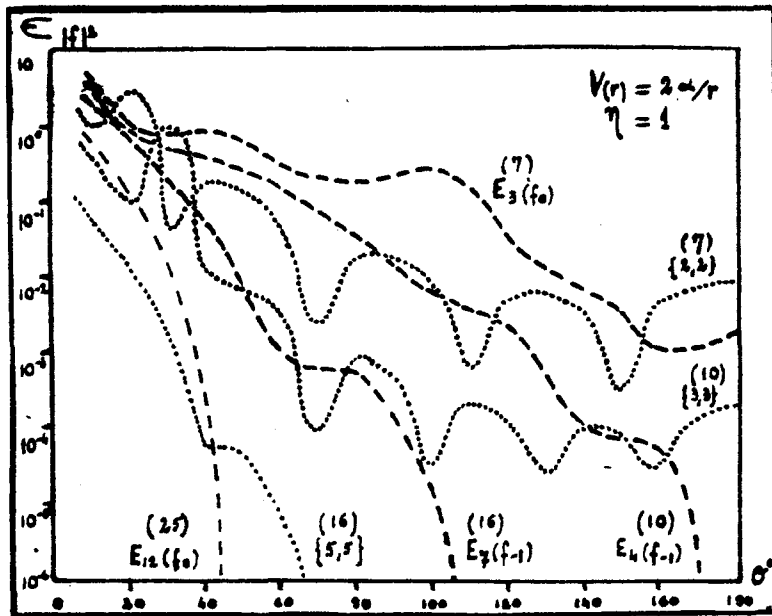


FIG. 2.1

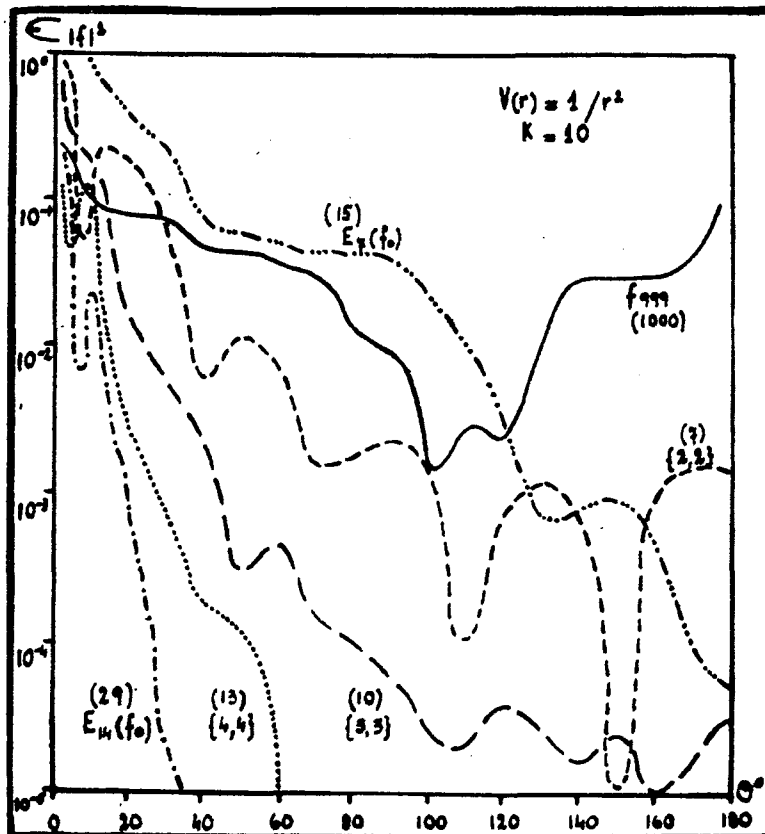


FIG. 2.2

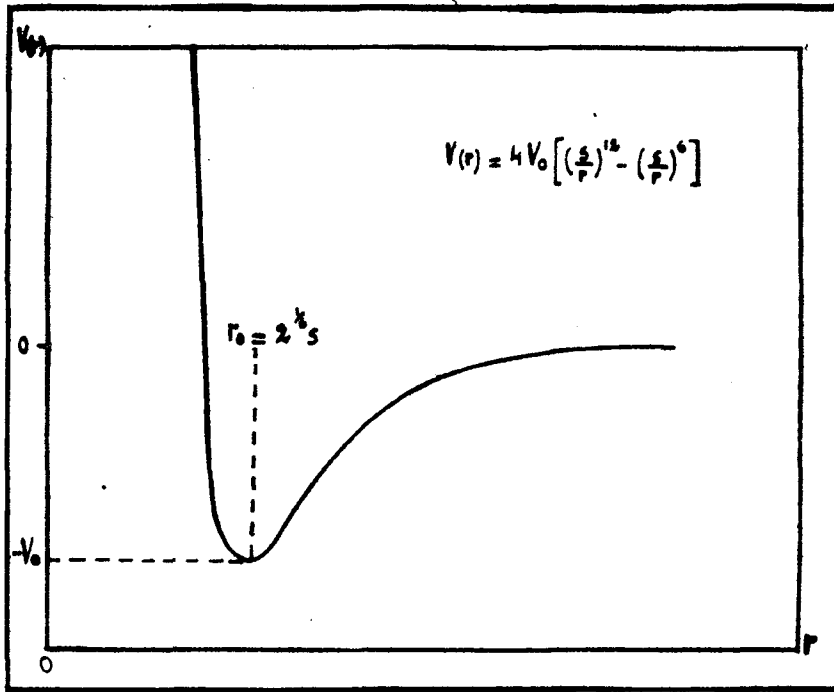


FIG. 2.3

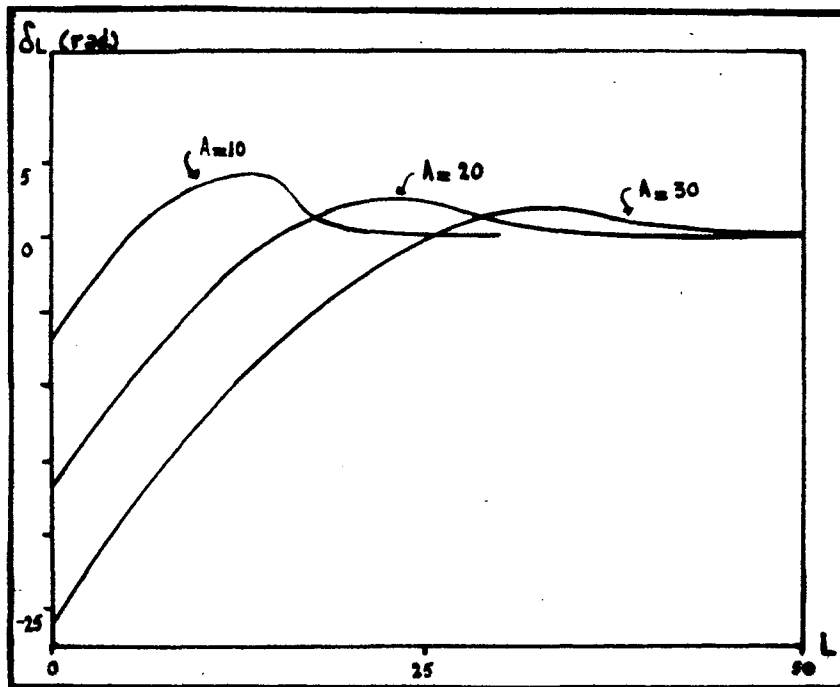


FIG. 2.4

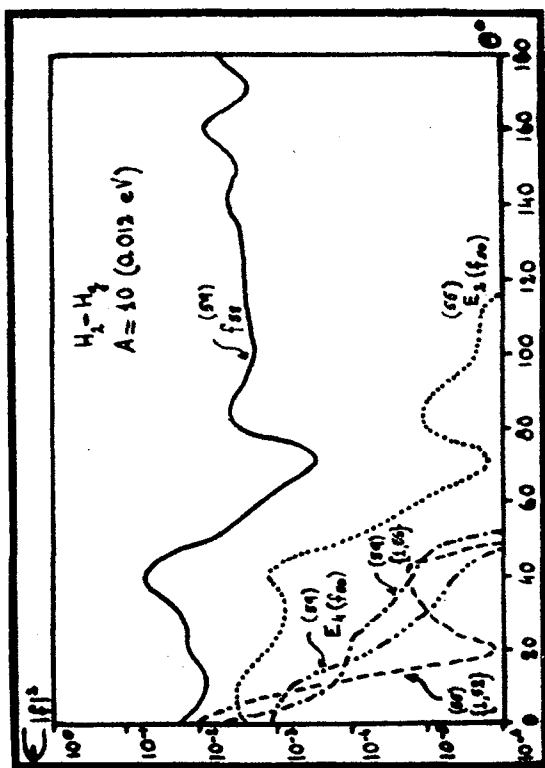


FIG. 2.5a

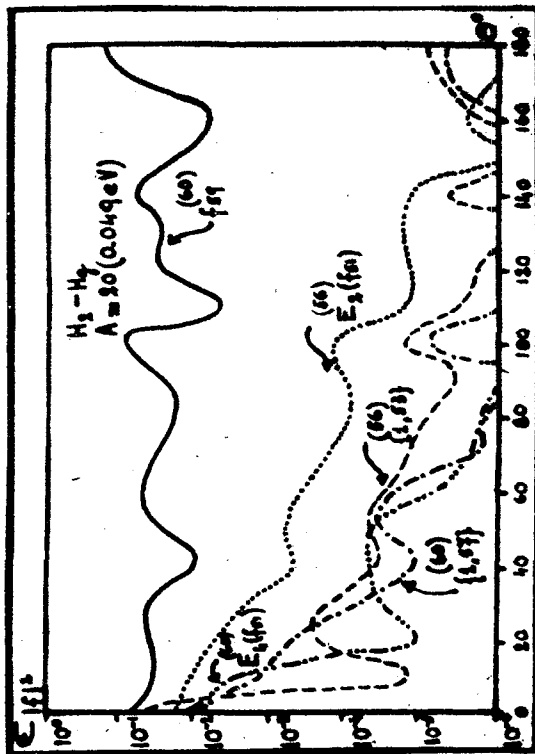


FIG. 2.5b

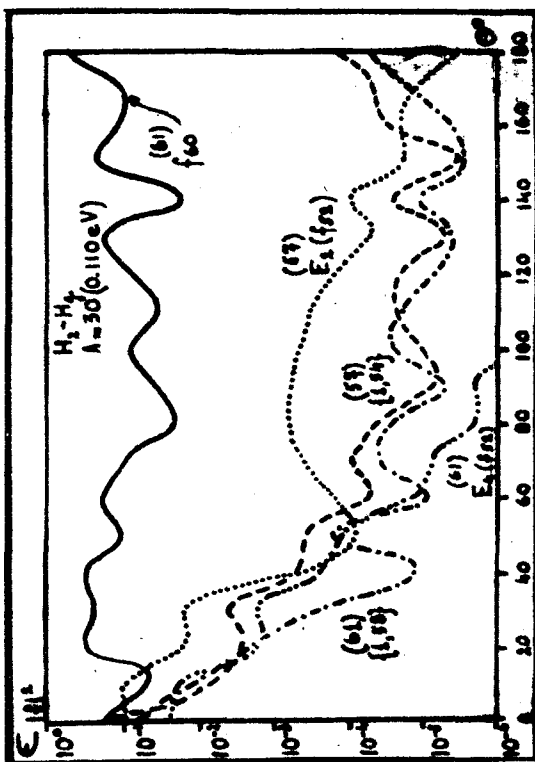


FIG. 2.5c

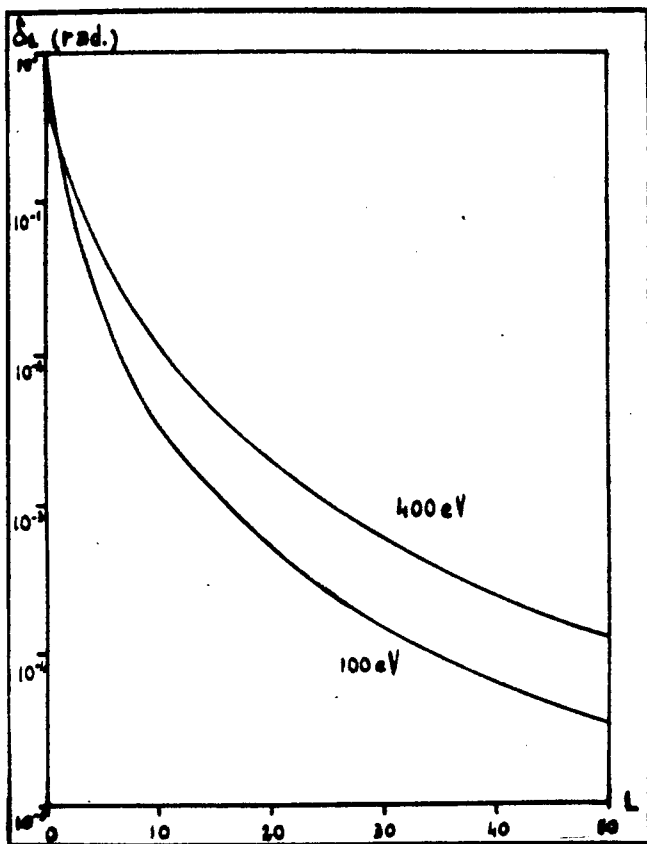


FIG. 2.6

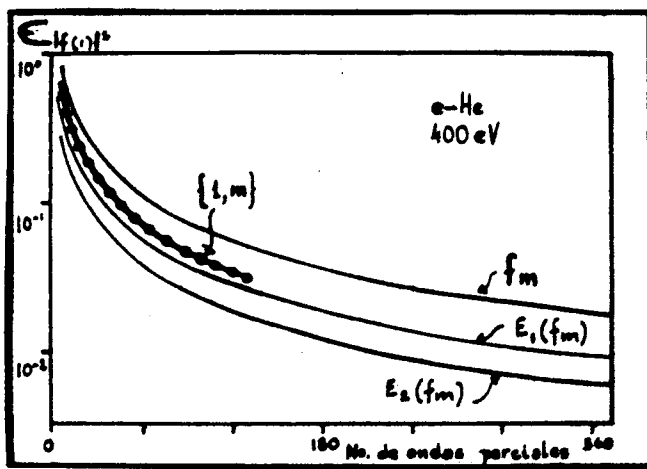


FIG. 2.7

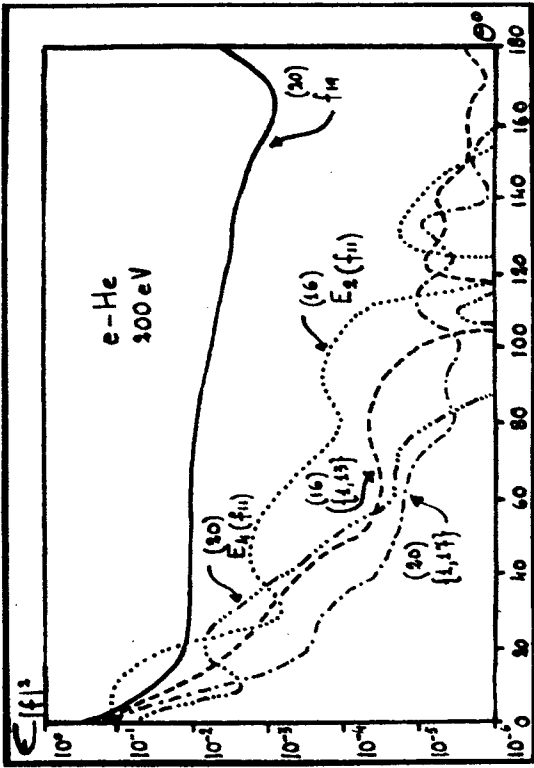


FIG. 2.8b

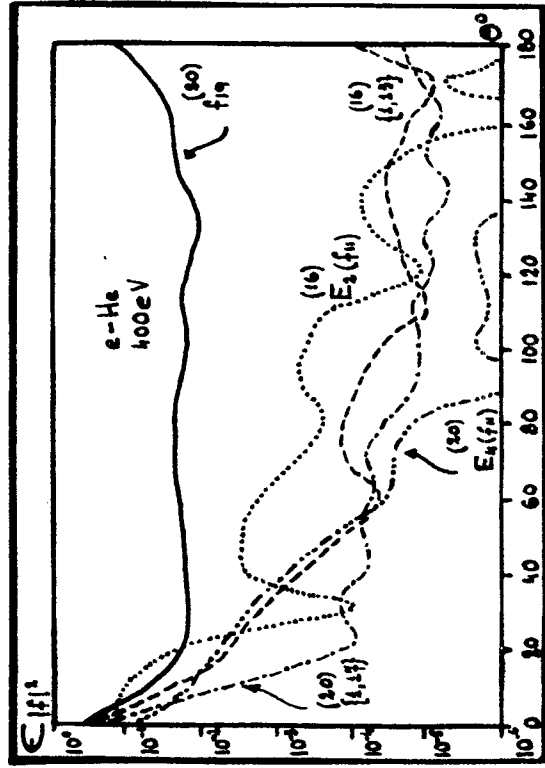


FIG. 2.8d

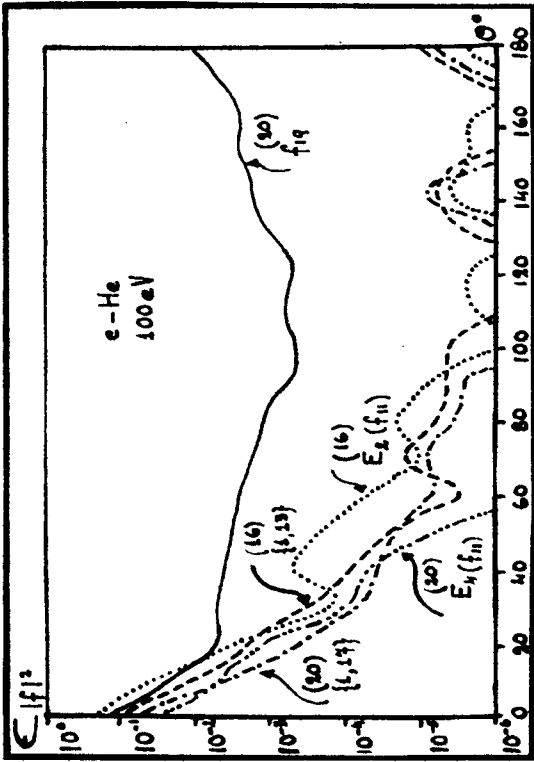


FIG. 2.8a

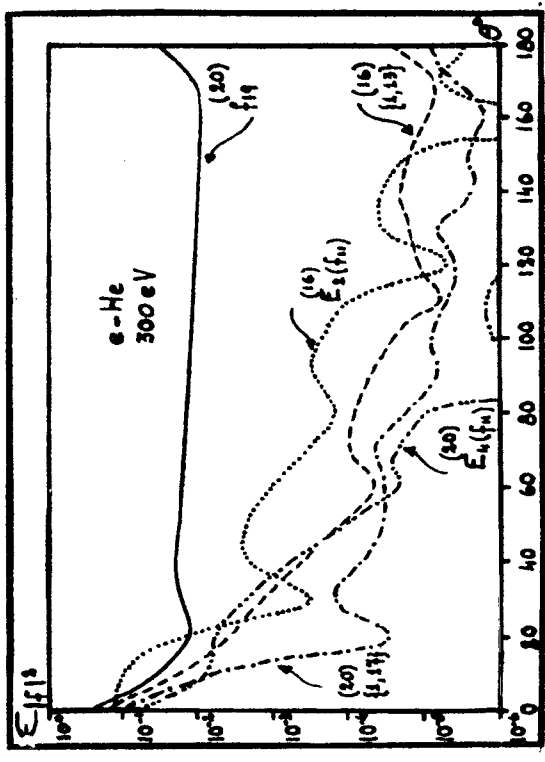


FIG. 2.8c