



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, INGENIERIA Y AGRIMENSURA

ESCUELA DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO DE FISICA

TESIS DE GRADO:

**MODELOS TEORICOS DE ONDA DISTORSIONADA
ORIENTADOS A RADIOTERAPIA VECTORIZADA**

Tesina presentada por Nicolás Julián Esponda para el título de Licenciado en Física en la
Universidad Nacional de Rosario

Marzo 2021

Director:

Dr. Juan Manuel Monti

Co-Director:

Dr. Roberto Daniel Rivarola

Dedicado a

la Chocha y Haroldo,

que guían mis pasos.

Mamá y Papá,

“que me han dado tanto”.

Nana y Ema,

mis hermanos.

Agustino,

para que pregunte mucho.

Agradecimientos

La presentación de esta tesina, sabemos, es formalmente la conclusión de mi carrera de grado para recibirme de Licenciado en Física. Lo que no resulta tan explícito, y por su importancia creo pertinente destacar, es el afecto y toda la ayuda que recibí por parte de mis compañeras y compañeros de la Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, con quienes guardo recuerdos y aprendizajes indelebles. Tal es así que al momento de escribir estas palabras llevo acumuladas ya horas de pasear la mirada y el pensamiento entre tantas memorias que me llevan a las aulas, los pasillos y el comedor de la FCEIA, el parque Urquiza con su planetario y algunos bares y heladerías de Rosario –ciudad vecina a mis pagos de San Nicolás de los Arroyos– o a destinos como Tucumán, Buenos Aires, La Plata, Las Grutas o Bariloche.

En especial agradezco con toda el ánimo a mi amigo Nacho “Pompo”, por las mejores fiestas de cumpleaños y porque gracias a él pude deshacerme de algunos sesgos de origen al conocer la diversidad que nutre a las personas. Con Nacho también fuimos a las marchas de docentes y estudiantes, y en una que se llovió todo conocí a Delfi, amiga omnipresente capaz de ayudar en cualquier cosa. Con Del tengo acumuladas una pila de reflexiones porque con ella tomé conciencia de que hay conceptos que no valen nada si no se los mira e identifica de forma transversal y en cada acto cotidiano. ¡Gracias de nuevo, Nacho y Del! les aprecio un montón.

Agradezco además a Belén que me integró a un maravilloso grupo de amigas y amigos con quienes hacemos largas maratones de estudio en algún aula sin clases –y plataformas virtuales– o compartimos contagiosas risas y anécdotas eternas en las fiestas de exactas o en nuestras numerosas juntadas. Gracias entonces a Mela, Gret, Tito, Kochu, Roy, Martín, Pau, Maurito, Grace, Seba, Dai, Smart, Marian, Sofi, Ger, Giuli, Ches y Nahuel. Hemos incluso cambiado las sillas y mesa por un mantel en el suelo para lograr el lugar suficiente en los departamentos.

También recuerdo con cariño mi participación en “Linealmente Independiente” con quienes me sentí en ejercicio de nuestra ciudadanía universitaria a través de debates internos, asambleas estudiantiles e interclaustrros y actividades para la sensibilización y reflexión sobre algunas de las problemáticas que nos interpelaban. Gracias a quienes compraron torta en los miércoles dulces. Batuque da fe que como agrupación independiente LI solo es sostenible gracias a sus aportes.

Guardo además un inmenso agradecimiento a mi familia, que soportó mis estados de ausencia, tanto por estar lejos de ellos como por estar preocupado por otras cosas cuando cerca. Mis más sinceras disculpas y profundas gracias por entenderme y permitirme hacer lo que me gusta. Tengo la certeza de que sabrán valorizar también a todo el entorno al que me debo y abrazo.

Sin dudas me quedaría largo rato revisitando cada memoria que aflora en este momento pero para eso resta todavía una infinidad de charlas, mates y cenas. Así que para no aburrir más a quien me lee, mejor demos paso a la tesina, pero no sin antes terminar de agradecer a Juan, mi director, que además me facilitó una batería de códigos computacionales que facilitaron las cuentas y la creación de nuevos programas; a Roberto que siguió de cerca el desarrollo de la tesina, con interesantes propuestas para seguir trabajando y a todo el Grupo de Colisiones Atómicas por la cálida bienvenida.

Resumen

En este trabajo se presenta el modelo de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS) para el cálculo de secciones eficaces en reacciones de ionización simple de sistemas de colisión entre iones o átomos contra blancos atómicos o moleculares. Cuando se trata de proyectiles parcial o totalmente vestidos de electrones, su carga nuclear puede verse total o parcialmente apantallada por sus electrones. Para grandes parámetros de impacto, las distorsiones debidas al proyectil presentan una carga asintótica, mientras que para bajos parámetros de impacto el apantallamiento de la carga nuclear podría resultar parcial o nulo. En esta línea se definen y evalúan correcciones para la carga del proyectil modelando un apantallamiento dinámico mediante el factor de forma del proyectil. La definición de cargas dinámicas en función del momento transferido permite, fundamentalmente, recuperar funciones de onda distorsionadas de dos centros en casos de proyectiles atómicos, de carga neutra.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Introducción fenomenológica	1
1.1.1. Contexto	1
1.1.2. Sección eficaz y probabilidad	3
1.1.3. Mecanismos de ionización	3
1.2. Introducción Teórica	6
1.2.1. Idea preliminar	6
1.2.2. Dispersión por un potencial central	7
1.2.3. Aproximación eikonal	7
1.2.4. Dispersión de Coulomb	9
1.2.5. Modelo de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS)	12
2. Teoría	15
2.1. Projectiles desnudos	15
2.1.1. Blancos atómicos monoeléctricos	15
2.1.2. Blancos atómicos multielectricos	23
2.1.3. Operadores derivación para orbitales de Slater	30
2.1.4. Blancos moleculares	32
2.2. Projectiles vestidos	35
2.2.1. Ionización de blancos atómicos multielectricos	37
2.2.2. Ionización de projectiles vestidos	40
2.2.3. Factor de forma	42
2.2.4. Blancos moleculares y projectiles vestidos	45
3. Resultados	47
3.1. Projectiles desnudos	47
3.1.1. Protón sobre Hidrógeno	47
3.1.2. Carbono desnudo sobre Hidrógeno	50
3.1.3. Multiplemente cargados sobre Helio	52
3.1.4. Protón sobre Argón	53
3.1.5. Partículas alfa y Carbono desnudo sobre moléculas de agua	57
3.2. Projectiles vestidos	61
3.2.1. Hidrógeno y Helio sobre Helio	61
3.2.2. Iones Litio sobre Helio	66
3.2.3. Ion Carbono sobre moléculas de agua	68
4. Conclusiones	70

Capítulo 1

Introducción

1.1. Introducción fenomenológica

1.1.1. Contexto

El estudio de la interacción de haces de partículas cargadas con la materia ha sido de creciente interés a lo largo del tiempo debido a sus múltiples áreas de aplicación como la astrofísica, física del plasma o radiobiología. En particular, la comprensión de procesos de ionización y captura electrónica en colisiones entre iones y moléculas del medio biológico (agua, bases de ADN y ARN, esqueleto azúcar-fosfato) ha posibilitado, en conjunto con otras áreas del conocimiento, grandes avances en Radioterapia.

Comparando con las ya consolidadas técnicas de radiación con fotones, los haces de iones presentan una distribución de dosis en profundidad mucho más favorable debido a que concentran el daño biológico sobre el final del rango de su trayectoria (pico de Bragg), minimizando así la interacción con zonas de tejido sano. Esta característica ha sido origen del desarrollo en Radioterapia de los tratamientos conocidos como protonterapia y hadronterapia. De hecho, el uso en medicina de radiaciones ionizantes de alta transferencia de energía ha crecido notablemente debido a su exitosa aplicación en radioterapia con protones [1] dado que permite una excelente localización de tumores. El empleo de protones y haces de carbono ha sido investigado de manera independiente, mostrando un significativo crecimiento del perfil de dosis al final de sus trayectorias, que dan lugar al conocido pico de Bragg.

Por otra parte, hay una reciente estrategia en radioterapia que se encuentra permanentemente ganando importancia y es la denominada radioterapia de radionucleidos dirigida, o bien, radioterapia vectorizada. La misma implica el uso de fármacos radiomarcados, es decir, el acoplamiento de isótopos radioactivos a proteínas, anticuerpos o enzimas específicas para que al ingresar al torrente sanguíneo sean absorbidas únicamente por las células objetivo. Así, cuando el radionucleido decae se logra irradiar sobre determinados tipos de células y su entorno, lo que no solo significa una gran precisión en la entrega de dosis citotóxica [2] sino además la posibilidad de tomar como objetivo a células tumorales en múltiples ubicaciones. Estas características hacen de la radioterapia vectorizada una efectiva opción tanto como terapia de consolidación como también para el tratamiento temprano de pacientes metastásicos, como fuera demostrado por los ensayos clínicos publicados en [3, 4].

Para lograr sus objetivos son importantes los aportes multidisciplinares de la Biología, la Farmacología y la Física. El desafío físico en particular es identificar los mejores radioisótopos para el tratamiento de diferentes tipos de células tumorales. Para ello es preciso estudiar tanto la energía y el tipo de radiación emitida por un dado radionucleido, sea alfa, beta o protones (Física Nuclear), como también es menester calcular la traza de las partículas emitidas en un medio biológico, donde

se desencadenarán procesos de ionización, excitación o captura electrónica (Colisiones Atómicas), entre otros procesos de tipo biológicos, como por ejemplo el daño a cadenas de ADN o la producción de radicales libres.

Para describir la traza de partículas cargadas se utilizan códigos computacionales de tipo Monte Carlo que simulan, interacción tras interacción, la evolución de cada partícula ionizante creada en el medio que atraviesa el haz. En otras palabras, va analizando sucesivas colisiones de una partícula, denominada proyectil, contra diferentes blancos, como por ejemplo moléculas de agua o bases de ADN si se tratase de un medio biológico. A su vez también se simula la evolución de las llamadas partículas secundarias, o sea aquellas generadas en alguna interacción, donde encontramos electrones eyectados o proyectiles que han perdido o capturado electrones. En términos de deposición de energía, la ionización es la *reacción* más importante ya que a energías de incidencia intermedias y altas es la que más probabilidades tiene de ocurrir. Por ejemplo, para la colisión de protones contra moléculas de agua, a partir de energías específicas de 100 keV/amu la probabilidad de ionizar la molécula de agua predomina por sobre la probabilidad de que el protón capture un electrón de la molécula [5].

El cálculo de las probabilidades asociadas a cada tipo de reacción (ionización, captura o excitación), dentro del marco de las colisiones atómicas y moleculares, se realiza en términos de *secciones eficaces* (§1.1.2). A su vez, las secciones eficaces dependen del tipo de reacción, los agregados que participan de la colisión, la energía de impacto, entre otros parámetros que se mencionarán luego. Todo esto implica que para una buena simulación de la traza resulte vital la disponibilidad de una gran base de datos de secciones eficaces.

En este contexto, el desarrollo de modelos mecánico-cuánticos que brinden una completa descripción de las colisiones atómicas y moleculares, además de brindar un conocimiento fundamental sobre cada tipo de reacción, resultan de gran utilidad para el cálculo y la predicción de secciones eficaces. Entre estos modelos se encuentran los de onda distorsionada del continuo (“CDW”, según sus siglas en inglés), propuestos en 1964 para el tratamiento de procesos de captura electrónica y posteriormente en 1978 aplicados por Belkić [6] para reacciones de ionización simple. Años más tarde, en 1983, Crothers y McCann [7] introducirían el modelo de onda distorsionada con estado inicial eikonal (“CDW-EIS”, según sus siglas en inglés), que abordaremos en este trabajo. Para una revisión histórica más detallada de los modelos de ionización simple, recomendamos la lectura del trabajo de Fainstein *et al.* (1991) [8].

En el presente trabajo nos enfocaremos en la emisión de electrones por ionización simple de blancos atómicos y moleculares tras la colisión con distintos proyectiles iónicos o de carga neutra. A continuación introducimos el concepto de sección eficaz y mostramos algunos mecanismos de ionización por los cuáles un electrón puede ser liberado en una colisión. Luego daremos una idea preliminar sobre las características de los modelos de onda distorsionada e introduciremos las funciones de onda utilizadas para describir el estado del continuo del electrón emitido. Al final de este capítulo presentamos el modelo CDW-EIS que desarrollaremos a lo largo del [Capítulo 2](#) para sistemas de colisión entre blancos atómicos o moleculares y proyectiles atómicos que llamaremos *desnudos* cuando se encuentren totalmente ionizados y *vestidos* cuando presenten electrones ligados. Los resultados obtenidos en cada caso se muestran en el [Capítulo 3](#) en comparación con resultados experimentales obtenidos por diversos grupos de investigación para evaluar y discutir sobre las distintas aproximaciones abordadas con el modelo CDW-EIS. Por último, en el [Capítulo 4](#) se condensan las conclusiones obtenidas a lo largo de todo el trabajo. En lo que sigue se emplearán unidades atómicas a menos que se indique lo contrario.

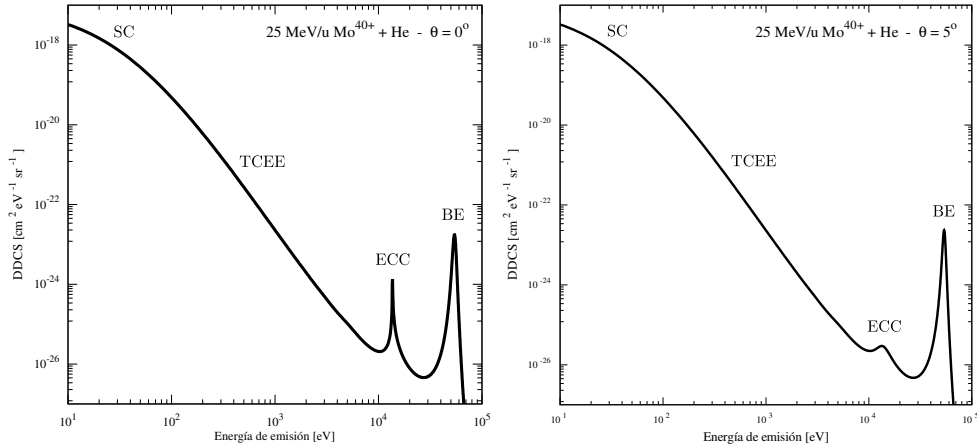


Figura 1.1: Espectros de emisión electrónica en un ángulo de 0° y 5° correspondientes al sistema de colisión de 25 MeV/u $\text{Mo}^{40+} + \text{He}$ que indican los distintos mecanismos de ionización que participan en cada región del espectro. De menor a mayor energía de emisión tenemos: colisiones blandas (SC), emisión electrónica de dos centros (TCEE), captura electrónica al continuo (ECC) y colisiones binarias (BE). Las gráficas se corresponden con resultados teóricos calculados con el modelo CDW-EIS siguiendo la idea de la Fig.(2.1) en [9].

1.1.2. Sección eficaz y probabilidad

En problemas de dispersión por un centro de fuerzas, básicamente la medida que predice la fracción de partículas de un haz incidente que interactuarán con un centro dispersor se denomina *sección eficaz total*, dado que puede ser entendida como el área transversal del haz incidente que atravesarán -por unidad de tiempo- aquellas partículas en cuestión. En una reacción de ionización por colisión, en cambio, ya se presume la interacción entre el proyectil que incide con cierta energía y un blanco; lo que se quiere conocer entonces es la probabilidad de que de dicha interacción resulte liberado un electrón. Como veremos luego, esto lo calcularemos integrando sobre la *amplitud de transición* del electrón de un estado ligado inicial a un estado final del continuo. Cuando calculamos la probabilidad de que el electrón sea emitido en un ángulo en particular y con una dada energía, nos referimos a una *sección eficaz doble diferencial*; y llamamos *sección eficaz simple diferencial* cuando contemplamos la dispersión en todas las direcciones pero a una dada energía emisión o bien una dirección en particular pero a toda energía emisión. Asimismo, también tenemos la *sección eficaz triple diferencial* cuando se analiza además al parámetro de impacto como variable, esto es, la distancia transversal entre el centro del blanco y la trayectoria original del proyectil. Así, vale decir que la sección eficaz total de una reacción de ionización simple se corresponde con la integración sobre toda la amplitud angular, sobre todas las energías de emisión y sobre todo parámetro de impacto.

1.1.3. Mecanismos de ionización

Debido a que los electrones emitidos de una dada colisión emergen dentro de todo un rango de energías diferentes, se piensa en distintos mecanismos por los que la ionización puede producirse, lo que ofrece una imagen física para explicar lo que se observa en los espectros para un dado sistema de colisión. Por ejemplo, en la Fig.(1.1) se observan las secciones eficaces doble diferencial para el sistema de colisión 25MeV/u $\text{Mo}^{40+} + \text{He}$ para ángulos de emisión de 0° y 5° respecto de la dirección del haz incidente [9]. La emisión de electrones de baja energía está dominada por las denominadas

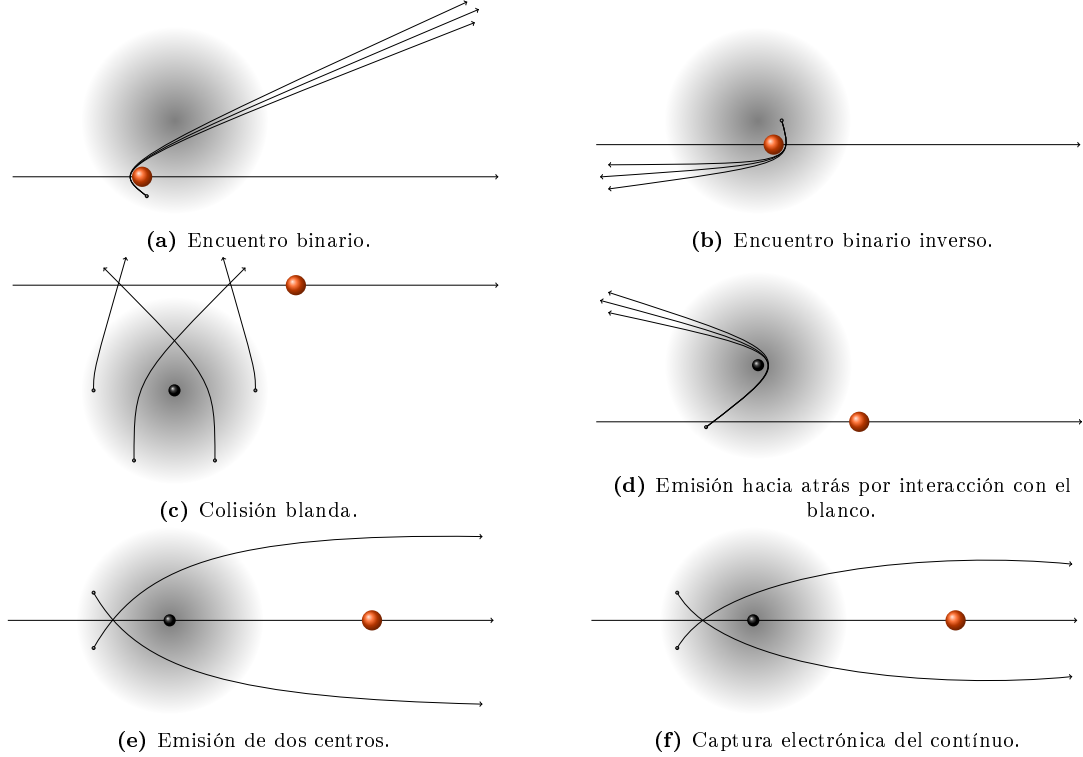


Figura 1.2: Representación replicada de la Fig.(2.3) de [10] para los mecanismos de emisión de electrones por colisiones entre iones pesados y átomos. Los esquemas (a-d) corresponden a procesos de emisión de un centro mientras que (d) y (e) representan emisiones de dos centros.

colisiones blandas o “soft collision” (SC). Por su parte, la emisión de electrones de alta energía se explican por colisiones de encuentro binario o “binary-encounter” (BE). Luego, a 5° vemos un pequeño pico que se acentúa a 0° debido a un fenómeno denominado captura electrónica al continuo o “electron capture to the continuum” (ECC) y, finalmente, el espectro central entre las estructuras debidas a SC y ECC encontramos el aporte debido a la emisión de electrones de dos centros o “two-center electron emission” (TCEE). Cabe destacar que este fenómeno abarca gran parte del espectro electrónico cuando se utilizan iones pesados de alta energía específica ($\gtrsim 25$ MeV/u) como proyectiles y fue originalmente incluido en el cálculo de secciones eficaces por modelos CDW.

A continuación se pretende hacer una breve descripción cualitativa de los mecanismos mencionados a fin de contar con una idea gráfica de los mismos. De todas formas, si a quien lee este trabajo le interesara profundizar acerca de estos mecanismos y los diversos modelos con que fueron estudiadas distintas regiones del espectro de ionización, puede entonces remitirse a [10] para mayor información.

Podemos clasificar a las interacciones involucradas de una colisión en base al concepto de *centros*, entendidos como tales a aquellos núcleos cuyo potencial sea considerado como una distorsión en la función de onda del electrón emitido, también llamado *electrón activo*. La Fig.(1.2) –replicada de [10]– ofrece una representación gráfica de los mecanismos de emisión de electrones junto con los centros que se suelen considerar.

En el límite de bajas energías de la Fig.(1.1) encontramos las colisiones blandas. En éstas el proyectil pasa relativamente lejos del blanco de manera que no transfiere gran momento a los electrones, sin embargo, como se esquematiza en la Fig.(1.2c), aquellos que resulten emitidos saldrán principalmente con un ángulo de 90° y luego serán dispersados por el campo del núcleo. Cabe destacar que a energías tan bajas –del orden de 10 eV– la longitud de onda de *de Broglie* resulta comparable con las

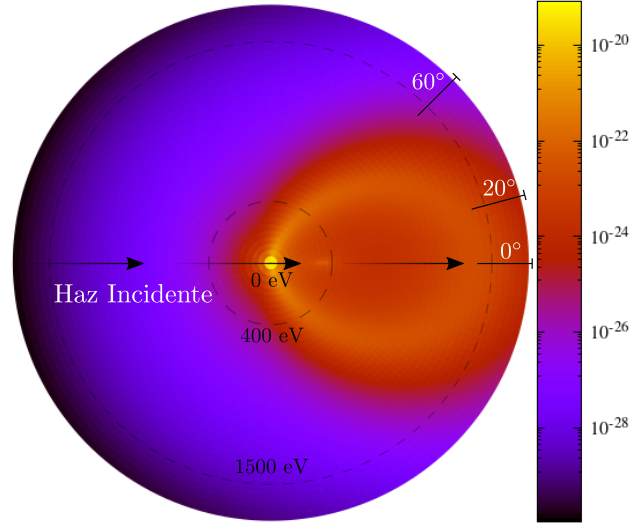


Figura 1.3: Vista superior de la superficie de emisión generada con las secciones eficaces doble diferencial para ionización simple de átomos de helio por impacto de protones a 700 keV/u. El sistema de coordenadas es polar con la energía de emisión en la variable radial en escala lineal y los colores dan cuenta de la magnitud de la DDCS en cada punto según la escala indicada en el gráfico.

dimensiones atómicas de modo que representaciones como las de la Fig.(1.2c) pierden validez frente a fenómenos ondulatorios.

A energías intermedias encontramos los fenómenos de emisión de dos centros donde tanto el campo residual del blanco como el del proyectil actúan como centros en la evolución del electrón activo. Estos han demostrado tener gran influencia en el cálculo de secciones eficaces doble diferencial a causa de incrementar el número de electrones dispersados hacia adelante (forward scattering) por la atracción que ejerce el proyectil sobre el electrón activo [8–10], representada en la Fig.(1.2e). Más aún, si el electrón es emitido en dirección paralela al haz y con velocidades similares a la del proyectil ocurre lo que denominamos captura electrónica al continuo (ECC), Fig.(1.2f). En efecto, la ECC produce un pico en la emisión a 0° que decae en magnitud rápidamente conforme aumenta el ángulo tal como se observa en la Fig.(1.1). El pico ECC, entonces, se ubica siempre en ángulos cercanos a 0° y a energías correspondientes a electrones con velocidades similares a la del proyectil.

Por último, a altas energías y ángulos de emisión delantera se observa otro pico en la Fig.1.1. Los electrones en este caso provienen de colisiones elásticas contra el proyectil, lo que se denomina por colisiones binarias. En efecto, mediante principios de conservación puede demostrarse que el pico BE se ubica a energías correspondientes a electrones de momento $k = 2v \cos \theta$, donde v es la velocidad de incidencia del proyectil y θ el ángulo de emisión. Este comportamiento angular del pico binario podemos observarlo claramente en la Fig.(1.3), donde a medida que el ángulo de emisión aumenta, el pico se va corriendo a energías más bajas hasta extinguirse a 90° . A ángulos de emisión hacia atrás, o “backscattering”, los electrones más energéticos son aquellos que luego de un encuentro binario con el proyectil, son deflectados fuertemente por el núcleo del blanco, como se representa en la Fig.(1.2d). Asimismo también puede pensarse que electrones ligados de gran velocidad respecto al proyectil ocurra lo que se denomina por “encuentro binario inverso” en el que el electrón activo es dispersado por el campo quasi-estático del proyectil, Fig.(1.2b).

A continuación haremos una introducción teórica a los modelos de onda distorsionada del continuo, presentando además las funciones de onda que se utilizan para describir el estado del continuo del electrón en el campo del proyectil en los canales iniciales y finales, es decir, antes y después de su emisión. Cabe destacar que en el canal de salida el electrón también se encuentra en un estado

del continuo del blanco, de esta manera el modelo CDW considera en pie de igualdad la interacción del electrón activo con el blanco y el proyectil, lo que le permite ser caracterizado como un modelo de dos centros.

1.2. Introducción Teórica

1.2.1. Idea preliminar

Estudiar el proceso de ionización simple por colisión implica describir la evolución de un electrón inicialmente ligado al blanco y posteriormente liberado debido a la perturbación del campo de un proyectil, es decir, se debe encontrar la probabilidad de transición del electrón desde un estado inicial $|\chi_i\rangle$, ligado, a un estado final del continuo $|\chi_f\rangle$. La amplitud de transición se encuentra dada por [7, 11]

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \chi_f^- | \left(H - i \frac{\partial}{\partial t} \right) | \chi_i^+ \rangle dt$$

donde H debe contemplar la influencia simultánea de los campos del blanco y del proyectil. Esto constituye esencialmente un problema de tres cuerpos, para blancos monoeléctricos; o más en caso de blancos multielectrónicos. Sin embargo, es bien sabido que un problema con más de dos cuerpos solo puede ser resuelto de forma aproximada, sin dejar de ser por ello un gran desafío físico a la hora de proponer modelos simples que describan de mejor modo la interacción.

Para abordar entonces el problema de la ionización se propone un método perturbativo. A saber, en el canal de entrada se considera el electrón en un estado ligado del blanco, $|\phi_i\rangle$, pero bajo la perturbación del campo del proyectil. Luego en el canal de salida, el electrón termina en un estado del continuo del blanco $|\phi_f\rangle$ y bajo la perturbación del proyectil. El efecto de las perturbaciones es el de *distorsionar*, mediante un factor, las funciones de onda correspondientes a autoestados del sistema sin perturbar con, por ejemplo, una función escalar. De este modo, las funciones de onda de dos centros de los estados inicial y final del electrón activo se escriben, respectivamente,

$$|\chi_{i,f}\rangle = |\psi_{i,f}\rangle \underbrace{|\mathcal{L}_{i,f}\rangle}_{\text{distorsión}}$$

donde

$$|\psi_{i,f}\rangle = \underbrace{|\phi_{i,f}\rangle}_{\text{estados del blanco}} \overbrace{e^{-i\varepsilon_{i,f}t}}^{\text{evolución temporal}}$$

Para las distorsiones $|\mathcal{L}_{i,f}\rangle$, debidas a las interacciones proyectil-electrón en los canales de entrada y salida, se pueden elegir, por ejemplo, fases eikonaes (§1.2.3) o funciones del continuo hidrogénico (§1.2.4). Utilizar funciones del continuo del centro perturbador como distorsiones en ambos canales constituye la denominada aproximación de onda distorsionada del continuo (Continuum Distorted Wave, CDW). En cambio, elegir en su lugar fases eikonaes en ambos canales da lugar a la aproximación eikonal simétrica (Symmetric Eikonal, SE). Ambas aproximaciones, por utilizar el mismo factor en la función de onda inicial y final, se dicen ser aproximaciones simétricas. Por otra parte, se tienen modelos no simétricos como la aproximación de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS), que, como su nombre indica, surge de la elección de una fase eikonal para el canal de entrada, utilizando luego una función del continuo hidrogénico como distorsión en el canal de salida.

Estos factores distorsivos $|\mathcal{L}_{i,f}\rangle$ son entonces estados de dispersión de electrones en presencia de un núcleo atómico, centrados, en este caso, en el proyectil. Por ello, a continuación, introduciremos

algunos aspectos generales de la dispersión de partículas por un potencial central para presentar luego las autofunciones que representarán al electrón activo en un campo de Coulomb, bajo una aproximación eikonal primero y como estado del continuo hidrogénico después.

1.2.2. Dispersión por un potencial central

Las funciones de onda $\psi(\mathbf{r})$ que describen las partículas que inciden y son dispersadas por un potencial se las conoce como *estados estacionarios de dispersión*. Esto se debe a que son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para autovalores de energía positivos $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$, a saber,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right) \psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

Por lo general, en los problemas de dispersión, las partículas interactúan bajo un potencial central $V(r)$. De este modo podemos describir al sistema desde su centro de masa, donde r es la distancia relativa entre partículas y μ su masa reducida.

A partir de consideraciones físicas podemos establecer las *condiciones asintóticas de contorno* que deberán satisfacer las soluciones de la Ec.(1.1) a grandes distancias del centro dispersor. Comenzando por el haz de partículas incidentes, mientras éstas se encuentran lejanas de la zona de influencia del potencial, son consideradas como ondas planas¹ e^{ikz} , siendo el eje z la dirección de incidencia. Luego, al interactuar con el potencial $V(r)$ ha de esperarse que parte de la onda resulte reflejada y otra sea transmitida. Esta última, continuando su trayectoria a lo largo de la dirección de incidencia, volverá a tener la forma asintótica de una onda plana e^{ikz} , conservando el k solo en caso de una colisión elástica. Por otro lado, en lo que respecta a la onda reflejada en una dirección \hat{r} cabe esperar que, si bien a grandes distancias también se comporte como una onda plana, la amplitud de ésta podría depender de la dirección angular (θ, φ) en que es dispersada –dispersión no isotrópica– y además debería estar multiplicada por un factor $1/r$ para que el flujo de probabilidad a través de una esfera centrada en $r = 0$ no dependa de r . En consecuencia, la forma asintótica de la solución de la Ec.(1.1) se corresponde con la suma de las ondas transmitida y dispersada

$$\psi(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + \underbrace{f(\theta, \varphi)}_{\text{amplitud de dispersión}} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.2)$$

Sin embargo, es importante destacar que para el potencial de Coulomb, donde $V(r) \sim 1/r$ las fases de las ondas transmitidas y reflejadas difieren en su límite asintótico con las de la Ec.(1.2). En efecto, solo para potenciales que decaigan más rápido que $1/r$ es que dicho límite vale. Volveremos a abordar este tema en la subsección §1.2.4 luego de presentar, a continuación, la aproximación eikonal.

1.2.3. Aproximación eikonal

La aproximación eikonal corresponde a un modelo semi-clásico en donde la función de onda del continuo de las partículas en interacción con un potencial central es tomada como una fase de la forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\frac{S(\mathbf{r})}{\hbar}} \quad (1.3)$$

¹La extensión espacial de las ondas planas puede confinarse mediante la formación de un paquete de ondas, sin pérdida de generalidad.

Con esta expresión, la corriente de densidad resulta $\mathbf{j} \propto \frac{\nabla S}{m}$ que en el caso de ondas planas resulta ser la velocidad de las partículas. Además reemplazando $\psi(\mathbf{r})$ en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo obtenemos,

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] e^{i\frac{S(\mathbf{r})}{\hbar}} = E e^{i\frac{S(\mathbf{r})}{\hbar}} \\ & -\frac{\hbar}{2m} \left[-\frac{1}{\hbar^2} e^{i\frac{S(\mathbf{r})}{\hbar}} (\nabla S(\mathbf{r}))^2 + \frac{i}{\hbar} e^{i\frac{S(\mathbf{r})}{\hbar}} \nabla^2 S(\mathbf{r}) \right] + (V(r) - E) e^{i\frac{S(\mathbf{r})}{\hbar}} = 0 \end{aligned}$$

donde considerando $\hbar|\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2$ llegamos a la ecuación de Hamilton-Jacobi para $S(\mathbf{r})$

$$\frac{1}{2m} (\nabla S(\mathbf{r}))^2 + V(r) = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

o sea

$$\frac{1}{\hbar} \nabla S(\mathbf{r}) = \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(r)} \quad (1.4)$$

De este modo, recordando que estamos en el rango de altas energías $E \gg |V|$, podemos tomar como nueva aproximación una trayectoria recta a lo largo del eje z debido a que las partículas no resultarían notoriamente dispersadas. A su vez, como éstas inciden desde $z \rightarrow -\infty$ paralelas al eje z , reescribimos la distancia r al centro dispersor en función del parámetro de impacto ρ como $r = \sqrt{\rho^2 + z'^2}$. Además,

$$\nabla S(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{\partial S(z)}{\partial z}$$

y entonces

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^z \frac{\partial S(z')}{\partial z'} dz' = \int_{-\infty}^z \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{\rho^2 + z'^2}) \right]^{1/2} dz' + \text{cte} \quad (1.5)$$

En esta expresión, las condiciones asintóticas de contorno se satisfacen si $S(z) = \hbar k z$ cuando $z \rightarrow -\infty$ debido a que en este límite las partículas incidentes han de ser ondas planas con $\mathbf{j} \propto \frac{\hbar k}{m} \hat{z}$. Además, la constante de integración del segundo miembro de la Ec.(1.5) debe ser tal que al derivar respecto a z recuperemos la expresión correspondiente a la Ec.(1.4). Por todo esto, la Ec.(1.5) resulta

$$\frac{S(z)}{\hbar} = kz + \int_{-\infty}^z \left[\sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{\rho^2 + z'^2})} - k \right] dz' \quad (1.6)$$

Por su parte, la condición $E \gg |V|$ permite aproximar la raíz del integrando de la Ec.(1.6) según $\sqrt{1-x^2} \simeq 1 - \frac{x^2}{2}$ para $|x| \ll 1$. De esta forma,

$$\frac{S(z)}{\hbar} = kz - \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V(\sqrt{\rho^2 + z'^2}) dz' \quad (1.7)$$

Finalmente, tomando la Ec.(1.7) como el argumento de la fase eikonal de la Ec.(1.3) obtenemos la función de onda

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz} \exp \left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V(\sqrt{\rho^2 + z'^2}) dz' \right] \quad (1.8)$$

1.2.4. Dispersión de Coulomb

Decaimiento $1/r$

Como adelantábamos al final de la sección §1.2.2, las condiciones asintóticas de contorno de la Ec.(1.2) no son válidas para los estados de dispersión de Coulomb. En efecto, este potencial logra distorsionar las funciones de onda aún a grandes distancias por lo que se dice ser un potencial de largo alcance. Esto puede verse, por ejemplo, proponiendo como solución de la parte radial R_l de la solución de la Ec.(1.1) en coordenadas esféricas, una fase eikonal de la forma

$$R_l = \frac{\chi_l}{r} = \frac{1}{r} A e^{\pm ikr} \exp \left[\int_a^r f(r') dr' \right]$$

con la condición de que $f(r)$ no dependa fuertemente de r para grandes distancias y donde a es una constante real.

Reemplazando en la ecuación radial

$$\frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \left[k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0 \quad \text{con} \quad U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)$$

obtenemos la relación

$$\frac{df(r)}{dr} + [f(r)]^2 \pm 2ikf(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \equiv W(r)$$

donde para grandes r , $f(r)$ tendrá el mismo decaimiento que $W(r)$. Por esto, considerando el exponente de nuestra fase eikonal vemos que solo recuperaremos la forma asintótica de la Ec.(1.2) para potenciales que decaigan más rápido que $1/r$. De otro modo, para el potencial de Coulomb $V(r) = -Z_1 Z_2 e^2 / r$ encontramos

$$\chi_l \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{\pm i[kr + \gamma \ln(r)]}$$

donde $\gamma = \frac{\mu}{\hbar^2 k} Z_1 Z_2 e^2$. Debido a la contribución logarítmica de r a la fase de la solución radial se tiene entonces que las soluciones al potencial de Coulomb nunca van a tender de forma asintótica a una onda plana; al menos en lo que respecta a la aproximación clásica de línea recta que acabamos de asumir al proponer una fase eikonal como solución.

A continuación resolveremos de manera exacta la Ec.(1.1) para un potencial de Coulomb ya que, como dijimos, serán las funciones de onda que describan al electrón ionizado. Además, veremos que su límite asintótico, para toda dirección angular, efectivamente difiere de la Ec.(1.2).

Soluciones del continuo

Considerando la interacción de Coulomb entre dos partículas cargadas 1 y 2, de masas m_1 y m_2 y carga $q_1 = Z_1 e$ y $q_2 = Z_2 e$, la Ec.(1.1) se puede reescribir como

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{2\gamma k}{r} \right] \psi(\mathbf{r}) = 0 \tag{1.9}$$

donde

$$\gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}, \quad v = \frac{\hbar k}{\mu} \quad \text{y} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Si reparamos en la simetría del problema, notamos que hay una dirección distintiva correspondiente al haz de partículas incidentes y, además, tenemos simetría azimutal debido a que el potencial

de Coulomb es central. Por este motivo, será conveniente resolver la ecuación de Schödinger, Ec.(1.9), en **coordenadas parabólicas** (ξ, η, ϕ) [12–14]. En función de las esféricas (r, θ, ϕ) se escriben

$$\begin{cases} \xi = r(1 - \cos \theta) & \xi \in [0, \infty] \\ \eta = r(1 + \cos \theta) & \eta \in [0, \infty] \\ \phi = \phi & \phi \in [0, 2\pi] \end{cases} \quad (1.10)$$

En este sistema de coordenadas hemos tomado como dirección destacada del espacio al eje z , de modo que aquellas superficies de ξ constante serán paraboloides de revolución en torno al eje z , todos con foco en el origen y con sus ramas abiertas en dirección $z > 0$. Por su parte, las superficies de η constante son similares a las anteriores pero con sus ramas abiertas en dirección $z < 0$. Finalmente, ϕ constante se corresponde con semiplanos que contienen al eje z .

El operador laplaciano en este sistema de referencia resulta

$$\nabla^2 = \frac{4}{\xi + \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\xi \eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

En principio se podría proponer una solución a la Ec.(1.9) de la forma $\psi(\mathbf{r}) = X(\xi)Z(\eta)\Phi(\phi)$, pero debido a la simetría azimutal del fenómeno dispersivo -arraigada de la misma simetría del potencial de Coulomb- podemos adelantar que la solución ψ no dependerá de la variable ϕ , es decir

$$\psi(\mathbf{r}) = X(\xi)Z(\eta) \quad (1.11)$$

Luego, podemos también notar que para grandes valores de z negativos esperamos que $\psi(\mathbf{r})$ se asemeje a una onda plana incidente aunque distorsionada, como vimos, por algún factor \mathcal{D}

$$\psi_i(\mathbf{r}) \sim e^{ikz} \mathcal{D} \quad \text{para } z \rightarrow -\infty \quad (1.12)$$

Dado que en coordenadas esféricas $z = r \cos \theta$, de la Ec.(1.10) vemos $\xi = r - z$ y $\eta = r + z$. Luego, la condición de la Ec.(1.12) toma la forma

$$\psi_i(\mathbf{r}) \sim e^{i\frac{k}{2}(\eta - \xi)} \mathcal{D}(\xi, \eta) \quad \text{para } \xi \rightarrow \infty \quad \text{o} \quad \eta \rightarrow -\infty \quad (1.13)$$

Por lo tanto, en lugar de la Ec.(1.11), tiene sentido proponer una solución más específica del tipo

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\frac{k}{2}(\eta - \xi)} \chi(\xi) \zeta(\eta) \quad (1.14)$$

Reemplazando entonces la Ec.(1.14) en la Ec.(1.9) obtenemos

$$\left\{ \frac{4}{\xi + \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] + \left(k^2 - \frac{4\gamma k}{\xi + \eta} \right) \right\} e^{i\frac{k}{2}(\eta - \xi)} \chi(\xi) \zeta(\eta) = 0$$

De la que se puede llegar a

$$\underbrace{\frac{1}{\chi(\xi)} \left[\xi \frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + (1 - ik\xi) \frac{\partial \chi}{\partial \xi} \right]}_{\text{no depende de } \eta} - \gamma k = - \underbrace{\frac{1}{\zeta(\eta)} \left[\eta \frac{\partial^2 \zeta}{\partial \eta^2} + (1 + ik\eta) \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \right]}_{\text{no depende de } \xi}$$

es decir, que podemos separar las variables ξ y η igualando cada miembro a una constante. De esta forma obtenemos dos ecuaciones diferenciales donde $\beta_1 + \beta_2 = -\gamma k$, esto es

$$\xi \frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + (1 - ik\xi) \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \beta_1 \chi(\xi) = 0 \quad (1.15a)$$

$$\eta \frac{\partial^2 \zeta}{\partial \eta^2} + (1 + ik\eta) \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} + \beta_2 \zeta(\xi) = 0 \quad (1.15b)$$

Ambas ecuaciones pueden escribirse en la forma de la ecuación Hipergeométrica Confluente

$$x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + (b - x) \frac{\partial f}{\partial x} - af = 0 \quad (1.16)$$

tomando, para la Ec.(1.15a),

$$x = ik\xi, \quad a = i\frac{\beta_1}{k}, \quad b = 1$$

y para la Ec.(1.15b)

$$x = -ik\eta, \quad a = -i\frac{\beta_2}{k}, \quad b = 1$$

La Ec.(1.16) para cuando b no es un entero tiene dos soluciones linealmente independientes [11] de la forma

$$f_1 = {}_1F_1[a, b, x] \quad (1.17a)$$

$$f_2 = x^{1-b} {}_1F_1[1 + a - b, 2 - b, x] \quad (1.17b)$$

donde ${}_1F_1[a, b, x]$ es la **función hipergeométrica confluente**, que se define como

$${}_1F_1[a, b, x] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b+n)} \frac{x^n}{n!} \quad (1.18)$$

Esta serie converge de manera uniforme y absoluta para todo valor de x [11], por lo que la función hipergeométrica confluente es univaluada y analítica en x . Además, asume valores finitos en el origen.

En nuestro caso, vemos de las Ec.(1.15) que $b = 1$, de manera que las dos soluciones de cada ecuación son idénticas. Luego, reemplazando por los valores correspondientes de a , b y x obtenemos las soluciones

$$f_\xi = A {}_1F_1\left[i\frac{\beta_1}{k}, 1, i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right] \quad (1.19a)$$

$$f_\eta = B {}_1F_1\left[-i\frac{\beta_2}{k}, 1, -i(kr + \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right] \quad (1.19b)$$

Para asintóticamente representar una onda incidente y una onda dispersada saliente debemos quedarnos con la solución de la Ec.(1.19a), que se corresponde con la elección de $\beta_1 = -\gamma k$ y $\beta_2 = 0$, o sea

$$\psi(\mathbf{r}) = A e^{ikz} {}_1F_1[-i\gamma, 1, i(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})] \quad (1.20)$$

donde $A = \Gamma(1 + i\gamma)e^{\pi\alpha/2}$ es una constante de Normalización.

En cambio, la elección de $\beta_1 = 0$ y $\beta_2 = -\gamma k$ en la Ec.(1.19b) da lugar a una onda dispersada entrante

$$\psi(\mathbf{r}) = B e^{ikz} {}_1F_1[i\gamma, 1, -i(kr + \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})] \quad (1.21)$$

con $B = \Gamma(1 - i\gamma)e^{\pi\alpha/2}$.

En el caso de la dispersión de partículas por un potencial de Coulomb nos interesa la solución de la Ec.(1.20) cuyo límite asintótico resulta [11]

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) \sim & e^{i[kz + \gamma \ln k(r-z)]} \left[1 + \frac{\gamma^2}{ik(r-z)} + \dots \right] \\ & - \frac{\gamma}{k(r-z)} \frac{\Gamma(1 + i\gamma)}{\Gamma(1 - i\gamma)} e^{i[kz - \gamma \ln k(r-z)]} \left[1 + \frac{(1 + i\gamma)^2}{ik(r-z)} + \dots \right] \end{aligned}$$

donde se han omitido los términos de mayor orden en $(r - z)^{-1}$. Luego, si nos quedamos solo con los términos de orden cero llegamos a una expresión similar a la de la Ec.(1.2), pero no igual debido al lento decaimiento del potencial de Coulomb. A saber,

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{i[kz + \gamma \ln k(r-z)]} + f(\theta) \frac{e^{i[kz - \gamma \ln k(r-z)]}}{r} \quad (1.22)$$

donde $z = r \cos \theta$ permite escribir

$$f(\theta) = -\frac{\gamma \Gamma(1 + i\gamma)}{k \Gamma(1 - i\gamma)} \frac{1}{2 \operatorname{sen}^2(\theta/2)}$$

Lo fascinante de esta amplitud de dispersión es que nos lleva a la misma sección eficaz de dispersión que fuera calculada clásicamente por Rutherford, o sea

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \operatorname{sen}^{-4}(\theta/2)$$

1.2.5. Modelo de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS)

Como adelantábamos en la subsección §1.2.5, el modelo de onda distorsionada es una aproximación al problema de tres (o más) cuerpos que constituye, en nuestro caso, el estudio de la emisión de un electrón bajo la influencia simultánea del campo del blanco y del proyectil. En general, además de las interacciones del electrón activo con el núcleo del blanco y con el del proyectil, el hamiltoneano de un sistema de colisión también considera la interacción entre los núcleos y la eventual presencia de otros electrones que pueda haber ligados al blanco e incluso también al proyectil. Cada uno de estos elementos complejizan el problema, de modo que en las próximas secciones vamos a ir estudiándolos a través de diversas aproximaciones cada vez más complejas.

En efecto, si $\Psi_{i,f}$ fueran soluciones exactas para el sistema de colisión, entonces

$$\left(H - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_{i,f} = 0 \quad (1.23)$$

pero bajo el modelo CDW-EIS vamos a buscar expresiones analíticas $X_{i,f}$ que se aproximen a las soluciones $\Psi_{i,f}$. Frente a esto, hay algunas consideraciones generales que podemos realizar. Por un lado, con respecto a la interacción blanco-proyectil se asume que la deflexión de este último respecto de su trayectoria original (concepción semi-clásica) es muy pequeña, de modo que se la aproxima por una trayectoria recta. Esto permite incluir la evolución del proyectil en la función de onda del sistema mediante la multiplicación de una fase eikonal. A saber, siendo R la distancia relativa entre los núcleos, $V_s(R)$ el potencial de interacción y si $t=0$ se corresponde con el instante en que esta distancia R es mínima, entonces

$$\begin{aligned} X_i &= \chi_i(\mathbf{r}, t) \exp \left[-i \int_{-\infty}^t V_s(R) dt' \right] \\ X_f &= \chi_f(\mathbf{r}, t) \exp \left[+i \int_t^{+\infty} V_s(R) dt' \right] \end{aligned} \quad \text{donde} \quad \begin{aligned} \chi_i(\mathbf{r}, t) &= \psi_i(\mathbf{x}, t) \mathcal{L}_i(\mathbf{s}) \\ \chi_f(\mathbf{r}, t) &= \psi_f(\mathbf{x}, t) \mathcal{L}_f(\mathbf{s}) \end{aligned} \quad (1.24)$$

con

$$\begin{aligned} \psi_i(\mathbf{x}, t) &= \phi_i(\mathbf{x}) e^{-i\varepsilon_i t} \\ \psi_f(\mathbf{x}, t) &= \phi_f(\mathbf{x}) e^{-i\varepsilon_f t} \end{aligned}$$

siendo $\phi_i(\mathbf{x})$ un estado ligado, de energía ε_i , del sistema electrón activo-blanco y $\phi_f(\mathbf{x})$ uno de sus estados del continuo, de energía ε_f . Además, en CDW-EIS elegimos una fase eikonal como perturbación $\mathcal{L}_i(\mathbf{s})$ en el canal de entrada

$$\mathcal{L}_i(\mathbf{s}) = \exp[-i\nu \ln(vs + \vec{v} \cdot \vec{s})] \quad (1.25)$$

y un factor del continuo como perturbación $\mathcal{L}_f(\mathbf{s})$ en el canal de salida

$$\mathcal{L}_f(\mathbf{s}) = N^*(\xi) {}_1F_1[-i\xi, 1, -i(ps + \vec{p} \cdot \vec{s})] \quad (1.26)$$

Utilizando entonces las funciones de onda distorsionadas $X_{i,f}$ para resolver la Ec.(1.23) de un sistema monoeléctrico bajo la aproximación de trayectoria recta, encontramos nuevos términos no nulos asociados a la perturbación $\mathcal{L}_{i,f}$ elegida en los canales de entrada y salida.

$$\left(H - i\frac{\partial}{\partial t}\right) X_{i,f} = -W_{i,f}\chi_{i,f} \quad (1.27)$$

De esta manera, definimos los denominados potenciales perturbativos o perturbadores $W_{i,f}$ que resultan, para el canal de entrada

$$W_i\chi_i = \psi_i(\vec{x}, t) \left[\frac{1}{2}\nabla_{\vec{s}}^2\mathcal{L}_i(\vec{s}) + \nabla_{\vec{x}}\ln\phi_i(\vec{x}) \cdot \nabla_{\vec{s}}\mathcal{L}_i(\vec{s}) \right] \quad (1.28)$$

y para el canal de salida

$$W_f\chi_f = \psi_f(\vec{x}, t) [\nabla_{\vec{x}}\ln\phi_f(\vec{x}) \cdot \nabla_{\vec{s}}\mathcal{L}_f(\vec{s})] \quad (1.29)$$

Por otro lado, en sistemas multielectrónicos, se considera que los electrones que pueda tener el blanco (o el proyectil) no participan del proceso de ionización de modo que sus estados iniciales y finales son los mismos. En otras palabras, éstos electrones, denominados electrones pasivos, se mantienen congelados en sus respectivos orbitales y sus coordenadas no aparecen en la función de onda del sistema. No obstante, como veremos luego, los electrones pasivos han demostrado tener un importante rol sobre la evolución del electrón activo debido a que apantallan la carga nuclear. En efecto, surgen nuevos términos perturbativos que habrá que incluir en el cálculo de la amplitud de transición

$$A_{if} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \chi_f^- | \left(H - i\frac{\partial}{\partial t} \right) | \chi_i^+ \rangle dt \quad (1.30)$$

Luego, el módulo al cuadrado de la amplitud de transición nos dará información sobre la *probabilidad de transición* en función del parámetro de impacto ρ , sobre el cual deberemos de integrar.

Por otro lado, de acuerdo con la simetría de inversión temporal, la probabilidad de que el electrón activo pase del estado inicial $|\chi_i\rangle$ al estado final $|\chi_f\rangle$ debe ser idéntica a que el electrón transicione en el orden inverso, esto es desde el estado final hacia el inicial. A continuación exploraremos brevemente la simetría de inversión temporal de la ecuación de Schrödinger y cómo esta se manifiesta en la amplitud de dispersión permitiéndonos definir las denominadas versiones *prior* y *post* de tal amplitud. No obstante, a lo largo de este trabajo nos enfocaremos en la versión prior del modelo CDW-EIS porque en casos de átomos multielectrónicos, al actuar los perturbadores sobre buenas aproximaciones del estado ligado se logra incluir el efecto de los electrones pasivos del blanco.

Simetría de inversión temporal en la amplitud de dispersión

Si $\Psi(\vec{r}, t)$ es solución de la ecuación de Schrödinger luego $\Psi^*(\vec{r}, -t)$ también. En efecto,

$$\begin{aligned} H\Psi(\vec{r}, t) &= i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \\ [H\Psi(\vec{r}, t)]^* &= \left[i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \right]^* \\ H\Psi^*(\vec{r}, t) &= -i\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\vec{r}, t) \\ H\Psi^*(\vec{r}, -t) &= i\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\vec{r}, -t) \quad t \rightarrow -t \end{aligned}$$

O sea que $\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi^*(\vec{r}, -t)$ cuando $t \rightarrow -t$, por lo que las predicciones físicas solo cambian en tanto al orden temporal de los sucesos y no en la cualidad de los mismos.

Luego, si la Ec.(1.30) representa la probabilidad de transición del estado inicial al final, para calcular la transición inversa debemos calcular $\langle \Psi_i | (H - i\frac{\partial}{\partial t}) | \Psi_f \rangle$ pero bajo el cambio $t \rightarrow -t$ para que tenga sentido dentro de nuestro problema. De esta manera,

$$\text{si } |\varphi\rangle = (H - i\frac{\partial}{\partial t}) | \Psi_f \rangle \xrightarrow{t \rightarrow -t} (H + i\frac{\partial}{\partial t}) | \Psi_f \rangle^* = |\varphi\rangle^* = \langle \Psi_f | (H - i\frac{\partial}{\partial t})^\dagger = \langle \varphi |$$

luego

$$\langle \Psi_i | \varphi \rangle \xrightarrow{t \rightarrow -t} \langle \varphi | \Psi_i \rangle = \langle \Psi_f | (H - i\frac{\partial}{\partial t})^\dagger | \Psi_i \rangle$$

Entonces, si definimos como versión *prior* de la amplitud de dispersión a la probabilidad de transición del electrón activo desde el estado inicial al final como

$$A_{if}^+ = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \Psi_f | \left[\left(H - i\frac{\partial}{\partial t} \right) | \Psi_i \rangle \right] dt \quad (1.31)$$

luego, la versión *post* de la amplitud de dispersión, relacionada con la inversión temporal del problema, se define como

$$A_{if}^- = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\langle \Psi_f | \left(H - i\frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right] | \Psi_i \rangle dt \quad (1.32)$$

De esta forma, definimos las versiones *prior* y *post* de las amplitudes de dispersión y argumentamos sobre su necesaria equivalencia como consecuencia de la simetría de inversión temporal de la ecuación de Schrödinger.

Capítulo 2

Teoría

2.1. Projectiles desnudos

2.1.1. Blancos atómicos monoelectrónicos

A fin de ofrecer una clara presentación del cálculo de secciones eficaces para la ionización simple en diferentes sistemas de colisión, vamos, inicialmente, a despojar a éste de toda complejidad ulterior tratando el sistema más simple: la colisión de un proyectil desnudo sobre un blanco atómico con un solo electrón, el activo.

Entonces, dado un proyectil de carga Z_P y velocidad \vec{v} incidiendo sobre un blanco (target), a distancia R , de carga atómica Z_T , y siendo \vec{x} el vector posición del electrón respecto del blanco y \vec{s} aquel referido al proyectil, Fig.(2.1), el hamiltoneano electrónico del sistema en cuestión es

$$H = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 - \frac{Z_T}{x} - \frac{Z_P}{s} + \frac{Z_P Z_T}{R} \quad (2.1)$$

Luego, bajo la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto, la posición relativa internuclear \vec{R} puede descomponerse en $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$, donde $t = 0$ se corresponde con el instante de menor distancia entre ambos núcleos. Además, como la dispersión del proyectil o el desplazamiento del blanco debido a la colisión (recoil) pueden despreciarse, se tiene que tanto la masa del blanco como la del proyectil pueden no ser tenidas en cuenta en los cálculos. Más aún, es el hecho de que la masa del electrón sea 1800 veces menor que la del protón y neutrón el que le da una importancia casi exclusiva a la dinámica del electrón.

En lo que respecta al sistema de referencia, en lugar de tomar como coordenadas generalizadas a $\{\vec{r}, t\}$ tomaremos el conjunto de coordenadas no ortogonales $\{\vec{x}, \vec{s}, t\}$. Esta elección se debe a que facilita la inclusión de las distorsiones a los estados del blanco, otorgando además una clara visualización del sistema. Por otro lado, el origen de este sistema de referencia lo estableceremos en el núcleo del blanco ya que esto posibilita una comparación más directa con los datos experimentales. Finalmente, el sistema de referencia queda como el de la Fig.(2.1),

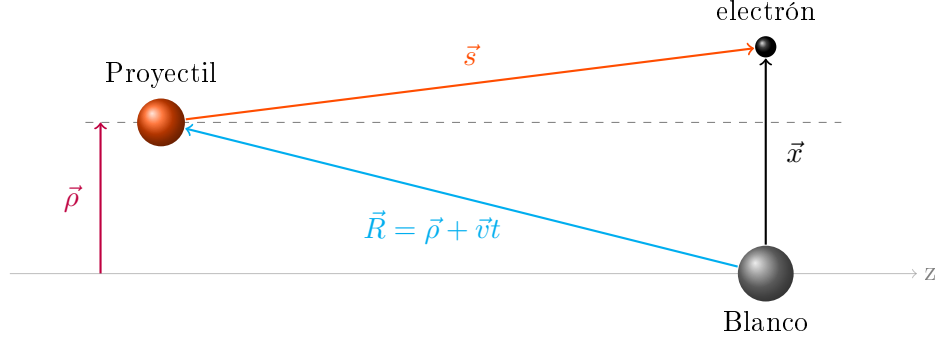


Figura 2.1: Sistema de referencia centrado en el blanco.

donde $\vec{r} \equiv \vec{x}$ y $\vec{s} = \vec{x} - \vec{R}$. Además, (como antes) tomamos al eje z paralelo a la velocidad del proyectil.

Bajo este sistema, el operador momento lineal del electrón y la derivada temporal de la ecuación de Schrödinger quedan, respectivamente

$$-\frac{1}{2}\nabla_r^2 = -\frac{1}{2}\nabla_x^2 - \nabla_x \cdot \nabla_s - \frac{1}{2}\nabla_s^2 \quad (2.2)$$

$$-i\frac{\partial}{\partial t}\Big|_r = -i\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{x,s} + i\vec{v} \cdot \nabla_s \quad (2.3)$$

de modo que la Ec.(1.23) resulta

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_x^2 - \nabla_x \cdot \nabla_s - \frac{1}{2}\nabla_s^2 - i\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{x,s} + i\vec{v} \cdot \nabla_s - \frac{Z_T}{x} - \frac{Z_P}{s} + \frac{Z_P Z_T}{R} \right) \Psi_{i,f} = 0 \quad (2.4)$$

Ahora, en vista de calcular la amplitud de transición en su versión prior, Ec.(1.31), bajo el modelo CDW-EIS reemplazamos en la Ec.(2.4) la solución exacta $\Psi_i(\vec{x}, \vec{s}, t)$ por su aproximación $X_i(\vec{x}, \vec{s}, t)$ de la Ec.(1.24), donde $V_s(R)$ es la interacción de coulomb entre ambos núcleos. Además, la perturbación inicial se corresponderá con la fase eikonal de la Ec.(1.25).

Haciendo los correspondientes reemplazos,

$$\begin{aligned} \left(H - i\frac{\partial}{\partial t}\Big|_x \right) \psi_i(\vec{x}, t) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) &= -\psi_i(\vec{x}, t) \left(\frac{1}{2}\nabla_s^2 + \nabla_x \ln(\phi_i) \cdot \nabla_s \right) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \\ &= -W_i^{EIS} \chi_i^+(\vec{x}, \vec{s}, t) \end{aligned} \quad (2.5)$$

encontramos el perturbador del canal inicial W_i de la Ec.(1.28). Para ello, hemos usado

$$\left(\frac{Z_P Z_T}{R} - i\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{x,s} \right) \exp\left[-i \int_{-\infty}^t V_s(R) dt' \right] = 0 \quad (2.6a)$$

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_x^2 - \frac{Z_T}{x} - i\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{x,s} \right) \psi_i(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.6b)$$

$$\left(-\frac{Z_P}{s} + i\vec{v} \cdot \nabla_s \right) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) = 0 \quad (2.6c)$$

Entonces, la versión prior de la amplitud de transición resulta

$$A_{if} = \exp\left[-i \int_{-\infty}^{+\infty} V_s(R) dt' \right] \times \underbrace{(-i) \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \chi_f^- | \left[\left(H - i\frac{\partial}{\partial t}\Big|_x \right) | \chi_i^+ \rangle \right] dt}_{a_{if}} \quad (2.7)$$

En esta expresión podemos notar claramente cómo se separan las fases eikoniales referidas al movimiento relativo de los núcleos de las funciones de onda distorsionadas del electrón activo. De esta manera, como el potencial V_s es Real, el módulo al cuadrado del primer factor vale uno. Entonces, como las secciones eficaces doble diferenciales dependen del módulo cuadrado de la amplitud, no van a depender del potencial internuclear. Por lo tanto, la amplitud de transición dependerá de la magnitud a_{if} que a su vez, dada una velocidad de impacto v , dependerá solamente del parámetro de impacto ρ debido a que $\vec{s} = \vec{x} - \vec{R}$ y $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$. Dicho esto, nos referiremos por amplitud de transición tanto a las cantidades $A_{if}(\rho)$ como a $a_{if}(\rho)$; esta última se expresa

$$\begin{aligned} a_{if}(\rho) &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \chi_f | [-W_i | \chi_i] \rangle dt \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} \int d\vec{r} \psi_f^*(\vec{x}, t) \mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \left[-\psi_i(\vec{x}, t) \left(\frac{1}{2} \nabla_s^2 + \nabla_x \ln(\phi_i) \cdot \nabla_s \right) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right] dt \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\Delta\varepsilon_{i,f}t} \int d\vec{r} \phi_f^*(\vec{x}) \mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \left[-\phi_i(\vec{x}) \left(\frac{1}{2} \nabla_s^2 + \nabla_x \ln(\phi_i) \cdot \nabla_s \right) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right] dt \end{aligned}$$

o sea

$$a_{if}(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\Delta\varepsilon_{i,f}t} \int d\vec{r} F(\vec{x}, \vec{s}) dt \quad (2.8)$$

con

$$F(\vec{x}, \vec{s}) = \left(-\phi_f^*(\vec{x}) \nabla_x \phi_i(\vec{x}) \right) \cdot \left(\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \nabla_s \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right) + \left(-\phi_f^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}) \right) \left(\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \frac{1}{2} \nabla_s^2 \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right) \quad (2.9)$$

A continuación mostraremos el cálculo de la Ec.(2.8) mediante el método de la Transformada de Fourier, presentando sus ventajas e interpretaciones físicas.

Bajo este método, escribiremos la función $F(\vec{x}, \vec{s})$ como la antitransformada de su transformada de Fourier $\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q})$. Por ello, para comenzar, será conveniente definir las siguientes funciones sugeridas por la Ec.(2.9):

$$\vec{f}^a(\vec{x}) = -\phi_f^*(\vec{x}) \nabla_x \phi_i(\vec{x}) \quad (2.10a)$$

$$\vec{g}^a(\vec{s}) = \mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \nabla_s \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \quad (2.10b)$$

$$f^b(\vec{x}) = -\phi_f^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}) \quad (2.10c)$$

$$g^b(\vec{s}) = \mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \frac{1}{2} \nabla_s^2 \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \quad (2.10d)$$

de manera que $F(\vec{x}, \vec{s})$ se escribe

$$F(\vec{x}, \vec{s}) = \vec{f}^a(\vec{x}) \cdot \vec{g}^a(\vec{s}) + f^b(\vec{x}) g^b(\vec{s}) \quad (2.11)$$

Luego, su transformada de Fourier resulta

$$\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{x} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s}} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}} F(\vec{x}, \vec{s}) \quad (2.12)$$

y su antitransformada es

$$F(\vec{x}, \vec{s}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{K} \int d\vec{Q} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{s}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{x}} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \quad (2.13)$$

Una de las principales ventajas que se desprenden de la utilización de éste método es que de la Ec.(2.9) se obtiene que

$$\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) = \tilde{f}^a(\vec{K}) \cdot \tilde{g}^a(\vec{Q}) + \tilde{f}^b(\vec{K}) \tilde{g}^b(\vec{Q}) \quad (2.14)$$

donde el cálculo de las transformadas de Fourier de las funciones \vec{f}^a , \vec{g}^a , f^b y g^b se puede obtener de un conjunto de integrales ya resueltas denominadas Integrales de Nordsieck [15].

Hecha esta observación, procedemos reemplazando la Ec.(2.13) en la Ec.(2.8) y considerando además que $\vec{s} = \vec{x} - \vec{R}$. De esta forma

$$\begin{aligned} a_{if}(\rho) &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\Delta\varepsilon_{i,f}t} \left[\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{K} \int d\vec{Q} \left(\underbrace{\int d\vec{x} e^{i(\vec{K}+\vec{Q})\cdot\vec{x}}}_{\delta(\vec{K}+\vec{Q})} \right) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{R}} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \right] dt \\ &= \frac{-i}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[e^{i\Delta\varepsilon_{i,f}t} \int d\vec{K} e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \Big|_{\vec{Q}=-\vec{K}} \right] dt \end{aligned}$$

Luego, si descomponemos al vector \vec{K} en una componente \vec{K}_v colineal con la velocidad de impacto y en otra componente \vec{K}_\perp perpendicular a dicha dirección obtenemos

$$\vec{K} = \vec{K}_\perp + K_v \hat{v}$$

$$d\vec{K} = K_\perp d\varphi dK_\perp dK_v$$

Además

$$\vec{K} \cdot \vec{R} = \vec{K}_\perp \cdot \vec{\rho} + K_v v t$$

entonces

$$\begin{aligned} a_{if}(\rho) &= \frac{-i}{(2\pi)^3} \int d\vec{K}_\perp dK_v \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(K_v v + \Delta\varepsilon_{i,f})t} dt}_{\delta(K_v v + \Delta\varepsilon_{i,f})} \right] e^{i\vec{K}_\perp \cdot \vec{\rho}} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \Big|_{\vec{Q}=-\vec{K}} \\ a_{if}(\rho) &= \frac{-i}{(2\pi)^3} \int d\vec{K}_\perp \frac{1}{v} e^{i\vec{K}_\perp \cdot \vec{\rho}} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \Big|_{\substack{\vec{Q}=-\vec{K} \\ K_v = -\Delta\varepsilon/v}} \end{aligned}$$

Finalmente, llegamos a una expresión para la amplitud de transición con dependencia explícita del parámetro de impacto y encontramos que solo uno de los dos vectores del espacio recíproco es independiente. Dicho vector tiene fijada su componente paralela a la velocidad de impacto pero no así su componente perpendicular. En efecto, se debe integrar sobre todos los vectores \vec{K}_\perp cuyo módulo tiene unidades de momento. Relacionamos esta componente con el *momento transversal transferido* $\vec{\eta}$ y llamamos

$$\boxed{R(\vec{\eta}) = \frac{i}{v(2\pi)^2} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \Big|_{\substack{\vec{Q}=-\vec{K} \\ K_v = -\Delta\varepsilon/v}}} \quad (2.15)$$

Así, tomando $\vec{K}_\perp = -\vec{\eta}$ nos queda $d\vec{K}_\perp = -d\vec{\eta}$ y entonces

$$a_{if}(\vec{\rho}) = \frac{1}{2\pi} \int d\vec{\eta} e^{-i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} R(\vec{\eta}) \quad (2.16a)$$

$$R(\vec{\eta}) = \frac{1}{2\pi} \int d\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} a_{if}(\vec{\rho}) \quad (2.16b)$$

De las Ecs.(2.16) obtenemos un par de transformadas de Fourier que relacionan a la amplitud de transición en función del parámetro de impacto $a_{if}(\vec{\rho})$ del espacio directo con la amplitud de transición en función del momento transferido $R_{if}(\vec{\eta})$ del espacio de los momentos.

Por otro lado, dado que $a_{if}(\vec{\rho})$ representa la amplitud de transición, para un valor fijo de ρ , del electrón desde un estado inicial ligado a un estado final de momento \vec{k} del continuo, encontramos la sección eficaz doble diferencial $\sigma(k, \theta_k)$ respecto a \vec{k} integrando la probabilidad de transición sobre el parámetro de impacto [11]. Esto es,

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \int d\vec{\rho} |a_{if}(\vec{\rho})|^2$$

Luego, por la relación de Parseval se satisface

$$\int d\vec{\rho} |a_{if}(\vec{\rho})|^2 = \int d\vec{\eta} |R_{if}(\vec{\eta})|^2 \quad (2.17)$$

de modo que

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \int d\vec{\eta} |R_{if}(\vec{\eta})|^2$$

Finalmente, si notamos que $d\mathbf{k} = k^2 dk d\Omega$ (siendo Ω el ángulo sólido) y que la energía $E_k = \frac{1}{2}k^2$, obtenemos la sección eficaz doble diferencial para ionización en función de la energía y ángulo del electrón emitido $\sigma(E_k, \theta_k)$. A saber,

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E_k \partial \Omega} = k \int d\vec{\eta} |R_{if}(\vec{\eta})|^2 \quad (2.18)$$

donde además $d\vec{\eta} = \eta d\eta d\varphi$, con $\eta \in [0, +\infty]$ y $\varphi \in [0, 2\pi]$.

Mediante ulteriores integraciones de la Ec.(2.18) sobre la energía o el ángulo de emisión es posible obtener la sección eficaz simple diferencial en función del ángulo o de la energía, respectivamente, del electrón emitido. O sea,

$$\sigma(\theta_k) = \int dE_k \sigma(E_k, \theta_k) \quad (2.19a)$$

$$\sigma(E_k) = \int d\Omega \sigma(E_k, \theta_k) \quad (2.19b)$$

En efecto, si vemos la Fig.(2.2) es posible ver la contribución en la sección eficaz simple diferencial (SDCS) que hace la integración sobre las secciones eficaces doble diferencial (DDCS), cuyas curvas se muestran para ciertos ángulos fijos de emisión. En particular es notable la caída abrupta a energías mayores a las correspondientes al pico binario.

Por último, integrando la Ec.(2.19a) en el ángulo sólido o integrando la Ec.(2.19b) en la energía se obtiene la sección eficaz total del proceso de ionización simple σ :

$$\sigma = \int d\Omega \sigma(\theta_k) = \int dE_k \sigma(E_k) \quad (2.20)$$

Habiendo presentado el método general para calcular secciones eficaces de ionización simple bajo el modelo CDW-EIS, prosigamos ahora con su aplicación en un sistema relativamente simple como es la colisión de un protón sobre un átomo de hidrógeno.

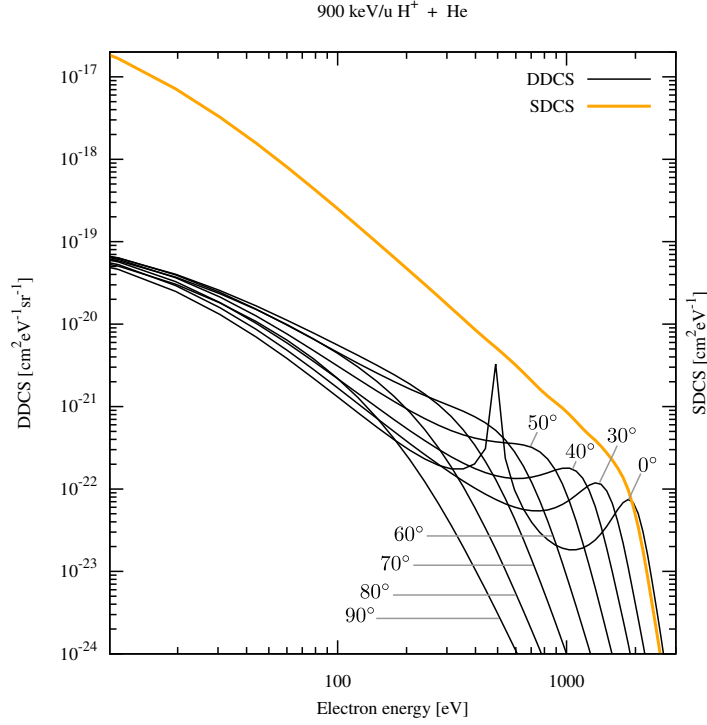


Figura 2.2: Secciones eficaces doble diferencial y simple diferencial en función de la energía de emisión, para el sistema $900 \text{ keV/u H}^+ + \text{He}$, donde se muestra la contribución a la SDCS por parte de la integración de las DDCS, cuyas curvas se muestran para ciertos ángulos fijos de emisión. La idea de esta gráfica surge de la Fig.(2.4) de [10].

Protón sobre Hidrógeno

El estudio de la ionización del átomo de hidrógeno por el impacto de protones fue fundamental para la validación y comprensión de los modelos teóricos aplicados al cálculo de ionización simple. Esto se debe a que dicho sistema ofrece comparaciones más directas contra los datos experimentales sin tener que lidiar, por ejemplo, con aproximaciones adicionales para la descripción de los estados del blanco [6].

La ecuación de Schrödinger para este sistema viene dada por la Ec.(2.4) con $Z_T = Z_P = 1$. Luego, las funciones de onda, energías y distorsiones (CDW-EIS) de los canales iniciales y finales son, en unidades atómicas,

	Inicial	Final
$\phi(\vec{x})$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-x}$	$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}N^*(\lambda)_1F_1[-i\lambda, 1, -i(kx + \vec{k}\cdot\vec{x})]$
ε	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}k^2$
$\mathcal{L}(\vec{s})$	$e^{-i\nu \ln(vs + \vec{v}\cdot\vec{s})}$	$N^*(\xi)_1F_1[-i\xi, 1, -i(ps + \vec{p}\cdot\vec{s})]$

Tabla 2.1: Estados, energías y distorsiones correspondientes a las funciones de onda distorsionadas EIS para el sistema de colisión $H^+ + H$.

donde

$$\lambda = \frac{Z_T}{k}, \quad \nu = \frac{Z_P}{v}, \quad \xi = \frac{Z_P}{p}, \quad \vec{p} = \vec{k} - \vec{v}$$

$$N(a) = e^{\frac{\pi a}{2}} \Gamma(1 - ia)$$

Recordemos que la sección eficaz doble diferencial está dada por la Ec.(2.18),

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E_k \partial \Omega} = k \int d\vec{\eta} |R_{if}(\vec{\eta})|^2$$

donde la amplitud de transición en función del momento transferido se corresponde con la Ec.(2.15)

$$R(\vec{\eta}) = \frac{i}{v(2\pi)^2} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \Big|_{\substack{\vec{Q} = -\vec{K} \\ K_v = -\Delta\varepsilon/v}}$$

Como adelantábamos antes, resta ahora calcular la función $\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q})$ dada por la Ec.(2.14)

$$\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) = \tilde{f}^a(\vec{K}) \cdot \tilde{g}^a(\vec{Q}) + \tilde{f}^b(\vec{K}) \tilde{g}^b(\vec{Q})$$

donde las funciones \tilde{f}^a , \tilde{g}^a , \tilde{f}^b y \tilde{g}^b son, respectivamente, las transformadas de Fourier de las funciones dadas por las Ec.(2.10). A continuación mostramos en resumidas cuentas el cálculo de dichas transformadas que se corresponden con integrales de tipo Nordsieck y que se encuentran resueltas por Gravielle y Miraglia (1992) en [15].

$$\begin{aligned} \tilde{f}^a(\vec{K}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{x} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}} f^a(\vec{x}) \\ &= \frac{N(\lambda)}{\sqrt{\pi}(2\pi)^3} \int d\vec{x} e^{-i(\vec{K}+\vec{k})\cdot\vec{x}-x} {}_1F_1[i\lambda, 1, i(kx + \vec{k}\cdot\vec{x})] \hat{x} \end{aligned}$$

donde la integral equivale a

$$\mathbb{K}_{-1} = 2\pi i \frac{(1-G)^{-i\lambda-1}}{\alpha^2} \left[i\lambda\vec{k} - (1 + (i\lambda - 1)G)(\vec{K} + \vec{k}) \right] \quad (2.21)$$

con

$$\alpha = \frac{1}{2}(z^2 + q^2), \quad G = \frac{\vec{k}\cdot\vec{q} + iz\vec{k}}{\alpha} \quad \text{donde} \quad \vec{q} = -(\vec{K} + \vec{k}) \quad \text{y} \quad z = 1 \quad (2.22)$$

Luego

$$\begin{aligned} \tilde{f}^b(\vec{K}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{x} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}} f^b(\vec{x}) \\ &= \frac{-N(\lambda)}{\sqrt{\pi}(2\pi)^3} \int d\vec{x} e^{-i(\vec{K}+\vec{k})\cdot\vec{x}-x} {}_1F_1[i\lambda, 1, i(kx + \vec{k}\cdot\vec{x})] \end{aligned}$$

cuya integral vale

$$\mathbb{J}_2 = 2\pi \frac{(1-G)^{-i\lambda-1}}{\alpha^2} [(i\lambda - 1)G + 1 + \lambda k] \quad (2.23)$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}\tilde{g}^a(\vec{Q}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s}} \tilde{g}^a(\vec{s}) \\ &= \frac{-N(\xi)}{\sqrt{\pi}(2\pi)^3} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s}} {}_1F_1[i\xi, 1, i(ps + \vec{p}\cdot\vec{s})] \nabla_s e^{-i\nu \ln(vs + \vec{v}\cdot\vec{s})}\end{aligned}$$

cuya la integral resulta

$$\begin{aligned}\mathbb{J}_9 &= i \frac{2\pi Z_P}{\alpha\beta} N(\nu) \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{-i\nu} \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^{-i\xi} \left[\left(F(\mathcal{Z}) + i\xi(1 - \mathcal{Z}) \left(1 - \frac{\beta}{\delta}\right) F^+(\mathcal{Z}) \right) [-\vec{Q}] + \right. \\ &\quad \left. + i\xi(1 - \mathcal{Z}) \frac{\beta}{\delta} (\vec{p} - p\hat{v}) F^+(\mathcal{Z}) \right]\end{aligned}\quad (2.24)$$

donde además

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{1}{2} Q^2, \quad \beta = -\Delta\varepsilon, \quad \gamma = \alpha - \vec{p}\cdot\vec{Q}, \quad \delta = \vec{p}\cdot\vec{v} - pv - \vec{Q}\cdot\vec{v}, \quad \mathcal{Z} = 1 - \frac{\alpha\delta}{\beta\gamma} \\ F(x_1) &= {}_2F_1[i\nu, i\xi, 1, \mathcal{Z}], \quad F^+(x_1) = {}_2F_1[1 + i\nu, 1 + i\xi, 2, \mathcal{Z}]\end{aligned}\quad (2.25)$$

Por último

$$\begin{aligned}\tilde{g}^b(\vec{Q}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s}} g^b(\vec{s}) \\ &= \frac{N(\xi)}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s}} {}_1F_1[i\xi, 1, i(ps + \vec{p}\cdot\vec{s})] \frac{1}{2} \nabla_s^2 e^{-i\nu \ln(vs + \vec{v}\cdot\vec{s})}\end{aligned}$$

donde

$$\frac{1}{2} \nabla_s^2 e^{-i\nu \ln(vs + \vec{v}\cdot\vec{s})} = -\frac{\nu^2 v}{s} e^{-i(\nu-i) \ln(vs + \vec{v}\cdot\vec{s})}$$

de modo que

$$\tilde{g}^b(\vec{Q}) = -\frac{\nu Z_P N(\xi)}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s}} {}_1F_1[i\xi, 1, i(ps + \vec{p}\cdot\vec{s})] \frac{1}{s} e^{-i(\nu-i) \ln(vs + \vec{v}\cdot\vec{s})}\quad (2.26)$$

Nuevamente mediante los resultados de Nordsieck obtenemos que la integral de la expresión anterior equivale a

$$\mathbb{J}_{1/4} = \frac{2\pi N(\nu)}{\beta} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{-i\nu} \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^{-i\xi} {}_2F_1[1 + i\nu, i\xi, 1, \mathcal{Z}]\quad (2.27)$$

En síntesis, la Ec.(2.14), en vitrud de las Ecs.(2.21), (2.23), (2.22), (2.24), (2.27) y (2.25) resulta

$$\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) = \frac{1}{16\pi^5} N(\lambda) N(\xi) \left[\frac{\nu Z_P}{\sqrt{2}} \mathbb{J}_2 \mathbb{J}_{1/4} - \frac{1}{4\pi^2} \mathbb{K}_{-1} \cdot \mathbb{J}_9 \right]\quad (2.28)$$

expresión con la cual obtenemos la amplitud de transición en función del momento trasferido $R(\vec{\eta})$, Ec.(2.15), para finalmente calcular la sección eficaz doble diferencial de la Ec.(2.18), a saber

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E_k \partial \Omega} = k \int d\vec{\eta} |R_{if}(\vec{\eta})|^2$$

2.1.2. Blancos atómicos multielectrónicos

En esta sección presentamos la extensión del modelo CDW-EIS para el cálculo de secciones eficaces doble diferencial en sistemas de colisión de iones desnudos sobre átomos multielectrónicos [16]. El mismo se describe en base al modelo de electrón independiente, esto es, bajo la suposición de que solo un electrón del blanco, denominado activo, es ionizado (emitido) mientras que el resto de los electrones, llámese pasivos, no modifican sus estados iniciales, o como se dice, permanecen congelados en sus orbitales. Sin embargo, el electrón activo interacciona con el campo de los electrones pasivos. En el canal inicial, el potencial de interacción entre electrones pasivos-activo, es considerada –como veremos– en el estado ligado del blanco multielectrónico. En el canal final, por su parte, el campo producido por los electrones pasivos apantalla la carga nuclear del blanco y da lugar a un campo residual no coulombiano que trataremos con atención.

Consideremos un sistema de colisión entre un ión desnudo de carga Z_P y un blanco atómico con N electrones pasivos y carga nuclear Z_T . Bajo la aproximación de parámetro de impacto, la posición del proyectil relativa al blanco \vec{R} viene dada, como vimos, por $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$, donde $t=0$ señala el instante de colisión. Además, si \vec{x} y $\{\vec{x}_j\}$ son los vectores posición de los electrones activos y pasivos respecto del blanco, \vec{s} y $\{\vec{s}_j\}$ los vectores posición de estos mismos electrones pero respecto al proyectil, el hamiltoniano eléctrico del sistema resulta

$$H = -\frac{\nabla_r^2}{2} - \sum_{j=1}^N \frac{\nabla_{x_j}^2}{2} - \frac{Z_T}{x} - \sum_{j=1}^N \frac{Z_T}{x_j} - \frac{Z_P}{s} - \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{s_j} + \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,l=1 \\ j \neq l}}^N \frac{1}{|\vec{x}_j - \vec{x}_l|} + \frac{Z_T Z_P}{R} \quad (2.29)$$

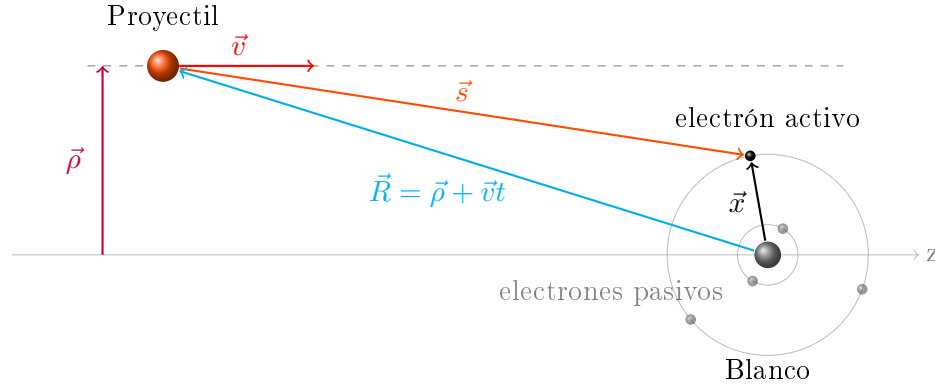


Figura 2.3: Esquema ilustrativo.

Comparando con el hamiltoniano del caso monoeléctrico, Ec.(2.1), resulta evidente el salto en complejidad del sistema al considerar las interacciones con electrones pasivos. Por ejemplo, las funciones de onda exactas del sistema en el canal inicial y final, Ψ_i^+ y Ψ_f^- , deberían de dar cuenta tanto de la dinámica del electrón activo como de la dinámica de los electrones pasivos, o sea

$$\left(H - i \frac{d}{dt} \Big|_r \right) \Psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, \{\vec{x}_j\}, t) = 0 \quad (2.30)$$

A fin de reducir la descripción del sistema a la dinámica del electrón activo, hacemos valer la suposición de que los electrones pasivos no modifican sus estados iniciales durante la colisión y consideramos entonces

$$\Psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, \{\vec{x}_j\}, t) = \psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, t) \varphi_i(\{\vec{x}_j\}) \quad (2.31)$$

donde φ_i es la función de onda de los electrones pasivos en sus estados iniciales.

Luego, promediando la ecuación de Schrödinger multielectrónica, Ec.(2.30), sobre la función de onda de los electrones pasivos, obtenemos la ecuación de Schrödinger para un electrón activo

$$\left(\tilde{H} - i \frac{d}{dt} \Big|_r \right) \psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.32)$$

donde $\tilde{H} = \langle \varphi_i | H | \varphi_i \rangle$, es decir

$$\tilde{H} = -\frac{\nabla_r^2}{2} - \frac{Z_T}{x} + V_{ap}(\vec{x}) + \varepsilon_P - \frac{Z_P}{s} + V_s(\vec{R}) \quad (2.33)$$

con

$$V_{ap}(\vec{x}) = \left\langle \varphi_i \left| \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.34)$$

siendo V_{ap} el potencial de interacción electrostática entre el electrón activo y los pasivos,

$$V_s(\vec{R}) = \left\langle \varphi_i \left| \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{s_j} \right| \varphi_i \right\rangle + \frac{Z_T Z_P}{R} \quad (2.35)$$

el potencial de interacción entre el proyectil y el blanco residual, y

$$\varepsilon_P = \left\langle \varphi_i \left| -\sum_{j=1}^N \left(\frac{\nabla_{x_j}^2}{2} + \frac{Z_T}{x_j} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,l=1 \\ j \neq l}}^N \frac{1}{|\vec{x}_j - \vec{x}_l|} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.36)$$

como el valor medio de la energía de los electrones pasivos en el estado φ_i , excluyendo su interacción con el electrón activo. Dado el hecho de que este último término no depende de las coordenadas del electrón activo, terminará incorporando una fase $\exp(-i\varepsilon_P t)$ a la función de onda distorsionada.

Al hacer uso del modelo CDW-EIS para el cálculo de las DDCS de ionización en blancos multielectrónicos y bajo la aproximación de parámetro de impacto, se proponen para los canales inicial y final las soluciones

$$X_i^+(\vec{r}, t) = \chi_i^+(\vec{r}, t) \exp \left[-i \int_{-\infty}^t V_s(R) dt' \right] \quad (2.37a)$$

$$X_f^-(\vec{r}, t) = \chi_f^-(\vec{r}, t) \exp \left[+i \int_t^{+\infty} V_s(R) dt' \right] \quad (2.37b)$$

que consideran las siguientes funciones de onda distorsionadas:

$$\chi_i^+(\vec{r}, t) = \phi_i(\vec{x}) e^{-i\varepsilon_i t} \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) e^{-i\varepsilon_P t} \quad (2.38a)$$

$$\chi_f^-(\vec{r}, t) = \phi_f(\vec{x}) e^{-i\varepsilon_f t} \mathcal{L}_f^-(\vec{s}) e^{-i\varepsilon_P t} \quad (2.38b)$$

Por tratarse de proyectiles desnudos, es decir, núcleos atómicos sin electrones ligados, la interacción electrostática entre el proyectil y el electrón activo se debe únicamente que a la carga Z_P del núcleo. Luego, las distorsiones \mathcal{L}_i^+ y \mathcal{L}_f^- de los canales de entrada y salida tienen la misma forma que en el caso monoeléctrico de la sección §2.1.1. En cambio, los estados ligados y continuos del blanco, ϕ_i y ϕ_f , sí son modificados por la presencia de electrones pasivos, de manera que a continuación mostraremos una forma de considerar el efecto de los electrones pasivos manteniendo una representación analítica de las soluciones.

Estado ligado multielectrónico

Para a la descripción del estado ligado del blanco multielectrónico utilizaremos funciones de onda de Roothaan-Hartree-Fock (RHF) desarrolladas en una base de orbitales de Slater. A saber,

$$\phi_i(\vec{x}) = \sum_{j=1}^M C_j S_j \quad (2.39)$$

donde S_j refiere a los orbitales de Slater

$$S_j(\vec{x}) = N_j r^{n_j-1} e^{-Z_j x} \Upsilon_{l_j}^{m_j}(\theta, \varphi) \quad (2.40)$$

siendo $\Upsilon_{l_j}^{m_j}$ los armónicos esféricos normalizados y N_j una constante de normalización dada por

$$N_j = \frac{(2Z_j)^{n_j+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n_j)!}} \quad (2.41)$$

Los parámetros C_j y Z_j necesarios para el desarrollo de la Ec.(2.39) se encuentran tabulados en el trabajo de Clementi y Roetti (1974) [17]. En dicha publicación, el autor y la autora presentan las funciones de onda atómicas RHF descriptas en la base de orbitales de Slater dados por la Ec.(2.40) donde $n_j \geq l + 1$, siendo l el número cuántico de momento angular.

Estado del continuo multielectrónico

Como vimos en la sección §1.2.4, los estados del continuo del tipo

$$\phi_i(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} N^*(\lambda) {}_1F_1[-i\lambda, 1, -i(kx + \vec{k}\cdot\vec{x})] \quad (2.42)$$

son solución de potenciales de coulomb, de manera que representan exactamente las funciones del continuo solo en caso de que el potencial del blanco residual sea un potencial coulombiano puro, es decir generado por una sola carga. Sin embargo, en la ionización de blancos multielectrónicos, el electrón activo en el canal de salida interacciona tanto con el núcleo del blanco como con sus electrones pasivos. El potencial de interacción en este caso resulta

$$V_T(\vec{x}) = -\frac{Z_T}{x} + V_{ap}(\vec{x}) \quad (2.43)$$

de modo que ya no se corresponde con un potencial de coulomb y, en consecuencia, la función de la Ec.(2.42) no es en esencia solución del continuo para un blanco multielectrónico.

Una vía de resolución podría consistir en calcular numéricamente las soluciones del continuo de blancos multielectrónicos, pero esto significaría perder la disponibilidad de funciones analíticas, cuya gran ventaja recae en la agilización de tiempos de cálculo computacional. Por ello, considerando que la acción de los electrones pasivos en el canal de salida es, en cierto modo, la de apantallar la carga nuclear Z_T del blanco, se suele entonces reemplazar V_T por un potencial de coulomb efectivo

$$V_T^{eff}(x) = -\frac{\tilde{Z}_T}{x} \quad (2.44)$$

de modo que la función de la Ec.(2.42) sea solución con $\lambda = \frac{\tilde{Z}_T}{k}$, y así recuperar expresiones analíticas para el estado del continuo del blanco. No obstante, al utilizar la versión prior de la amplitud de

transición, los perturbadores actúan sobre el estado inicial ligado del blanco, de los que contamos con muy buenas descripciones del tipo RHF. De este modo, las interacciones entre el electrón activo y los pasivos queda en cierto modo resuelta. Para la versión post, en cambio, se reescribe el potencial como

$$V_T(\vec{x}) = -\frac{\tilde{Z}_T}{x} - \frac{(Z_T - \tilde{Z}_T)}{x} + V_{ap}(\vec{x}) \quad (2.45)$$

y se incluyen los dos últimos términos del potencial en el perturbador de la amplitud de transición. Haciendo esto, se ha demostrado que las versiones CDW-EIS prior y post-completa dan los mismos resultados [18]. Además, el primer término puede formar parte del hamiltoniano del blanco en el canal de salida permitiendo también el uso de la Ec.(2.42) como estado del continuo con $\lambda = \frac{\tilde{Z}_T}{k}$.

Ahora, en lo que respecta a la elección de la carga efectiva \tilde{Z}_T , contamos de momento con dos opciones: por un lado tomar una *carga asintótica* $Z_T^{as} = Z_T - N$ (donde N es el número de electrones pasivos) o bien la carga efectiva propuesta por Belkić (1979), $Z_T^{eff} = n_i \sqrt{-2\varepsilon_i}$ donde n_i es el número cuántico principal del orbital del cual se emitió el electrón. Cabe destacar que si bien la carga efectiva de Belkić no respeta las condiciones asintóticas de contorno preserva la energía de ligadura ε_i del estado inicial del electrón activo.

Amplitud de transición

En esta sección mostraremos las versiones CDW-EIS prior y post de la amplitud de transición a fin de exponer la fuente de sus posibles discrepancias que luego fueran enmendadas por el trabajo de Monti *et al.* (2010) en [18], donde muestran la equivalencia entre la versión CDW-EIS y la llamada CDW-EIS post completa. Este resultado nos permitirá elegir la versión prior para el cálculo de las DDCS ya que resulta más simple de calcular. Finalmente, en lo que refiere al cálculo en sí, introduciremos los denominados *operadores de derivación* para orbitales de Slater, útiles para extender la aplicación de los resultados de Nordsieck.

La versión CDW-EIS prior de la amplitud de transición resulta, para el hamiltoniano \tilde{H} de la Ec.(2.33),

$$\begin{aligned} A_{if} &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} \langle X_f^- | \left[\left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Big|_r \right] | X_i^+ \rangle dt \\ &= \exp \left[-i \int_{-\infty}^{+\infty} V_s(R) dt' \right] \times (-i) \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \chi_f^- | \left[-W_i \Big| \chi_i^+ \right] \rangle dt \end{aligned} \quad (2.46)$$

donde W_i es el perturbador EIS de la Ec.(1.28). En particular, es preciso notar que la interacción entre el electrón activo y los pasivos – potencial V_{ap} – se encuentra incluida en la acción del operador sobre el estado inicial $|X_i^+\rangle$ puesto que la correspondiente función de onda distorsionada contempla una buena descripción del estado ligado para blancos multielectrónicos, como lo es la función de onda RHF presentada anteriormente.

En cambio, la versión post de la amplitud de transición resulta

$$\begin{aligned} A_{fi} &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\langle X_f^- | \left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Big|_r \right]^\dagger | X_i^+ \rangle dt \\ &= \exp \left[-i \int_{-\infty}^{+\infty} V_s(R) dt' \right] \times (-i) \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\langle \chi_f^- | -W_f^\dagger + \tilde{V}_T \Big| \chi_i^+ \rangle \right] dt \end{aligned} \quad (2.47)$$

donde W_f es el perturbador CDW de la Ec.(1.29) y \tilde{V}_T se corresponde con los dos últimos términos de la Ec.(2.45), es decir

$$\tilde{V}_T(\vec{x}) = -\frac{(Z_T - \tilde{Z}_T)}{x} + V_{ap}(\vec{x}) \quad (2.48)$$

Así, la inclusión del potencial \tilde{V}_T da lugar a la denominada versión *post completa* de la amplitud de transición, la cual queda compuesta por dos términos:

$$A_{fi} = i \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\langle X_f^- | W_f^\dagger | X_i^+ \rangle dt - i \int_{-\infty}^{+\infty} \langle X_f^- | \tilde{V}_T | X_i^+ \rangle dt \quad (2.49)$$

Como adelantamos antes, en el trabajo de Monti *et al.* (2010) [18], la versión *post completa* –en CDW-EIS– de la amplitud de transición para la ionización simple de blancos multielectrónicos en colisión con proyectiles desnudos, elimina las discrepancias entre la versión *prior* y la *post*, donde el potencial \tilde{V}_T no era tenido en cuenta. Esto da cuenta de que el potencial perturbativo \tilde{V}_T afecta a la evolución del electrón activo en el canal de salida, de manera que puede ser interpretado como un apantallamiento dinámico de la carga nuclear del blanco.

Haciendo uso de dicho resultado, en lo que sigue centraremos nuestra descripción en las particularidades del cálculo de la versión CDW-EIS *prior* de la amplitud de transición para ionización de blancos multielectrónicos.

Como vimos en la sección §2.1.1, el cálculo de la DDCS dependerá de la amplitud $a_{if}(\vec{\rho})$, que en la Ec.(2.46) se corresponde con

$$a_{if}(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \chi_f^- | [-W_i | \chi_i^+] \rangle dt$$

donde en base a las Ecs.(2.38) se puede reescribir como

$$a_{if}(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\Delta\varepsilon_i f t} \int d\vec{r} F(\vec{x}, \vec{s}) dt$$

donde nuevamente

$$F(\vec{x}, \vec{s}) = (-\phi_f^*(\vec{x}) \nabla_x \phi_i(\vec{x})) \cdot (\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \nabla_s \mathcal{L}_i^+(\vec{s})) + (-\phi_f^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x})) \left(\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \frac{1}{2} \nabla_s^2 \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right)$$

O sea, recordando las definiciones de las Ecs.(2.10),

$$F(\vec{x}, \vec{s}) = \vec{f}^a(\vec{x}) \cdot \vec{g}^a(\vec{s}) + f^b(\vec{x}) g^b(\vec{s})$$

No obstante, hay que considerar que el estado ligado inicial, ϕ_i , se corresponde con una función atómica RHF desarrollada en una base de orbitales de Slater de la forma

$$S_{nl\pm m}(\vec{r}) = N r^{n-1} e^{-Zr} \Upsilon_l^{\pm m}(\theta, \varphi) \quad (2.50)$$

donde $\Upsilon_l^m(\theta, \varphi)$ son los armónicos esféricos. Esta dependencia angular va a alterar las transformadas de Fourier que obtuvimos para las funciones \vec{f}^a y f^b del caso monoeléctrico. Además representa, en principio, un obstáculo para aplicar los resultados de Nordsieck al cálculo de sendas transformadas. Sin embargo, es posible generalizar la aplicación de tales resultados a blancos multielectrónicos mediante la utilización de los denominados *operadores de derivación para orbitales de Slater* (§2.1.3). A saber,

$$\phi_{nl\pm m}(\vec{r}) = C_{nlm} \left[D_{nl}^{(1)} D_{lm}^{(2)} D_{\pm m}^{(3)} \mathcal{S}(\vec{r}) \right] \Bigg|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.51)$$

La acción de los operadores $D^{(1)}$, $D^{(2)}$ y $D^{(3)}$ permiten obtener todos los orbitales de Slater a partir de la derivación de una *función generatriz* $\mathcal{S}(\vec{r})$ que sí permite aplicar los resultados de las

integrales de Nordsieck. Entonces, como la derivación se realiza sobre unos parámetros β y $\vec{\mu}$ que no dependen de las coordenadas espaciales, las integrales pueden resolverse con los resultados de Nordsieck y luego derivarse de acuerdo al operador que corresponda.

En efecto, las transformadas de Fourier de las funciones \tilde{f}^a y f^b son

$$\tilde{f}^a(\vec{K}) = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{x} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}} \phi_f^*(\vec{x}) \nabla_x \phi_i(\vec{x}) \quad (2.52a)$$

$$\tilde{f}^b(\vec{K}) = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{x} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}} \phi_f^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}) \quad (2.52b)$$

En lo que sigue, calcularemos sendas transformadas tomando un solo término de la combinación lineal que describe el estado inicial ϕ_i según la Ec.(2.39). Esto no implica pérdida de generalidad como consecuencia de la linealidad de los operadores involucrados y debido a que todos los orbitales de Slater pueden ser escritos según la Ec.(2.51). Así, denominando de forma genérica \hat{D} al operador $C_{nlm} D_{nl}^{(1)} D_{lm}^{(2)} D_{\pm m}^{(3)}$ y utilizando la expresión de la función generatriz de la Ec.(2.66) con $\vec{r} = \vec{x}$, encontramos que las transformadas de las Ecs.(2.52), en este caso, se reescriben

$$\tilde{f}^a(\vec{K}) = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}(2\pi)^{3/2}} \left[\hat{D} \int d\vec{x} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}} \phi_f^*(\vec{x}) \nabla_x e^{(-i\vec{\mu}\cdot\vec{x}-\beta x)} \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.53a)$$

$$\tilde{f}^b(\vec{K}) = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}(2\pi)^{3/2}} \left[\hat{D} \int d\vec{x} e^{[-i(\vec{K}+\vec{\mu})\cdot\vec{x}-\beta x]} \phi_f^*(\vec{x}) \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.53b)$$

En la Ec.(2.53a) tenemos además

$$\nabla_x e^{(-i\vec{\mu}\cdot\vec{x}-\beta x)} = (-i\vec{\mu} - \beta \hat{x}) e^{[-i\vec{\mu}\cdot\vec{x}-\beta x]}$$

o sea que

$$\tilde{f}^a(\vec{K}) = \tilde{f}^{a1}(\vec{K}) + \tilde{f}^{a2}(\vec{K}) \quad (2.54)$$

donde

$$\tilde{f}^{a1}(\vec{K}) = \frac{i}{2\sqrt{\pi}(2\pi)^{3/2}} \left[\hat{D} \vec{\mu} \int d\vec{x} e^{[-i(\vec{K}+\vec{\mu})\cdot\vec{x}-\beta x]} \phi_f^*(\vec{x}) \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.55a)$$

$$\tilde{f}^{a2}(\vec{K}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(2\pi)^{3/2}} \left[\hat{D} \beta \int d\vec{x} e^{[-i(\vec{K}+\vec{\mu})\cdot\vec{x}-\beta x]} \hat{x} \phi_f^*(\vec{x}) \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.55b)$$

Como el estado final ϕ_f es un estado del continuo de coulomb, Ec.(2.42), podemos recuperar los resultados presentados por Gravielle & Miraglia (1992) en [15]. O sea, si a partir de las Ecs.(2.55) definimos

$$\mathbb{J}'_1 = \int d\vec{x} e^{[-i\vec{\kappa}\cdot\vec{x}-\beta x]} {}_1F_1[i\lambda, 1, i(kx + \vec{k}\cdot\vec{x})] \quad (2.56a)$$

$$\mathbb{J}'_2 = \int d\vec{x} e^{[-i\vec{\kappa}\cdot\vec{x}-\beta x]} \hat{x} {}_1F_1[i\lambda, 1, i(kx + \vec{k}\cdot\vec{x})] \quad (2.56b)$$

donde $\vec{\kappa} = \vec{K} + \vec{k} + \vec{\mu}$, entonces

$$\mathbb{J}'_1 = 2\pi \frac{(1 - G_{\beta\mu})^{-i\lambda-1}}{\alpha_{\beta\mu}^2} [(i\lambda - 1)\beta G_{\beta\mu} + \beta + \lambda k] \quad (2.57a)$$

$$\bar{\mathbb{J}}'_2 = 2\pi i \frac{(1 - G_{\beta\mu})^{-i\lambda-1}}{\alpha_{\beta\mu}^2} \left[i\lambda \vec{k} - (1 + (i\lambda - 1)G_{\beta\mu})\vec{k} \right] \quad (2.57b)$$

con

$$\alpha_{\beta\mu} = \frac{1}{2}[(\vec{\mathbb{K}} + \vec{\mu})^2 + \beta^2] \quad \text{y} \quad G_{\beta\mu} = \frac{1}{\alpha_{\beta\mu}}[\vec{k} \cdot \vec{\mathbb{K}} + \vec{k} \cdot \vec{\mu} + i\beta\vec{k}] \quad \text{donde} \quad \vec{\mathbb{K}} = (\vec{K} + \vec{k})$$

Finalmente, la transformada de fourier de la función \tilde{f}^a , Ec.(2.53a), resulta

$$\tilde{f}^a(\vec{K}) = \frac{i}{8\pi^{5/2}} N(\lambda) \left[\hat{D} \vec{\mu} \mathbb{J}_1 + \hat{D} \beta \bar{\mathbb{J}}_2 \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.58)$$

y además, gracias al resultado de la Ec.(2.56a), se obtiene la transformada de fourier de la función f^b , Ec.(2.53b). A saber

$$\tilde{f}^b(\vec{K}) = -\frac{1}{8\pi^{5/2}} N(\lambda) \left[\hat{D} \mathbb{J}_1 \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.59)$$

En ambas, Ecs.(2.58) y (2.59), se usó $\mathbb{J}_j = \frac{1}{2\pi} \mathbb{J}'_j$ para $j = 1, 2$.

Sinteticemos lo que obtuvimos hasta ahora. Dado un estado inicial ligado de un blanco multi-electrónico, ϕ_i , desarrollado en una base de orbitales de Slater, como en la Ec.(2.39), procedemos a reescribir los orbitales de la base según la Ec.(2.51). Dado que a cada orbital S_j le corresponde un dado conjunto de operadores de derivación, que llamaremos genéricamente \hat{D}_j , el estado inicial ϕ_i resulta

$$\phi_i(\vec{x}) = \sum_{j=1}^M C_j \left[\hat{D}_j \mathcal{S}(\vec{x}) \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z_j}} \quad (2.60)$$

Luego, la amplitud de transición en función del momento total transferido, Ec.(2.15),

$$R(\vec{\eta}) = \frac{i}{v(2\pi)^2} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \Big|_{\substack{\vec{Q}=-\vec{K} \\ K_v=-\Delta\varepsilon/v}}$$

tiene por $\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q})$ a

$$\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) = \left\{ \sum_{j=1}^M C'_j \left[\hat{D}_j \vec{\mu} \mathbb{J}_1 + \hat{D}_j \beta \bar{\mathbb{J}}_2 \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z_j}} \right\} \cdot \tilde{g}^a + \left\{ \sum_{j=1}^M C''_j \left[\hat{D}_j \mathbb{J}_1 \right] \Big|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z_j}} \right\} \tilde{g}^b \quad (2.61)$$

donde las constantes de las Ecs.(2.58) y (2.59) fueron incluídas en C'_j y C''_j , respectivamente. Por su parte, las funciones \tilde{g}^a y \tilde{g}^b son las mismas que obtuvimos para el caso monoeléctrico ya que las perturbaciones debidas al proyectil, tanto en el canal de entrada \mathcal{L}_i^+ como en el canal de salida \mathcal{L}_f^- , no cambian.

Sección eficaz doble diferencial en blancos multieletrónicos

En el tratamiento realizado –recordemos– hemos reducido la dinámica del caso multieletrónico a describir la ionización de un dado electrón, el activo. En otras palabras, al factorizar la función de onda del sistema entre las coordenadas del electrón activo y las coordenadas de los electrones pasivos, Ec.(2.31), y luego promediando sobre la función de onda de los electrones pasivos, hemos abandonado un tratamiento de partículas idénticas, privilegiando al electrón activo por sobre los pasivos. En

parte esta decisión tiene sentido porque lo que buscamos estudiar es la ionización simple, es decir, la emisión de un solo electrón. De esta manera, en el canal final tendremos un electrón distinguible del resto. No obstante, los blancos con una configuración electrónica compleja ofrecen una multiplicidad de orbitales de los que pudo haber sido emitido el electrón activo. Por tanto, como la ionización de cualquiera de ellos es posible, tiene sentido probabilístico pensar que la DDCS susceptible de ser medida en un sistema de colisión esté compuesta por el aporte de la ddcS calculada para cada orbital.

En este caso tomemos de ejemplo un blanco atómico de Boro. Su configuración electrónica es

$$1s^{(2)}, 2s^{(2)} 2p^{(1)}$$

donde sabemos que el estado 2p se encuentra degenerado en los orbitales $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$. A priori, la medición de la DDCS se podrá explicar teóricamente como el aporte de las DDCS correspondientes a cada orbital de la siguiente manera:

$$DDCS = DDCS_{1s} + DDCS_{2s} + DDCS_{2p}$$

Luego, si si tomamos de ejemplo al orbital 2s con dos electrones, la probabilidad de que solo uno resulte ionizado se corresponderá con la suma de las probabilidades de transición de cada electrón. Luego, como la probabilidad de transición depende únicamente del estado inicial del electrón activo, ésta será la misma para ambos resultando en que la $DDCS_{2s}$ sea dos veces la ddcS calculada para dicho orbital, o sea

$$DDCS_{2s} = 2 \text{ ddcS}_{2s}$$

Por otra parte, para la $DDCS_{2p}$ tenemos que el electrón activo podría estar en cualquiera de los tres orbitales p_x , p_y o p_z . Lo que se elige hacer –bajo la suposición de que el electrón activo no se encuentra en una superposición de estados– es promediar el aporte a la $DDCS_{2p}$ de cada ddcS calculada. a saber

$$DDCS_{2p} = \frac{1}{3} [\text{ddcS}_{2p_x} + \text{ddcS}_{2p_y} + \text{ddcS}_{2p_z}]$$

Finalmente, para comparar los resultados teóricos con una medición experimental de la DDCS se deben sumar los aportes de cada ddcS considerando el número de *electrones equivalentes* del orbital y la cantidad de estados degenerados de cada nivel atómico; para el caso del Boro como blanco atómico su DDCS es descripta de la forma

$$DDCS = 2 \text{ ddcS}_{1s} + 2 \text{ ddcS}_{2s} + \frac{1}{3} [\text{ddcS}_{2p_x} + \text{ddcS}_{2p_y} + \text{ddcS}_{2p_z}]$$

2.1.3. Operadores derivación para orbitales de Slater

La parte angular de los orbitales de Slater de la Ec.(2.50) está dada por

$$\Upsilon_l^{\pm m}(\theta, \varphi) = M_{lm} (-1)^{\frac{1 \pm 1}{2} m} e^{\pm i m \varphi} \text{sen}^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l+m} \text{sen}^{2l} \theta \quad (2.62)$$

cuya constante de normalización es

$$M_{lm} = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{(2l+1) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \quad (2.63)$$

Si en lugar de escribir la parte angular de la Ec.(2.62) en coordenadas esféricas la reescribimos en función de $\{x, y, z, r\}$ obtenemos

$$\Upsilon_l^{\pm m} = \frac{1}{r^l} M_{lm}(-1)^{\frac{1\pm 1}{2}m} (x \pm iy)^m \left(\frac{d}{dz}\right)^{l+m} (r^2 - z^2)^l \quad (2.64)$$

donde, desarrollando el binomio y efectuando la derivación, tenemos

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dz}\right)^{l+m} (r^2 - z^2)^l &= \left(\frac{d}{dz}\right)^{l+m} \sum_{s=0}^l \binom{l}{s} (-1)^{l-s} r^{2s} z^{2l-2s} \\ &= \sum_{s=0}^{\frac{l-m}{2}} \binom{l}{s} (-1)^{l-s} \frac{(2l-2s)!}{(l-m-2s)!} r^{2s} z^{l-m-2s} \end{aligned} \quad (2.65a)$$

y además,

$$(-1)^{\frac{1\pm 1}{2}m} (x \pm iy)^m = (-1)^{\frac{1\pm 1}{2}m} \sum_{q=0}^m \binom{m}{q} (\pm i)^{m-q} x^q y^{m-q} \quad (2.65b)$$

Definamos ahora a la función generatriz

$$\mathcal{S}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{(-i\vec{\mu}\cdot\vec{r}-\beta r)} \quad (2.66)$$

Luego, consideremos sus derivadas respecto a las componentes de $\vec{\mu}$ y a al parámetro β . Como vemos se relacionan, respectivamente, con las componentes del vector posición \vec{r} o su módulo r :

$$\mathcal{S}_x = i \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mu_x} \quad (2.67a)$$

$$\mathcal{S}_y = i \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mu_y} \quad (2.67b)$$

$$\mathcal{S}_z = i \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mu_z} \quad (2.67c)$$

$$\mathcal{S}_r = -\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \beta} \quad (2.67d)$$

O bien, visto de otro modo, la función generatriz es autofunción de los operadores definidos a partir de las derivadas anteriores.

Luego, con las Ec.(2.67) podemos reescribir la parte angular $\Upsilon_l^{\pm m}$ en función de las derivadas respecto a μ_x, μ_y, μ_z y β , llegando así a las expresiones de los operadores de derivación. En efecto, las Ec.(2.65) quedan

$$\mathcal{S}(\vec{r}) \left(\frac{d}{dz}\right)^{l+m} (r^2 - z^2)^l = (-i)^l i^{-m} \sum_{s=0}^{\frac{l-m}{2}} \binom{l}{s} \frac{(2l-2s)!}{(l-m-2s)!} \left(\frac{d}{d\beta}\right)^{2s} \left(\frac{d}{d\mu_z}\right)^{l-m-2s} \mathcal{S}(\vec{r}) \quad (2.68a)$$

$$\mathcal{S}(\vec{r}) (-1)^{\frac{1\pm 1}{2}m} (x \pm iy)^m = (-1)^{\frac{1\pm 1}{2}m} i^m \sum_{q=0}^m \binom{m}{q} (\pm i)^{m-q} \left(\frac{d}{d\mu_x}\right)^q \left(\frac{d}{d\mu_y}\right)^{m-q} \mathcal{S}(\vec{r}) \quad (2.68b)$$

Entonces, podemos ahora definir los operadores derivación $D_{lm}^{(2)}$ y $D_{\pm m}^{(3)}$ como

$$D_{lm}^{(2)} = \sum_{s=0}^{\frac{l-m}{2}} \binom{l}{s} \frac{(2l-2s)!}{(l-m-2s)!} \left(\frac{d}{d\beta}\right)^{2s} \left(\frac{d}{d\mu_z}\right)^{l-m-2s} \quad (2.69)$$

$$D_{\pm m}^{(3)} = (-1)^{\frac{1\pm 1}{2}m} \sum_{q=0}^m \binom{m}{q} (\pm i)^{m-q} \left(\frac{d}{d\mu_x}\right)^q \left(\frac{d}{d\mu_y}\right)^{m-q} \quad (2.70)$$

Luego, de acuerdo a la Ec.(2.67d) la Ec.(2.64) se reescribe

$$\Upsilon_l^{\pm m} = M_{lm} (-1)^{-l} \left(\frac{d}{d\beta}\right)^{-l} (-i)^l D_{lm}^{(2)} D_{\pm m}^{(3)} \quad (2.71)$$

De este modo, recordando la expresión de los orbitales de Slater de la Ec.(2.50),

$$\phi_{nl\pm m}(\vec{r}) = N r^{n-1} e^{-Zr} \Upsilon_l^{\pm m}(\theta, \varphi)$$

definimos el operador $D_{lm}^{(1)}$ como

$$D_{nl}^{(1)} = \left(\frac{d}{d\beta}\right)^{n-l-1} \quad (2.72)$$

y encontramos a los orbitales de Slater como derivadas de la función generatriz $\mathcal{S}(\vec{r})$. A saber,

$$\phi_{nl\pm m}(\vec{r}) = N M_{lm} (-i)^l (-1)^{n-l-1} \left[D_{nl}^{(1)} D_{lm}^{(2)} D_{\pm m}^{(3)} \mathcal{S}(\vec{r}) \right] \Bigg|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.73)$$

Finalmente, definiendo

$$C_{nlm} = \frac{(-1)^{n-1} (2Z)^{n+\frac{1}{2}}}{(2i)^l l!} \sqrt{(2l+1) \frac{(l-m)!}{(2n)!(l+m)!}} \quad (2.74)$$

los orbitales de Slater dados por los operadores de derivación resultan

$$\phi_{nl\pm m}(\vec{r}) = C_{nlm} \left[D_{nl}^{(1)} D_{lm}^{(2)} D_{\pm m}^{(3)} \mathcal{S}(\vec{r}) \right] \Bigg|_{\substack{\vec{\mu}=\vec{0} \\ \beta=Z}} \quad (2.75)$$

2.1.4. Blancos moleculares

Recordando la motivación del presente trabajo, el interés por calcular con precisión la energía depositada por haces de iones en la materia biológica conlleva a estudiar su interacción con moléculas, como ser H₂O o bases de ADN. Si tenemos en cuenta que el principal mecanismo de pérdida de energía de iones rápidos en la materia biológica es la ionización [5], corresponde entonces presentar modelos teóricos para el estudio cuántico de la ionización de agua y bases de ADN inducida por impacto de iones pesados, de intermedia y alta energía. Inicialmente –y en línea con lo presentado al momento– consideraremos proyectiles completamente desnudos para luego, al final del capítulo, discutir la ionización de moléculas por impacto de proyectiles vestidos o neutros.

La inclusión de objetivos moleculares es, por supuesto, para nada trivial. Idealmente se debería resolver la ecuación de Schrödinger tanto para el estado inicial ligado como para el estado final del continuo, lidiando con el complejo y no simétrico potencial en el que el electrón evolucionaría antes y después de la colisión [19].

Respecto al estado inicial, algunos métodos proponen como alternativa descomponer la solución exacta en una combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO) [20]. Luego, utilizando diversas estrategias y aproximaciones obtienen la energía del orbital molecular, los coeficientes de la expansión, la distancia de enlace, entre otros parámetros. Dentro de tales métodos encontramos, por un lado al “linear combination of atomic orbitals - self consistent field” (LCAO-SCF) propuesto por Moccia [21] y por otro lado al “complete neglect of the differential overlap” (CNDO), desarrollado por Pople *et al.* [22], como una simplificación mediante aproximaciones y enfoques semi-empíricos del LCAO-SCF. De este último método, se desprende aquel que fuera propuesto por Senger *et al.* [23]. Bajo su enfoque, en lugar de incluir orbitales moleculares *per se* como estado inicial ligado del electrón activo, se opta por analizar en qué medida cada orbital atómico contribuye a la formación de cierto orbital molecular, a fin de describir la DDCS del orbital molecular como una suma ponderada de las ddcS de cada orbital atómico. Dicho análisis se realiza en términos de la denominada *población del orbital atómico*, o sea que los pesos utilizados en la combinación lineal de las ddcS atómicas son la fracción de los electrones del orbital molecular que estarían siendo aportados por cada orbital atómico [19,24]. De esta manera, el método de Senger *et al.* desestima la superposición de estados atómicos en la formación del orbital molecular (aproximación CNDO) de modo que la población de electrones de un dado estado atómico es interpretada como si fuera el número de *electrones equivalentes* que utilizamos para el cálculo de la DDCS de átomos multielectrónicos (véase pág.29).

Por ejemplo, para el caso de la molécula de H₂O encontramos en los trabajos de Champion *et al.* (2012) y Tachino *et al.* (2014) [20,25] que las DDCS correspondientes a los orbitales moleculares representados en la Fig.(2.4) resultan

$$ddcs_{1a_1} = 2,00 \times ddcS_{O_{1s}} \quad (2.76a)$$

$$ddcs_{2a_1} = 1,48 \times ddcS_{O_{2s}} + 0,52 \times ddcS_{H_{1s}} \quad (2.76b)$$

$$ddcs_{1b_2} = 1,18 \times ddcS_{O_{2p}} + 0,82 \times ddcS_{H_{1s}} \quad (2.76c)$$

$$ddcs_{3a_1} = 0,22 \times ddcS_{O_{2s}} + 1,44 \times ddcS_{O_{2p}} + 0,34 \times ddcS_{H_{1s}} \quad (2.76d)$$

$$ddcs_{1b_1} = 2,00 \times ddcS_{O_{2p}} \quad (2.76e)$$

No obstante, para obtener las ddcS atómicas de las Ecs.(2.76) necesitamos todavía reparar en el estado final del continuo. Como mencionamos antes, el potencial generado por moléculas y clusters puede resultar de gran complejidad como para encontrar soluciones exactas, o implicar un gran tiempo de cálculo como para buscar soluciones numéricas. Una dificultad de este estilo habíamos encontrado al tratar el estado del continuo de blancos atómicos multielectrónicos, donde optamos por utilizar una carga efectiva del tipo $Z_T^{eff} = n\sqrt{-2\varepsilon_i}$ que considera –al menos en parte– el apantallamiento de los electrones pasivos. Dicho esto, y visto que hemos descompuesto al orbital molecular en las contribuciones de sus átomos constitutivos, tiene sentido entonces considerar para el estado del continuo del electrón activo una carga efectiva semejante, donde n sea nuevamente el número cuántico del orbital atómico del cual fuera emitido, pero donde ε_i se corresponda con la energía del orbital molecular correspondiente.

Para la molécula de agua, las energías de sus orbitales son

$$\varepsilon_i^{(1a_1)} = -19,842 \text{ au}$$

$$\varepsilon_i^{(2a_1)} = -1,1838 \text{ au}$$

$$\varepsilon_i^{(1b_2)} = -0,6765 \text{ au}$$

$$\varepsilon_i^{(3a_1)} = -0,5404 \text{ au}$$

$$\varepsilon_i^{(1b_1)} = -0,4632 \text{ au}$$

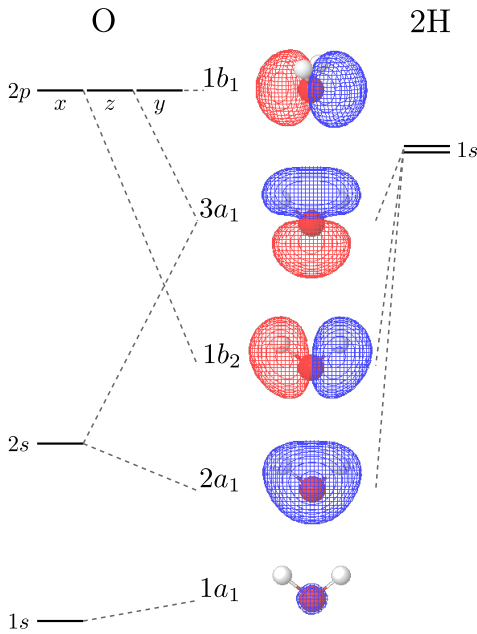


Figura 2.4: Diagrama de orbitales moleculares para H_2O .
 Imagen modificada del original disponible en: <https://bit.ly/3mmedFA>.
 Bajo licencia [Creative Commons Attribution 2.0 Generic](https://creativecommons.org/licenses/by/2.0/).

Es importante mencionar que mediante el enfoque presentado no se contemplan las distintas orientaciones que la molécula pudiera presentar respecto a la incidencia del proyectil. En efecto, es la descripción del estado molecular desarrollada por Moccia la que sí contempla una dada configuración espacial. Sin embargo, en el trabajo de Tachino *et al.* [25] se encuentra que luego de considerar todas las posibles orientaciones de la molécula de H_2O la DDCS obtenida no presenta notables diferencias en comparación con aquella DDCS obtenida por el método aquí presentado.

Por último, en lo que respecta a los modos de vibración y rotación de la molécula, para altas velocidades de impacto se estima que los tiempos de interacción de la colisión ($\tau \sim 10^{-15}\text{s}$) son mucho más cortos que los tiempos característicos de vibración o rotación. De esta manera, tiene sentido suponer que la molécula se mantiene estática –respecto al sistema de referencia del laboratorio– durante la colisión.

2.2. Projectiles vestidos

Hasta el momento, el estudio de sistemas de colisión presentado se ha focalizado en las reacciones de ionización simple de blancos atómicos y moleculares por colisión con proyectiles atómicos completamente ionizados, a los que denominamos proyectiles desnudos. Hemos presentado en detalle el modelo CDW-EIS para el cálculo de secciones eficaces doble diferencial (DDCS) correspondientes a la ionización simple de blancos atómicos y moleculares, mostrando así cómo las particularidades de cada blanco incrementan la complejidad del modelo. Además se propusieron formas en que cada orbital del blanco podría contribuir a la DDCS total, contrastable con mediciones experimentales, mediante argumentos probabilísticos respecto de las ddcS calculadas para cada orbital.

Ahora, resulta necesario complejizar en un nuevo nivel el modelo CDW-EIS para estudiar la reacción de ionización simple cuando se tienen proyectiles neutros o parcialmente ionizados, como se dice, proyectiles vestidos o parcialmente vestidos. El interés que motiva este estudio radica –más allá del carácter fundamental de estas colisiones– en el hecho de que los iones que penetran un medio material tienen la posibilidad de capturar electrones. Por ello, para un estudio más real de la traza del proyectil, es decir, la trayectoria que describe en el medio material con el que interactúa hasta perder la suficiente energía, se deben tener en cuenta las colisiones de estos proyectiles parcialmente ionizados contra blancos atómicos y moleculares. Corresponde entonces examinar en qué medida y de qué manera la estructura electrónica del proyectil afecta a la emisión de electrones del blanco, sin descuidar que el proyectil también podría ser emisor de electrones.

Con respecto a la ionización del blanco por impacto de proyectiles parcialmente vestidos, una serie de resultados experimentales evidenciaron ciertos fenómenos en el espectro de emisión electrónica que no podían ser explicados a la luz de los modelos teóricos disponibles. En particular, el grupo de Schmidt-Böking y colaboradores encontró que en la ionización del Helio por impacto de 1MeV/u U^{21+} [26] la emisión de electrones producidos por encuentros binarios presentaba una estructura anómala. Los denominados *electrones binarios* son producto de colisionar elásticamente contra el proyectil, por lo tanto su contribución al espectro de emisión constituye un pico centrado a altas energías y que a medida que el ángulo de emisión aumenta, $\theta > 0^\circ$, la energía del pico disminuye. No obstante, en el trabajo mencionado encuentran que el impacto de 1MeV/u U^{21+} sobre He da lugar a una estructura de dos picos, en lugar de uno, en la zona del espectro de electrones binarios. En el mismo trabajo, demuestran que dicha anomalía deviene del apantallamiento de la carga nuclear del proyectil por parte de sus electrones. En efecto, logran explicar la estructura de dos picos como un fenómeno cuántico de interferencia entre la emisión de electrones debida a la interacción de largo rango de Coulomb con aquella correspondiente al corto rango dada por el apantallamiento electrostático de la carga nuclear por parte de los electrones del proyectil.

En esta línea, para la extensión de los modelos CDW y CDW-EIS para proyectiles con distintos grados de ionización, se incorporaron potenciales de corto rango que den una mejor descripción cuántica de los iones. De hecho, los trabajos de Monti *et al.* (2008, 2011) [18, 27] logran representar satisfactoriamente los resultados experimentales mencionados y otros [26, 28]. En particular, logran dar cuenta del fenómeno de interferencia entre las emisiones producto de la interacción de largo rango de Coulomb y de un potencial de corto rango prescrito por Green y colaboradores [29–31] para la ionización del Helio por impacto de 1MeV/u U^{21+} y 600keV/u Au^{11+} .

A continuación presentamos algunas generalidades del potencial que modela la interacción del electrón activo con proyectiles parcialmente vestidos. Luego damos lugar a las particularidades del cálculo de las DDCS correspondientes a la ionización simple en sistemas de colisión de proyectiles parcial y totalmente vestidos contra blancos atómicos multielectrónicos. Finalmente, se plantean algunos desafíos por resolver para la extensión de los modelos de onda distorsionada del continuo a sistemas de colisión entre proyectiles vestidos y blancos moleculares.

Potencial paramétrico GSZ

Bajo el modelo atómico de partículas independientes presentado por Green, Sellin y Zachor (GSZ) [29] se caracterizan los potenciales eléctricos de los iones con dos parámetros, H y d , que dependen del número total de electrones N y la carga nuclear Z del ión; por estos motivos reciben el nombre de *potenciales paramétricos GSZ*. En síntesis, proponen una función de apantallamiento de la forma

$$\Omega(s) = \left[H \left(e^{s/d} - 1 \right) + 1 \right]^{-1} \quad (2.77)$$

donde los parámetros H y d pueden ser escritos en base a parámetros variacionales η y ξ obtenidos al minimizar la energía de cada átomo o ión. Si bien es un proceso computacionalmente costoso, en el trabajo publicado por Garvey *et al.* (1975) [31], han demostrado que para un número fijo de electrones, los parámetros η y ξ dependen linealmente del grado de ionización ($Z - N$). A saber,

$$\xi = \xi_0 + \xi_1(Z - N) \quad (2.78a)$$

$$\eta = \eta_0 + \eta_1(Z - N) \quad (2.78b)$$

donde la variación de los valores ξ_0 , ξ_1 , η_0 y η_1 varían con N lo suficientemente suave como para ser inter y extrapolados a partir de aquellos calculados en [30,31], como muestra Monti *et al.* (2011) [32].

Por su parte, el comportamiento general de la función de apantallamiento, Ec.(2.77), se encuentra graficado en la Fig.(2.5). Esta permite escribir el potencial del proyectil, de carga neta q , como

$$V_P(s) = -\frac{q}{s} - \frac{1}{s}(Z_P - q) \left[H \left(e^{s/d} - 1 \right) + 1 \right]^{-1} \quad (2.79)$$

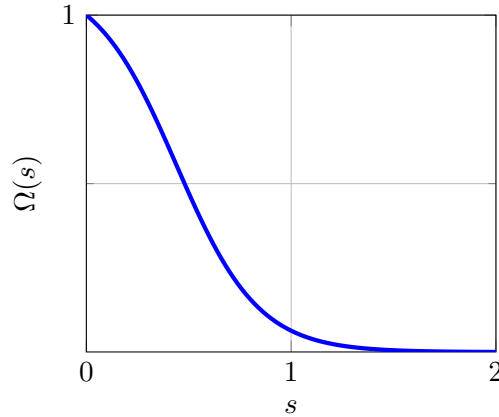


Figura 2.5: Función de apantallamiento $\Omega(s)$.

De la Fig.(2.5) y de la Ec.(2.79) se puede ver que, para grandes distancias, el valor de la función de apantallamiento cae a cero dando lugar a un potencial de Coulomb de largo rango para una carga neta q ; mientras que para distancias cortas, la función de apantallamiento tiende a valer uno ponderando el campo originado por la carga nuclear Z_P sin apantallar.

En lo que sigue consideraremos al potencial del proyectil V_P como la suma de un término de largo rango, V_P^{lr} ,

$$V_P^{lr}(s) = -\frac{q}{s} \quad (2.80)$$

mas otro término de corto rango, V_P^{sr} ,

$$V_P^{sr}(s) = -\frac{1}{s}(Z_P - q) \left[H \left(e^{s/d} - 1 \right) + 1 \right]^{-1} \quad (2.81)$$

2.2.1. Ionización de blancos atómicos multielectrónicos

Al igual que en la sección §2.1.2, haremos uso del modelo de electrón independiente para reducir la dinámica del sistema multielectrónico a la descripción de un único electrón activo. Esto, para el caso de proyectiles vestidos, implica suponer que los electrones ligados al proyectil también se mantienen en sus estados iniciales durante la colisión, es decir que junto con los electrones del blanco son electrones pasivos. No obstante, una diferencia sustancial en la inclusión de los electrones del proyectil respecto a los electrones del blanco radica en modelar todas las interacciones entre los primeros con el resto del sistema como parte de un mismo potencial V_P . En otras palabras, mientras que la inclusión de los electrones pasivos del blanco se logra –en CDW-EIS prior– satisfactoriamente con el uso de buenas funciones de onda para el estado ligado, para considerar el efecto de los electrones pasivos del proyectil, en cambio, se considera que éstos intervendrán mayoritariamente en el apantallamiento de la carga nuclear Z_P , de modo que el potencial de interacción entre el electrón activo y el proyectil vendrá dado por la Ec.(2.79).

Entonces, el hamiltoneano del sistema ilustrado en la Fig.(2.6) resulta

$$\tilde{H} = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 + V_T(\vec{x}) + V_P(\vec{s}) + V_s(\vec{R}) \quad (2.82)$$

donde V_T , siendo el potencial de interacción entre el electrón activo con el resto del blanco, es el mismo que en la Ec.(2.45) y donde V_s es el potencial de interacción internuclear de la Ec.(2.35). Respecto a este último cabe destacar que si bien considera un término que tiene en cuenta la interacción de los electrones pasivos del blanco con el núcleo del proyectil, no tiene un término semejante para la interacción de los electrones pasivos del proyectil para con el núcleo del blanco; no obstante, vimos que tanto este término como el de la energía media de los electrones pasivos del blanco, Ec.(2.36), solo contribuyen en una fase que no interfiere con la dinámica del electrón activo¹.

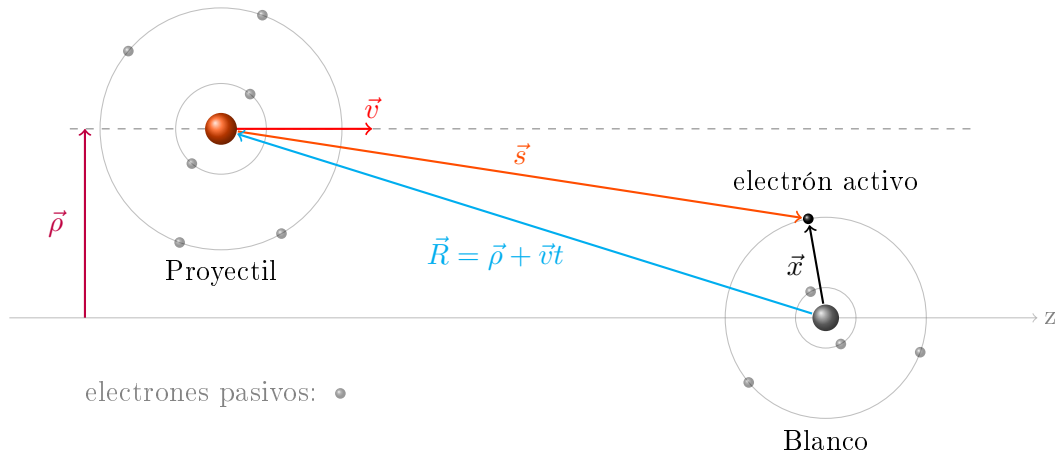


Figura 2.6: Esquema ilustrativo.

Bajo el modelo CDW-EIS, las funciones de onda distorsionadas que usamos para la descripción de este sistema consideran los mismos estados ligados y del continuo del blanco multielectrónico de la sección §2.1.2. En cambio, las funciones de distorsión que describen al electrón activo en el continuo del proyectil –con N electrones pasivos– en los canales inicial y final, \mathcal{L}_i^+ y \mathcal{L}_f^- , van a incorporar una carga apantallada asintótica $q = Z_P - N$ en lugar de la carga nuclear Z_P . De esta manera, las

¹Para el caso de V_s , esto se cumple –recordemos– bajo la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto, o sea, a energías suficientemente altas

distorsiones en cuestión resultan

$$\mathcal{L}_i^+(\vec{s}) = e^{-i\nu \ln(vs + \vec{v} \cdot \vec{s})} \quad (2.83a)$$

$$\mathcal{L}_f^-(\vec{s}) = N^*(\xi) {}_1F_1[-i\xi, 1, -i(ps + \vec{p} \cdot \vec{s})] \quad (2.83b)$$

pero con $\nu = \frac{q}{v}$ y $\xi = \frac{q}{p}$, donde v es la velocidad del proyectil y \vec{p} el momento lineal del electrón emitido con respecto al proyectil, o sea $\vec{p} = \vec{k} - \vec{v}$, siendo \vec{k} el momento del electrón emitido respecto al blanco. Al igual que con el estado del continuo del blanco multielectrónico, es oportuno recordar que el reemplazo de la carga nuclear de la solución por una carga efectiva asintótica es una aproximación que intenta considerar parcialmente el efecto de los electrones pasivos –en este caso del proyectil– al mismo tiempo que busca preservar la expresión analítica de las soluciones del continuo.

En vista de lo desarrollado, mostramos a continuación cómo la inclusión de un término de corto rango en el potencial perturbativo logra explicar los fenómenos de interferencia antes mencionados.

Amplitud de transición

La amplitud de transición CDW-EIS en su versión prior para el hamiltoniano de la Ec.(2.82) resulta

$$A_{if}(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \langle X_f^- | \left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_r \right) | X_i^+ \rangle dt \quad (2.84)$$

donde

$$\left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_r \right) = -\frac{1}{2} \nabla_x^2 - \frac{1}{2} \nabla_s^2 - \nabla_x \cdot \nabla_s + V_T(\vec{x}) + V_P(\vec{s}) + V_s(\vec{R}) - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_{xs} + i\vec{v} \cdot \nabla_s$$

Luego, teniendo en cuenta que

$$\left(V_s(\vec{R}) - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_{xs} \right) \exp \left[-i \int_{-\infty}^t V_s(R) dt' \right] = 0 \quad (2.85a)$$

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_x^2 + V_T(\vec{x}) - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_{xs} \right) \psi_i(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.85b)$$

$$\left(-\frac{q}{s} + i\vec{v} \cdot \nabla_s \right) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) = 0 \quad (2.85c)$$

de la Ec.(2.84) se desprende, ignorando la fase debida al potencial internuclear,

$$\begin{aligned} a_{if}(\vec{\rho}) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \langle \chi_f^- | \left(-\frac{1}{2} \nabla_s^2 - \nabla_x \cdot \nabla_s + V_P^{sr} \right) | \chi_i^+ \rangle dt \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \langle \chi_f^- | (-W_i^{EIS} + V_P^{sr}) | \chi_i^+ \rangle dt \end{aligned} \quad (2.86)$$

Observamos entonces que el potencial perturbativo cuenta con dos términos: por un lado el perturbador CDW-EIS, W_i^{EIS} , y por el otro el potencial de corto rango del proyectil V_P^{sr} . Esto permite reescribir la amplitud de transición como la suma de dos amplitudes: una que denominaremos de largo rango (lr) y otra de corto rango (sr). A saber,

$$a_{if}(\vec{\rho}) = a_{if}^{lr}(\vec{\rho}) + a_{if}^{sr}(\vec{\rho}) \quad (2.87)$$

De este modo, la DDCS calculada en base al parámetro de impacto queda

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E_k \partial \Omega} = k \int d\vec{\rho} \left| a_{if}^{lr}(\vec{\rho}) + a_{if}^{sr}(\vec{\rho}) \right|^2 \quad (2.88)$$

lo que genera grandes expectativas si recordamos el fenómeno de interferencia encontrado en las mediciones experimentales con proyectiles vestidos. Continuamos entonces con el cálculo de la DDCS aplicando nuevamente el método de la transformada de Fourier presentado en la sección §2.1.1.

La amplitud de transición de largo rango en función del parámetro de impacto tiene la forma de la Ec.(2.8)

$$a_{if}^{lr}(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\Delta\varepsilon_{i,f}t} \int d\vec{r} F^{lr}(\vec{x}, \vec{s}) dt \quad (2.89)$$

donde

$$F^{lr}(\vec{x}, \vec{s}) = \left(-\phi_f^*(\vec{x}) \nabla_x \phi_i(\vec{x}) \right) \cdot \left(\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \nabla_s \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right) + \left(-\phi_f^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}) \right) \left(\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \frac{1}{2} \nabla_s^2 \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right) \quad (2.90)$$

Por su parte, la amplitud de transición de corto rango se escribe

$$a_{if}^{sr}(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\Delta\varepsilon_{i,f}t} \int d\vec{r} F^{sr}(\vec{x}, \vec{s}) dt \quad (2.91)$$

donde

$$F^{sr}(\vec{x}, \vec{s}) = \left(-\phi_f^*(\vec{x}) \phi_i(\vec{x}) \right) (-1) \left(\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) V_P^{sr}(\vec{s}) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right) \quad (2.92)$$

Según el método de la transformada de Fourier, podemos obtener la DDCS a partir de la amplitud de transición en función del momento transferido R_{if}

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E_k \partial \Omega} = k \int d\vec{\eta} \left| R_{if}(\vec{\eta}) \right|^2 \quad (2.93)$$

con

$$R_{if}(\vec{\eta}) = \frac{i}{v(2\pi)^2} \tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) \Bigg|_{\substack{\vec{Q} = -\vec{K} \\ K_v = -\Delta\varepsilon/v}} \quad (2.94)$$

donde en este caso

$$\tilde{F}(\vec{K}, \vec{Q}) = \tilde{F}^{lr}(\vec{K}, \vec{Q}) + \tilde{F}^{sr}(\vec{K}, \vec{Q}) \quad (2.95)$$

Acá podemos notar que el primer término se corresponde con la transformada de Fourier de la Ec.(2.90), la cual fue obtenida ya en la sección §2.1.2, mientras que el segundo término se corresponde con la transformada de la Ec.(2.92). Éste último resulta

$$\tilde{F}^{sr}(\vec{K}, \vec{Q}) = \left[\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{x} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}} f^b(\vec{x}) \right] \times \left[\frac{(Z_P - q)}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s}} \mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \frac{1}{s} \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \Omega(s) \right] \quad (2.96)$$

cuyo primer factor reconocemos como la transformada de Fourier de la función f^b , Ec.(2.10), calculada para blancos multielectrónicos en la sección §2.1.2. El segundo factor, por su parte, podemos notar que es similar a la transformada de Fourier de la función g^b , Ec.(2.26), salvo que involucra a la función de apantallamiento Ω de la Ec.(2.77). En principio, la presencia de esta función de apantallamiento dificulta el cálculo de dicha cantidad por medio de las ya conocidas integrales de Nordsieck, sin embargo veremos que –como el comportamiento de Ω lo sugiere– dicha función puede ser expresada en una base de orbitales de Slater del tipo 1s, permitiendo así la aplicación directa de los resultados de Nordsieck al cálculo de la integral.

Definiendo entonces a g^{sr} como

$$g^{sr}(\vec{s}) = \mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \frac{1}{s} (Z_P - q) \Omega(s) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \quad (2.97)$$

notamos que el segundo factor de la Ec.(2.96) se corresponde con la transformada de Fourier de g^{sr} , o sea \tilde{g}^{sr} .

Expresando a la función de apantallamiento como una combinación lineal de cinco orbitales de Slater de tipo 1s,

$$\Omega(s) = \sum_{j=1}^5 c_j e^{-Z_j s} \quad (2.98)$$

encontramos que \tilde{g}^{sr} tiene la forma

$$\tilde{g}^{sr}(\vec{Q}) = N(\xi) \left[\sum_{j=1}^5 c_j \frac{(Z_P - q)}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s} - Z_j s} {}_1F_1[i\xi, 1, i(ps + \vec{p}\cdot\vec{s})] \frac{1}{s} e^{-i\nu \ln(vs + \vec{v}\cdot\vec{s})} \right] \quad (2.99)$$

cuyas integrales sí se corresponden con integrales de Nordsieck [15].

Entonces, en virtud de las Ecs.(2.61), (2.96), (2.95), (2.94) y (2.93) obtenemos, por integración numérica, la DDCS de ionización simple del blanco para una dada energía de impacto del proyectil. No obstante, recordemos que solo estuvimos considerando la ionización del blanco bajo la suposición de que los electrones del proyectil se encontraban mucho más ligados que los del primero. Claramente, hay casos en que esta hipótesis podría no satisfacerse. Por este motivo, analizaremos a continuación la ionización de proyectiles vestidos para aquellos casos en que las energías de ionización de ambos agregados que participan de la colisión son similares.

2.2.2. Ionización de proyectiles vestidos

En sistemas donde la energía de ligadura de los electrones del proyectil es comparable con las energías de ionización del blanco corresponde considerar también la posible ionización del proyectil por impacto del blanco, es decir, la colisión inversa. De este modo, la DDCS resultante deberá incluir tanto el aporte de electrones por parte del blanco –como vimos anteriormente– mas el aporte de electrones por parte del proyectil e incluso la ionización simultánea de ambos cuerpos. Respecto a esta última posibilidad solo presentaremos una sencilla estimación probabilística debido a que su cálculo formal excede las posibilidades de los modelos de ionización simple aquí considerados.

La sección eficaz doble diferencial para la ionización del proyectil se obtiene entonces considerando el sistema ilustrado en la Fig.(2.7). Procediendo de manera análoga a lo expuesto anteriormente, podremos conocer la DDCS en función de la energía y el ángulo de emisión para el sistema de referencia ligado al proyectil. Luego, mediante transformaciones de Galileo, describimos las cantidades cinemáticas del sistema del proyectil respecto al sistema de referencia del laboratorio, solidario al blanco.

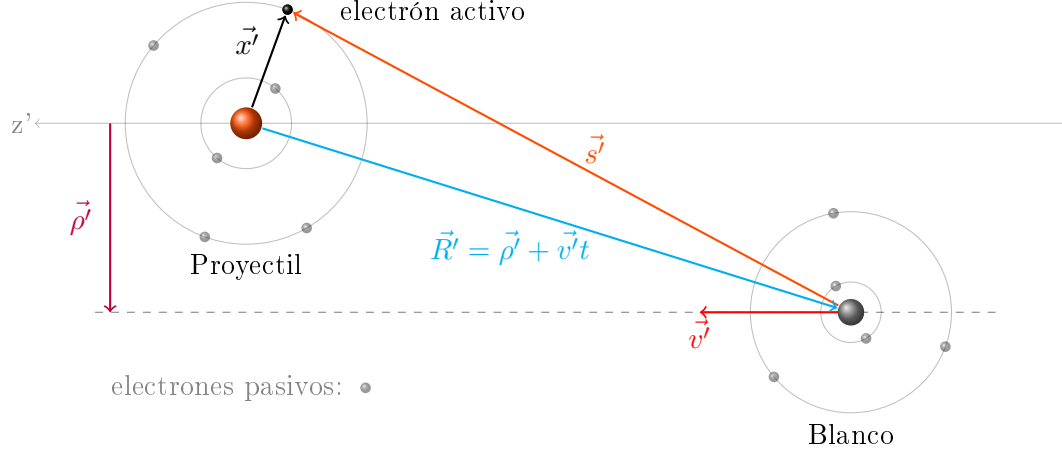


Figura 2.7: Esquema ilustrativo.

En efecto, si ε' y θ' son la energía y el ángulo de emisión en el sistema del proyectil, encontramos que en el sistema del blanco se escriben:

$$\varepsilon' = \varepsilon + T - 2\sqrt{\varepsilon T} \cos \theta \quad (2.100a)$$

$$\theta' = \arccos \left(\frac{\varepsilon - T - \varepsilon'}{2\sqrt{T\varepsilon'}} \right) \quad (2.100b)$$

donde $T = v^2/2$. Luego, siendo σ' la sección eficaz de ionización simple del proyectil en el sistema del proyectil, mientras que σ es su transformación al sistema del blanco. Luego, se encuentra [10] que las DDCS de ambos sistemas se relacionan según

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \varepsilon} = \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon'} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial^2 \sigma'}{\partial \Omega' \partial \varepsilon'} \quad (2.101)$$

En la Fig.(2.8) se muestra la contribución por parte del proyectil al espectro de emisión que se mide desde el sistema de referencia del laboratorio. Como se ve, la ionización del proyectil da lugar a un pico centrado en energías correspondientes a electrones emitidos con velocidad similar a la del proyectil. Esto, en el marco de referencia del proyectil, se condice con electrones poco energéticos producto de las colisiones blandas, que a su vez son los de mayor sección eficaz. Si bien su distribución angular es en general isotrópica, como resultado de la transformación de coordenadas se obtiene que en el sistema de referencia del laboratorio éstos electrones quedan mayoritariamente subtendidos en ángulos de emisión cercanos a $\theta = 0^\circ$, pero con una dispersión angular mayor que aquella correspondiente al pico de captura electrónica al continuo (ECC).

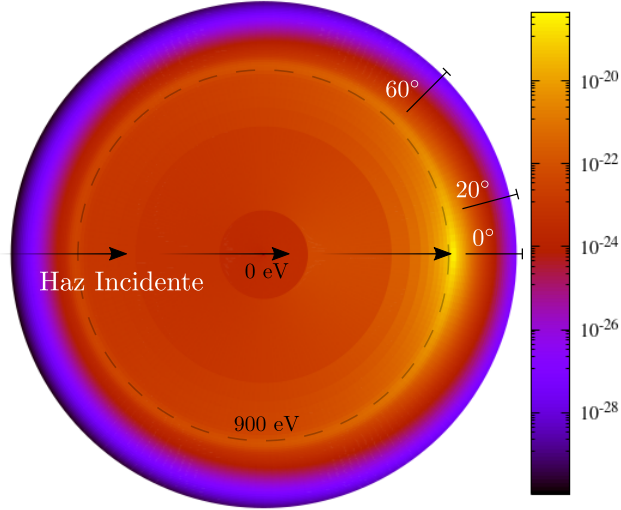


Figura 2.8: Vista superior de la superficie de emisión por ionización del proyectil vista desde el sistema de laboratorio. Las secciones eficaces doble diferencial fueron calculadas para la colisión $C^{2+} + He$ a 1800 keV/u. El sistema de coordenadas es polar con la energía de emisión en la variable radial en escala logarítmica y los colores dan cuenta de la magnitud de la DDCS en cada punto según la escala indicada en el gráfico.

2.2.3. Factor de forma

La inversión del sistema de colisión para obtener la DDCS correspondiente al proyectil tiene una peculiaridad en la que no hemos reparado aún en nuestro desarrollo. Resulta cuando un proyectil tiene carga neutra ($q = 0$), las distorsiones correspondientes a los canales inicial y final, Ecs.(2.83), dejan de tener efecto sobre la función de onda distorsionada puesto que ambos factores pasan a valer uno. Entonces, a pesar de que en la amplitud de transición, Ec.(2.86), se preserva el término de corto rango, la evolución temporal del electrón activo en nuestro modelo caería en una descripción de un solo centro, el blanco. Sin embargo, hay evidencia experimental que da cuenta de que aún con proyectiles neutros en los espectros de emisión delantera ($\theta \sim 0^\circ$) resulta posible observar el pico de captura electrónica al continuo [33], el cual es inherentemente un fenómeno de dos centros.

Además, comparando espectros de emisión electrónica medidos con proyectiles desnudos y parcialmente vestidos, DuBois & Manson (1990) [34] encontraron que la región del espectro correspondiente a electrones más energéticos, asociados a parámetros de impacto pequeños, son similares entre sistemas con distintos iones de una misma especie como proyectiles. Por otra parte, los espectros de emisión de electrones de baja energía, asociados a grandes parámetros de impacto, medidos para proyectiles vestidos de carga neta $q = Z_P - N$ (siendo N el número de electrones del proyectil) son similares a aquellos medidos para proyectiles desnudos de carga nuclear $Z_P = q$.

Todo esto parece indicar que la carga efectiva q que se le asigna al proyectil podría ser considerada en función del parámetro de impacto. En otras palabras, se puede proponer, tanto para proyectiles neutros como parcialmente vestidos, una *carga dinámica* que con parámetros de impacto cortos asuma el valor de la carga nuclear Z_P , mientras que con parámetros de impactos largos ésta asuma el valor asintótico $Z_P - N$, donde el apantallamiento por parte de los electrones pasivos del proyectil es completo.

En esta línea, DuBois y Manson proponen, en el mismo trabajo [34], un *factor de forma* que de cuenta del *apantallamiento dinámico* de la carga del proyectil. A saber,

$$F(\vec{K}) = \left\langle \phi_{P_i} \left| \sum_{j=1}^N e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_j} \right| \phi_{P_i} \right\rangle \quad (2.102)$$

donde la sumatoria es sobre las posiciones \vec{r}_j de todos los electrones pasivos del proyectil, que permanecen en el estado inicial ϕ_{P_i} y donde \vec{K} es el momento transferido al electrón activo. Por tratarse de variables recíprocas, el momento transferido y el parámetro de impacto son inversamente proporcionales entre sí. De esta manera esperaremos un apantallamiento completo de la carga cuando K tienda a cero (gran parámetro de impacto) mientras que el apantallamiento debería de ser nulo cuando K sea muy grande (parámetro de impacto corto).

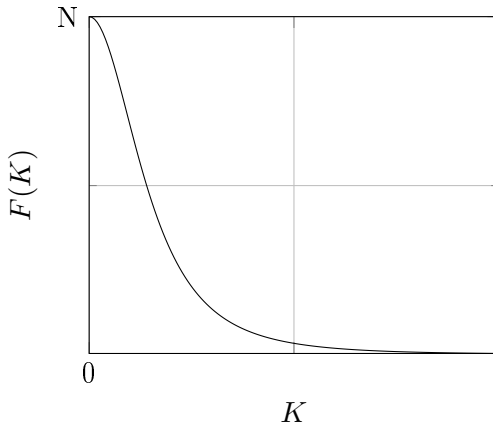
De la Ec.(2.102) encontramos que

$$F(\vec{K}) = \sum_{j=1}^N \left[\int |\phi_{P_i}|^2 \cos(\vec{K} \cdot \vec{r}_j) d\vec{r} + i \int |\phi_{P_i}|^2 \text{sen}(\vec{K} \cdot \vec{r}_j) d\vec{r} \right]$$

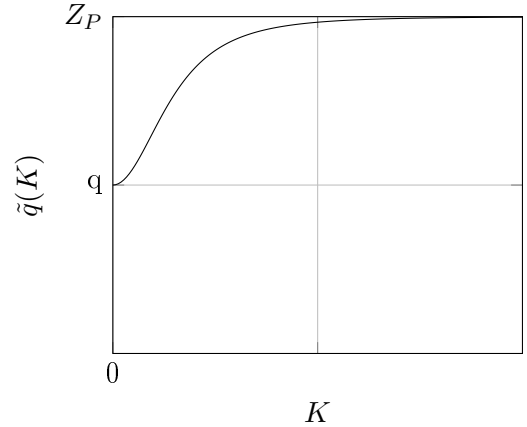
donde el término imaginario se anula por tratarse de la integración de una función impar en un intervalo simétrico y donde efectivamente $K \rightarrow 0$ implica $F(0) = N$ y donde $K \rightarrow \infty$ hace oscilar al integrando con demasiada frecuencia entre valores positivos y negativos haciendo que la integral valga cero, o sea $F(\infty) = 0$. Este comportamiento en función de K puede evidenciarse en la Fig.(2.9a).

Entonces, por tratarse además de un valor real, podemos utilizar este factor de forma para definir una carga dinámica en función del momento transferido. A saber,

$$\tilde{q}(\vec{K}) = Z_P - F(\vec{K}) \quad (2.103)$$



(a) Factor de forma $F(K)$.



(b) Carga dinámica $\tilde{q}(K)$.

En la gráfica de la Fig.(2.9b) podemos apreciar entonces la carga dinámica \tilde{q} correspondiente a las distorsiones que afectan al electrón activo de acuerdo al momento K que le fuera transferido. Veamos ahora cómo incluirla en el potencial del proyectil a fin de poder describir fielmente los espectros obtenidos con proyectiles neutros, es decir, completamente vestidos.

Potencial dinámico para proyectiles vestidos

En vista de la Ec.(2.103), que nos brinda la carga dinámica en función del momento transferido al electrón en su estado final del continuo y recordando la Ec.(2.79), que modela la interacción de corto y largo rango con proyectiles vestidos, podemos proponer un nuevo potencial que incluya ambos efectos con solo sumar y restar un término de coulomb de carga dinámica \tilde{q} , Ec.(2.103), al potencial V_P . De esta manera obtenemos

$$V_P(s) = -\frac{\tilde{q}}{s} - \frac{1}{s}(Z_P - q)\Omega(s) - \frac{(q - \tilde{q})}{s} \quad (2.104)$$

De este modo, en lo que respecta a las distorsiones de los canales inicial y final \mathcal{L}_i^+ y \mathcal{L}_f^- de las Ecs.(2.83), habrá que redefinir $\nu = \frac{\tilde{q}}{v}$ y $\xi = \frac{\tilde{q}}{p}$. Luego, en virtud de las mismas hipótesis y bajo un procedimiento análogo al realizado para arribar a la Ec.(2.86), podemos encontrar que la inclusión de la carga dinámica agrega un nuevo término al potencial perturbativo, este es

$$a_{if}(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \langle \chi_f^- | \left(-W_i^{EIS} + V_P^{sr} - \frac{(q - \tilde{q})}{s} \right) | \chi_i^+ \rangle dt \quad (2.105)$$

Por lo tanto, nuevamente podremos reescribir la amplitud de transición como la suma de distintas amplitudes, cada una relacionada con un término del perturbador de la Ec.(2.105). De esta manera podremos notar que dos de las tres amplitudes ya las obtuvimos anteriormente, a saber, las de corto y largo rango de la Ec.(2.87). Ahora entonces encontramos un tercer término relacionado con la carga dinámica \tilde{q} que denotaremos como a_{if}^{dyn} y la amplitud de transición resulta

$$a_{if}(\vec{\rho}) = a_{if}^{lr}(\vec{\rho}) + a_{if}^{sr}(\vec{\rho}) + a_{if}^{dyn}(\vec{\rho}) \quad (2.106)$$

En particular,

$$a_{if}^{dyn}(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\Delta\varepsilon_{i,f}t} \int d\vec{r} F^{dyn}(\vec{x}, \vec{s}) dt \quad (2.107)$$

donde

$$F^{dyn}(\vec{x}, \vec{s}) = \left(-\phi_f^*(\vec{x})\phi_i(\vec{x}) \right) \left(\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \frac{(q - \tilde{q})}{s} \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right) \quad (2.108)$$

siendo su transformada de Fourier

$$\tilde{F}^{dyn}(\vec{K}, \vec{Q}) = \left[\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{x} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{x}} f^b(\vec{x}) \right] \times \left[\frac{(q - \tilde{q})}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{s} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{s}} \mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \frac{1}{s} \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right] \quad (2.109)$$

En la Ec.(2.109) encontramos nuevamente la ya conocida transformada de Fourier de la función f^b multiplicada por otra integral de resolución directa si aplicamos los resultados de [15].

Luego, recordando las Ecs.(2.61) y (2.96)

$$R_{if}(\vec{\eta}) = \frac{i}{v(2\pi)^2} \left[\tilde{F}^{lr}(\vec{K}, \vec{Q}) + \tilde{F}^{sr}(\vec{K}, \vec{Q}) + \tilde{F}^{dyn}(\vec{K}, \vec{Q}) \right] \Bigg|_{\substack{\vec{Q} = -\vec{K} \\ K_v = -\Delta\varepsilon/v}}$$

y entonces

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E_k \partial \Omega} = k \int d\vec{\eta} \left| R_{if}(\vec{\eta}) \right|^2$$

cuyo cálculo, al igual que en los casos anteriores, se realiza numéricamente. Vale mencionar que al integrar sobre el momento transferido, η , la carga dinámica \tilde{q} va actualizando su valor según corresponda.

Ionización simultánea

Las contribuciones al espectro de emisión que provengan de colisiones en donde solo uno de los agregados resulta ionizado, se corresponden con la suma de las DDCS correspondientes a la ionización simple del blanco y del proyectil en el sistema de referencia del laboratorio. No obstante, resta aún considerar aquellas colisiones en las que ambos agregados se ionicen en simultáneo. Formalmente, el cálculo de la DDCS para ionización simultánea debe tomar en cuenta dos electrones activos: uno inicialmente ligado al blanco y el otro inicialmente ligado al proyectil; pero sendos electrones

estarían sometidos a distintos potenciales perturbativos, lo que complica ampliamente la solución computacional del problema bajo los modelos aquí presentados.

De todas formas, una opción para estimar la contribución al espectro por parte de la ionización simultánea es utilizar un enfoque probabilístico, tal como los trabajos [35,36]. Si recordamos que la DDCS para ionización simple es una medida de la probabilidad de que en un dado ángulo y con una dada energía sea emitido un electrón tras la colisión con un proyectil a cierta velocidad, entonces podemos argumentar que la sección eficaz total TCS, da cuenta de que a raíz de tal colisión un electrón sea emitido, sin importar alguna dirección o energía en particular. De esta manera, en un sistema de colisión donde tanto el proyectil como el blanco se puedan ionizar, podemos definir la probabilidad de ionización del blanco como

$$P^{TI} \approx \frac{TCS^{TI}}{TCS^{PI} + TCS^{TI}} \quad (2.110)$$

y la probabilidad de ionización del proyectil

$$P^{PI} \approx \frac{TCS^{PI}}{TCS^{PI} + TCS^{TI}} \quad (2.111)$$

donde los superíndices indican si la cantidad se refiere a la ionización del blanco (TI) o a la ionización del proyectil (PI). Podemos corroborar que la suma de ambas probabilidades, es decir, la probabilidad de que el electrón emitido haya provenido de alguno de los dos agregados, vale uno.

Finalmente, si para estimar la DDCS de la ionización simultánea asumimos que el ángulo y energía de emisión de un electrón es independiente del otro, podemos argumentar que la DDCS en cuestión implica considerar cuál es la probabilidad de que ambos agregados se ionicen pero al menos uno emita un electrón con ángulo θ_k y energía ε_k . De esta forma,

$$DDCS^{sim} = \frac{DDCS^{TI} TCS^{PI}}{TCS^{PI} + TCS^{TI}} + \frac{DDCS^{PI} TCS^{TI}}{TCS^{PI} + TCS^{TI}} \quad (2.112)$$

Si bien resulta de un enfoque muy simplificado –donde por ejemplo no se tienen en cuenta posibles interferencias entre los electrones dispersados– cabe destacar que ha dado muy buenas estimaciones de la contribución de la ionización simultánea al espectro de emisión electrónica total [35,36].

2.2.4. Blancos moleculares y proyectiles vestidos

Para finalizar, presentaremos la situación actual del modelo CDW-EIS para la descripción de colisiones entre proyectiles vestidos y blancos moleculares. En §2.1.4 hemos presentado a la molécula de H₂O como blanco, mostrando la manera en que describimos sus estados ligados y del continuo. Ahora, en línea con lo presentado para proyectiles vestidos, resta considerar a la molécula como proyectil y así poder calcular la ionización de proyectiles vestidos en colisión contra blancos moleculares.

Para incluir proyectiles moleculares en el actual modelo CDW-EIS prior, debemos buscar la forma de describir las interacciones entre los electrones pasivos de la molécula y el electrón activo ligado al blanco. Esto es un problema no trivial que para el caso de iones y átomos (§2.2) se logra resolver mediante la descomposición del potencial de interacción en términos de largo y corto rango. Este último fue modelado por potenciales paramétricos GSZ (pág.36), cuyos parámetros se obtienen para una amplia variedad de iones y átomos. En cambio, para el caso de proyectiles moleculares la utilización de potenciales GSZ, al menos en rigor, no es directa.

No obstante, como primer abordaje, en el presente trabajo vamos a forzar la extensión de los potenciales GSZ para proyectiles H₂O definiendo el potencial de corto rango de la Ec.(2.79) a partir de los parámetros del átomo de oxígeno pero para una carga nuclear $Z_P = 10$. Un poco la razón

de esta aproximación radica en el fuerte carácter monocéntrico de la molécula de agua, en la que el átomo de oxígeno es el más masivo y el de mayor carga nuclear. Al final del próximo capítulo contrastaremos con datos experimentales los resultados teóricos para la DDCS de ionización simple de la molécula de agua por impacto de proyectiles de carbono parcialmente vestidos.

Capítulo 3

Resultados

En este capítulo se presentan y analizan distintos resultados teóricos obtenidos para el cálculo de secciones eficaces doble diferencial y totales bajo el modelo CDW-EIS para distintos sistemas de colisión. Estos resultados teóricos se encuentran contrastados contra sus correspondientes mediciones experimentales, de modo que la elección de sistemas de colisión, ángulos de emisión electrónica, energía de emisión y energía de colisión elegidos se encuentran, en cierto modo, sujetos a la disponibilidad de datos experimentales. No obstante, el volumen y la variedad de las mediciones aquí recopiladas se considera suficiente para dar idea de los alcances del modelo, exponiendo e interpretando las causas de sus límites.

Los datos experimentales fueron facilitados por distintos autores por comunicación directa, extraídos de tablas o bien digitalizados a partir de las gráficas presentes en artículos publicados en revistas científicas de alto impacto. En todo caso se citará la fuente de dichas mediciones.

El orden de presentación de los resultados responde a la misma lógica bajo la cual se ha organizado (en el capítulo anterior) el desarrollo teórico del modelo CDW-EIS, a saber, de los blancos más simples a los más complejos y de los proyectiles más simples (desnudos) a los más complejos (vestidos).

3.1. Projectiles desnudos

3.1.1. Protón sobre Hidrógeno

El más simple de los sistemas de ionización por colisión se corresponde con el impacto de protones sobre blancos de hidrógeno, o sea la reacción $H^+ + H \rightarrow H^+ + H^+ + e^-$. Cabe mencionar que si bien la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto utilizada en el modelo CDW-EIS no admitiría el uso de electrones como proyectiles, un sistema de colisión en el que el proyectil sea un electrón debería además tener en cuenta la relación de intercambio de éste para con el (o los) del blanco.

En este sistema además la funciones del continuo de Coulomb del canal final son exactas. De este modo, ante la comparación con resultados experimentales, podremos descartar como fuente de discrepancias a las descripciones de dichos estados y centrarnos en otros aspectos del modelo.

Para esta reacción en particular contamos con una vasta cantidad de mediciones experimentales, publicadas por Kerby *et al.* (1995) [37], para energías de impacto que van desde 20keV hasta 114keV, cubriendo casi completamente la amplitud angular para energías de emisión contempladas entre 1,5eV y 300keV. Éstos datos nos permiten observar tanto la distribución energética (para un ángulo fijo) de las DDCS como su distribución angular (para una energía de emisión fija).

En efecto, en las gráficas de la Fig.(3.1) se presentan las DDCS de ionización simple del sistema $H^+ + H$, teóricas y experimentales, en función de la energía del electrón emitido para los ángulos de emisión indicados. Cada gráfica (a, b, c, d y e) se corresponde con una energía de impacto diferente, o bien a diferentes valores del parámetro de Sommerfeld $S = Z_P/v$. Por otro lado, cabe destacar que a fin de lograr una mejor visualización de las curvas y puntos graficados, algunos conjuntos de datos (experimentales y teóricos) fueron multiplicados por un factor escalar arbitrario.

De manera similar, en las gráficas de la Fig.(3.2) se muestran las distribuciones de las DDCS de ionización simple pero en función del ángulo de emisión para algunas energías de emisión que permitan la comparación entre colisiones a diferentes energías de impacto. En esta oportunidad no se han escalado los conjuntos de datos experimentales y teóricos.

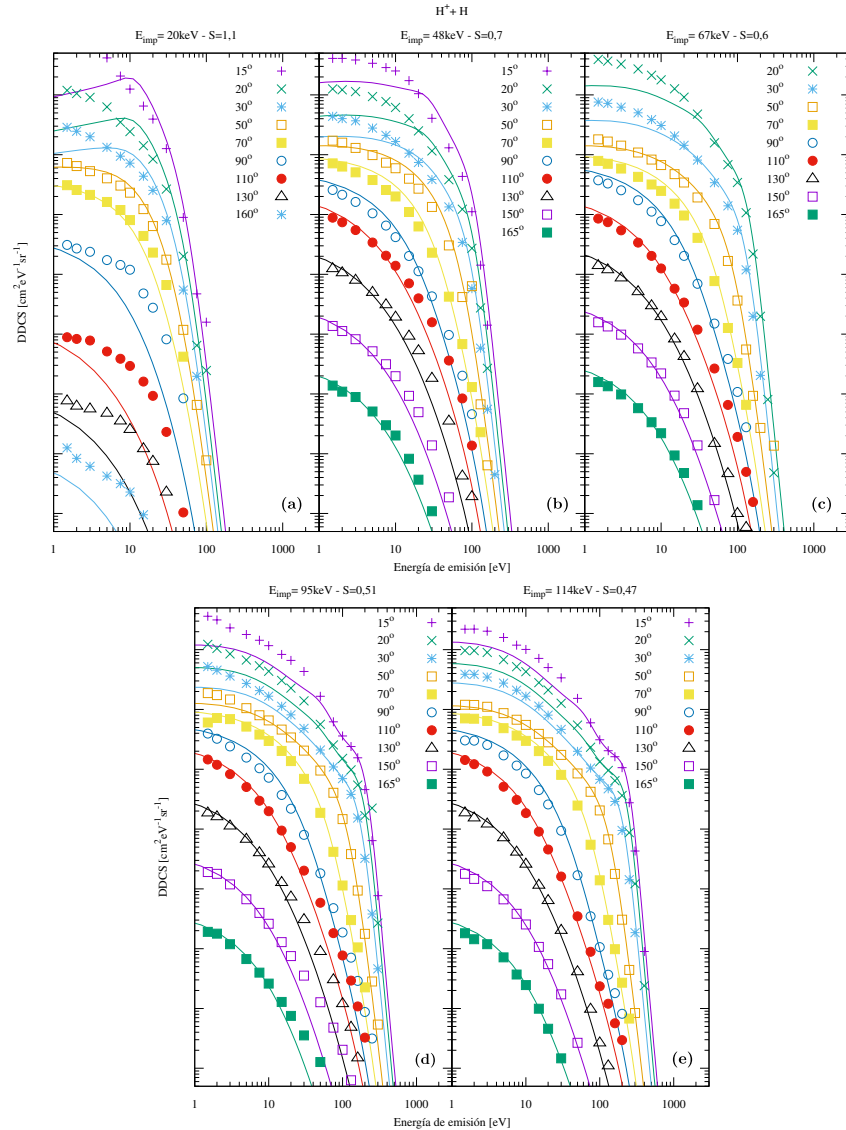


Figura 3.1: Secciones eficaces doble diferencial en función de la energía del electrón emitido en la ionización de H por colisión de H^+ a energías de impacto de 20 keV/u (a), 48 keV/u (b), 67 keV/u (c), 95 keV/u (d) y 114 keV/u (e).

En cada caso se graficaron los datos experimentales (puntos) y los resultados teóricos obtenidos con CDW-EIS (líneas) para distintos ángulos de emisión. Algunas conjuntos de datos (teóricos y experimentales) fueron multiplicadas por algún escalar arbitrario a fin de mejorar su visualización. Las mediciones experimentales fueron reportadas por Kerby *et al.* (1995) en [37].

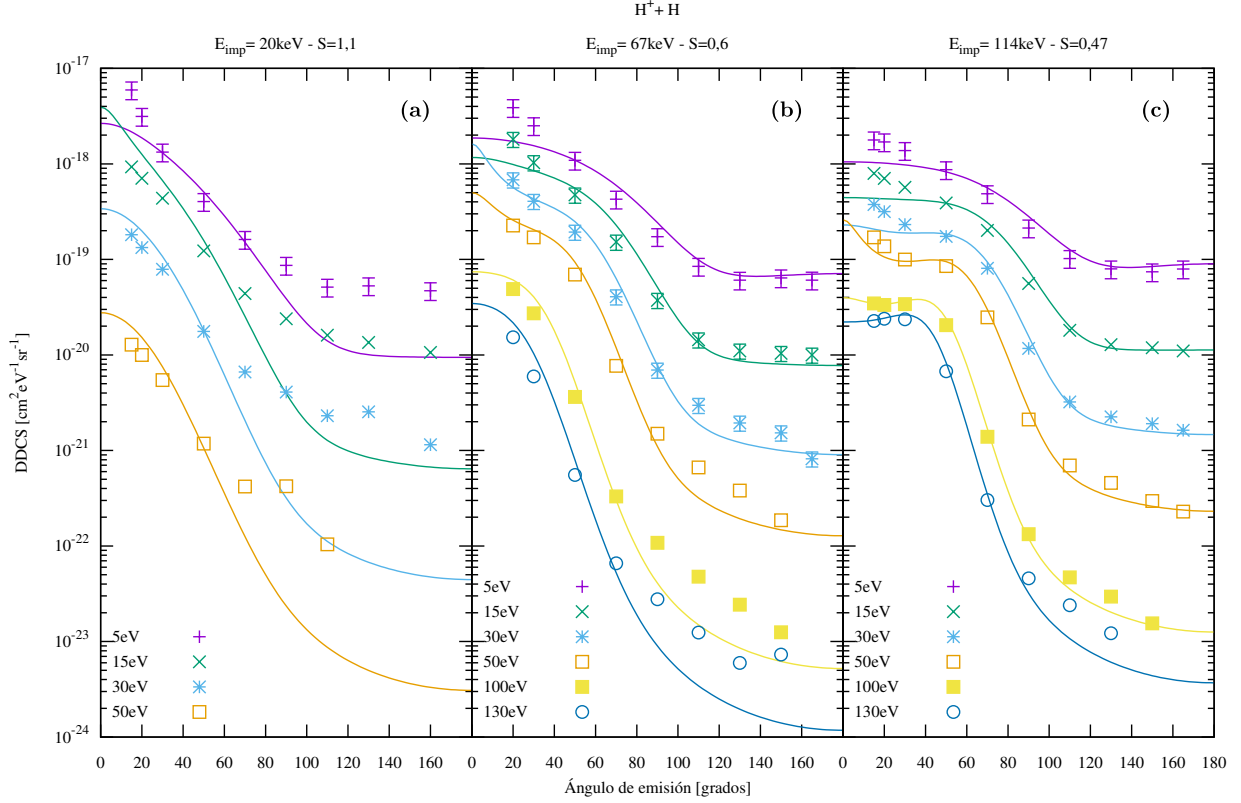


Figura 3.2: Secciones eficaces doble diferencial en función del ángulo de emisión del electrón emitido en la ionización de H por colisión de H^+ a energías de impacto de 20 keV/u (a), 67 keV/u (b) y 114 keV/u (c). En cada caso se graficaron los datos experimentales (puntos) y los resultados teóricos obtenidos con CDW-EIS (líneas) para las energías de emisión indicadas. Las barras de error que se muestran sirven de referencia para el resto de las mediciones. El porcentaje de error y los datos experimentales fueron reportadas por Kerby *et al.* (1995) en [37].

En general, de las Figs.(3.1) y (3.2) se observa que a mayores energías de impacto las predicciones teóricas se acercan más a los datos experimentales. El parámetro Z_P/v es también conocido como “perturbation strength” (fuerza perturbativa) ya que su valor está directamente relacionado con el peso de los factores perturbativos \mathcal{L}_i^+ y \mathcal{L}_f^- utilizados en las funciones de onda distorsionadas. Si $Z_P/v \rightarrow 0$, éstos factores tienden a valer uno, lo que implica que la interacción electrón activo-proyectil no resulta significativa y las funciones de onda tienden a aquellas utilizadas en modelos de un centro como lo es la Primera Aproximación de Born (“FBA”, según sus siglas en inglés). Por otro lado, si $Z_P/v \gtrsim 1$ la interacción del proyectil con el resto del sistema se vuelve ya más significativa, desafiando el rango de validez de la hipótesis perturbativa del modelo de onda distorsionada [8, 10]. Por ello, en términos del parámetro $S = Z_P/v$, observamos en las Figs.(3.1) y (3.2) que a medida que éste asume valores cada vez más chicos que uno el modelo brinda mejores resultados.

Por su parte, en las distribuciones angulares tanto teóricas como experimentales de la Fig.(3.2) se puede observar una asimetría de varios órdenes de magnitud en la emisión electrónica respecto a 90° , con una mayor emisión electrónica en ángulos pequeños; además es mayor a medida que aumenta la energía del electrón emitido.

Esta asimetría ha sido profundamente estudiada en otros trabajos [8–10, 38] donde se demuestra la importancia de incluir modelos de dos centros en el cálculo de secciones eficaces a energías de impacto intermedias (donde las distorsiones debidas al proyectil son significativas pero no muy grandes) o a altas energías de impacto pero en ángulos de emisión cercanos a cero grados. En

síntesis, los trabajos citados muestran que un modelo de un centro –como el mencionado FBA– no logra predecir correctamente la anisotropía angular en la emisión electrónica para energías de impacto intermedias, dando lugar a pensar que es debido a la interacción atractiva con el proyectil que los electrones tienden a concentrarse en ángulos pequeños. No obstante, resulta oportuno aclarar que la emisión de dos centros no es la única fuente de tal anisotropía porque para energías de emisión correspondientes al pico binario los modelos de un centro sí logran predecir una mayor DDCS a ángulos menores que 90° .

Si bien en las gráficas de la Fig.(3.1) no se aprecia el pico característico de los electrones binarios, sí podemos ver el perfil de rápido descenso de la DDCS que sucede luego del mismo. Más aún, por ser producto de colisiones elásticas contra el proyectil, mediante leyes de conservación se deduce que el mismo se centraría a energías $\varepsilon_{BE} = 2v^2 \cos^2 \theta_k$, lo que implica que para energías de impacto de 67 y 114 keV/u el “pico” se encuentra a energías cercanas a 150 y 250 eV respectivamente. Esto quiere decir que para las energías de emisión de las gráficas (b) y (c) de la Fig.(3.2) el origen de las anisotropías angulares se debería casi en su totalidad a la emisión de dos centros. De esta manera, se puede pensar que el incremento de la anisotropía con la energía de emisión se debe a que a cuanto más parecida a la velocidad del proyectil sea la de un electrón emitido a $\theta_k < 90^\circ$, más cerca del proyectil se trasladará y por tanto la atracción hacia éste será mayor. Por ejemplo, en el fenómeno de captura electrónica al continuo (§1.1) aquellos electrones emitidos en ángulos cercanos a 0° con un momento $k \sim v$ se trasladan a la par del proyectil, siendo entonces más atraídos que aquellos emitidos en la misma dirección pero con momento $k \ll v$.

Respecto a la captura electrónica al continuo, en las curvas correspondientes a la DDCS para un ángulo de emisión de 15° de la Fig.(3.1) puede apreciarse una protuberancia centrada en energías correspondientes a electrones emitidos con velocidades similares a las del proyectil. Sin embargo, esta predicción no puede contrastarse con los datos experimentales debido a que la altura relativa de dicha elevación, con respecto a la curva, es comparable con la incerteza de la medición, cuya barra de error es comparable con el tamaño del punto y por tanto fue omitida en la gráfica.

Por otra parte, vale remarcar que de las curvas para ángulos menores a 90° de la Fig.(3.1) ninguna muestra una estructura en forma de pico a las energías en que el pico binario se centraría. En su lugar vemos, para la misma energía, un recodo justo antes de que los valores de DDCS comiencen a decaer. A su vez, a medida que el ángulo de emisión se incrementa, esta estructura se mueve hacia energías más bajas. Claramente se trata del pico binario solo que los efectos de emisión a dos centros, para esa región del espectro, son tan significativos como la emisión de electrones debida a encuentros binarios.

A continuación presentamos un nuevo sistema de colisión con el cual podremos extender el análisis respecto al pico binario.

3.1.2. Carbono desnudo sobre Hidrógeno

El sistema de colisión $C^{6+} + H$ se diferencia del anterior $H^+ + H$ prácticamente por un incremento en la carga nuclear Z_P del proyectil. En base al parámetro de Sommerfeld, Z_P/v , es fácil notar que el uso de proyectiles desnudos múltiplemente cargados acentúa –respecto al uso de protones– la perturbación sobre el electrón activo. Por lo tanto, para estudiar el sistema $C^{6+} + H$ con CDW-EIS resulta preciso analizar colisiones a mayores velocidades de impacto v para así conservar la validez de las hipótesis perturbativas.

En las gráficas de la Fig.(3.3) se muestran las distribuciones en función de la energía de emisión de las DDCS para la ionización simple de un blanco de hidrógeno por impacto de C^{6+} a velocidades v de 6,4 a.u. (1 MeV/u) y 10 a.u. (2,5MeV/u). Las curvas se corresponden con el cálculo teórico con CDW-EIS mientras que los datos experimentales fueron publicados por Tribedi *et al.* (1998 y 2001)

en [39, 40].

En primer lugar podemos ver que los resultados teóricos están en buen acuerdo con las mediciones experimentales en todo el rango de energías de emisión. Luego, en las gráficas a y c podemos observar una estructura de pico ubicada a altas energías, o más específicamente a energías correspondientes con electrones de momento $k = 2v \cos \theta$, lo que deja en claro que se trata del pico binario. Comparando las gráficas a y b podemos notar cómo a una misma energía de impacto (1 MeV/u) la posición del pico se corre a menores energías conforme aumenta el ángulo de emisión, en este caso, de 45° a 60° . De hecho, en la gráfica b no es posible distinguir el pico binario debido a que se encontraría en una región donde la contribución a la DDCS por parte de la emisión de dos centros es comparable al aporte de los encuentros binarios. No obstante, en la gráfica c se observa que para el mismo ángulo de emisión (60°) pero a mayor energía de impacto (2,5 MeV/u en lugar de 1 MeV/u) se logra volver a distinguir la estructura del pico binario, lo que se explica por un corrimiento hacia más altas energías de los electrones binarios al mismo tiempo que habría una atenuación de los efectos de dos centros debido al incremento de velocidad del proyectil.

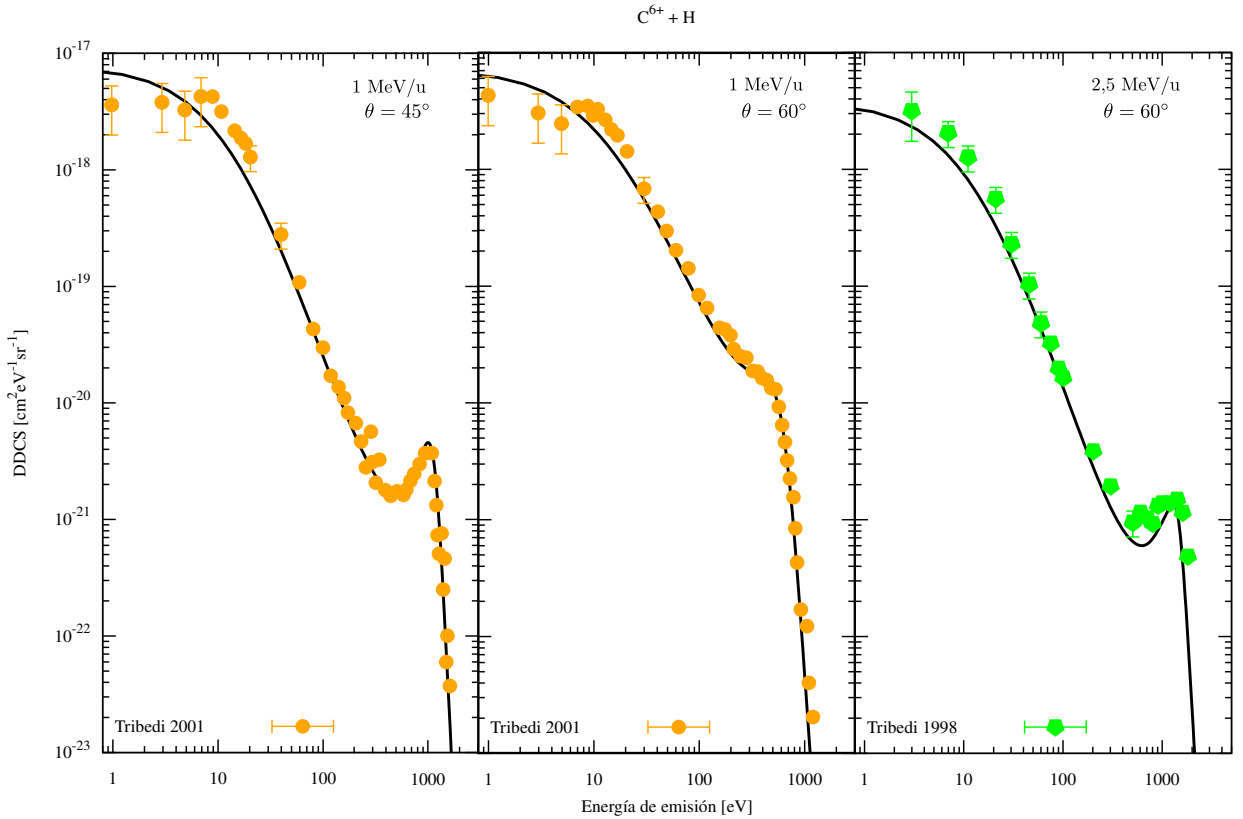


Figura 3.3: Secciones eficaces doble diferencial en función de la energía del electrón emitido en la ionización de H por colisión de C^{6+} a energías de impacto de 1 MeV/u (a y b) y 2,5 MeV/u (c) para ángulos de emisión de 45° (a) y 60° (b y c). Las barras de error que se muestran sirven de referencia para el resto de las mediciones. Los datos experimentales (puntos e incertezas) fueron reportados por Tribedi *et al.* (1998, 2001) en [39, 40] y los resultados teóricos fueron calculados con CDW-EIS (líneas).

3.1.3. Multiplemente cargados sobre Helio

Para poder apreciar el efecto del incremento de la carga nuclear Z_P de los proyectiles a la ionización del blanco, es preciso comparar las DDCS de ionización simple de un mismo objetivo para una serie de proyectiles desnudos a la misma energía por unidad de masa. Por ello, en la Fig.(3.4) se presentan algunas DDCS de ionización simple en función del ángulo de emisión correspondientes a colisiones de los proyectiles C^{6+} , O^{8+} y Ne^{10+} , a energía de impacto de 5 MeV/u, sobre un blanco de Helio. Los puntos se corresponden con mediciones experimentales, realizadas por Stolterfoht y colaboradores, publicadas por Stolterfoht *et al.* (1995) en [38] para los proyectiles C^{6+} y Ne^{10+} y por Fainstein *et al.* (1997) en [41] para O^{8+} . Las curvas se corresponden con el cálculo teórico con CDW-EIS utilizando funciones de Slater para la descripción del estado ligado del electrón activo y la carga efectiva propuesta por Belkić (1978) para el estado del continuo.

Se ha decidido ubicar los resultados del sistema $O^{8+} + H$ en otra gráfica, por separado, a fin de no dificultar la visualización del resto de los resultados. Además, las barras de error que se muestran para el sistema en cuestión han de servir de referencia para visualizar el grado de incerteza del resto de las mediciones que se muestran, según lo reportado en [38]. Por otra parte, las energías de emisión de cada conjunto de datos fueron elegidas a fin de cubrir tres órdenes de magnitud del espectro de emisión, a la vez que resultarían comparables entre sistemas de colisión.

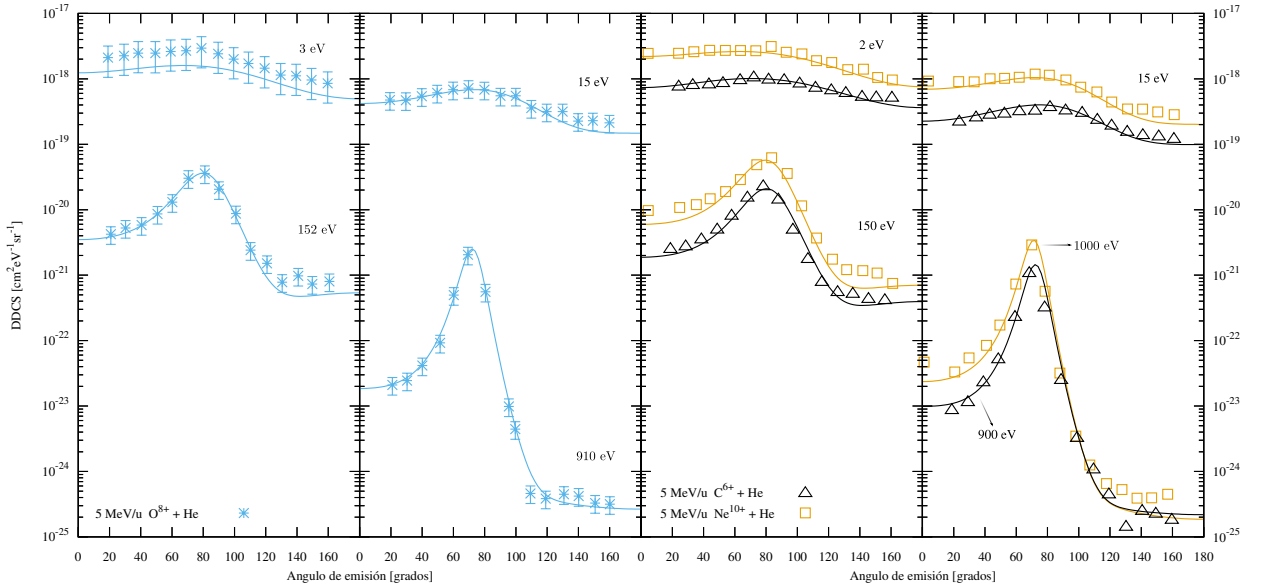


Figura 3.4: Secciones eficaces doble diferencial de ionización en función del ángulo de emisión para distintos proyectiles desnudos en colisión con Helio a 5 MeV/u. Las líneas sólidas se corresponden con el cálculo teórico CDW-EIS mientras que los puntos son mediciones experimentales reportadas por distintos autores, a saber: Stolterfoht *et al.* (1995) [38] las mediciones con C^{6+} y Ne^{10+} ; Fainstein, *et al.* (1997) [41] las mediciones con O^{8+} . Las barras de error que se indican para el sistema $O^{8+} + H$ son representativas para las mediciones de las otras gráficas.

Como se puede observar en las gráficas de la Fig.(3.4), el modelo CDW-EIS representa con excelente acuerdo la evidencia empírica, la cual muestra un incremento de la DDCS conforme aumenta la carga del proyectil en toda la amplitud angular con la excepción para electrones de altas energías ($\varepsilon_k \sim 1000$ eV), donde en ángulos mayores a 90° –región de backscattering– la DDCS pareciera no depender de la carga del proyectil. Esta última observación está en completa conformidad con lo esperado ya que los electrones más energéticos emitidos en sentido contrario a la velocidad del pro-

yectil son los menos influenciados por el campo de éste. En su lugar, los electrones de backscattering de alta energía serían producto de una fuerte interacción con el núcleo del blanco luego de haber colisionado éstos con el proyectil [10]. Por lo tanto, al interactuar principalmente con el blanco, es la carga Z_T la que importa; entonces por ser Z_T la misma, tiene sentido que a altas energías las DDCS para backscattering no dependan de la carga del proyectil.

Vale mencionar que para energías de impacto de 5 MeV/u los proyectiles impactan con una velocidad de 14 a.u. de manera que el pico binario estaría ubicado alrededor de $\varepsilon_{BE} = 10000$ eV en el espectro de emisión electrónica. Esto significa que podemos no esperar un aporte significativo de las colisiones binarias para las energías de emisión consideradas en las gráficas de la Fig.(3.2).

3.1.4. Protón sobre Argón

En esta sección presentamos los resultados teóricos obtenidos para la ionización simple de un átomo de Argón por impacto de protones de distinta energía. La elección de este sistema en particular se debe a la vasta cantidad de mediciones de secciones eficaces doble diferencial disponibles, las cuales fueron recopiladas por Rudd *et al.* (1979) en [42], para energías de impacto que van desde los 5 keV/u hasta los 5MeV/u. Mediante este sistema se tiene la posibilidad contrastar experimentalmente el modelo teórico para la ionización simple de un blanco multielectrónico con un gran número de electrones distribuidos en varios orbitales, a saber $\text{Ar}:1s^22s^22p^63s^23p^6$.

Recordamos que el cálculo teórico llevado a cabo con CDW-EIS en su versión prior incluye la interacción del electrón activo con los electrones pasivos del blanco en la descripción del estado inicial ligado mediante funciones de onda de Roothaan-Hartree-Fock desarrolladas en una base de orbitales de Slater. El estado final del continuo del blanco, por su parte, es aproximado por una solución hidrogénica pero aplicando la carga efectiva de Belkić. Además, se considera que la DDCS de ionización simple del blanco se compone de la suma de las ddcS de cada orbital ponderada por la cantidad de electrones equivalentes sobre la degeneración del estado.

En la Fig.(3.5) se encuentran graficadas las DDCS de ionización simple en función de la energía de emisión para la colisión de protones de 300 keV/u ($S=0,3$) sobre Ar para ángulos de 10, 15, 20 y 30 grados. En ellas es posible observar, en primer lugar, un excelente acuerdo entre las predicciones del modelo teórico CDW-EIS y las mediciones experimentales como así también entre las propias mediciones de diferentes grupos de investigación en la gráfica (d). Luego, en las gráficas (a) y (b) se aprecia, tanto teórica como experimentalmente, una elevación o recodo a energías de 150 keV. A su vez, esta estructura desaparece en la gráfica (d) correspondiente a la emisión a 30° . Si bien el cálculo teórico predice la gradual disminución de su elevación relativa al resto de la curva a medida que aumenta el ángulo de emisión (gráficas (a)-(c)), la incerteza de las mediciones no permite –a simple vista– dar cuenta de ello, a excepción de la gráfica (d). No obstante, con tratarse de una elevación presente solo a ángulos pequeños y centrada sobre energías de emisión correspondiente con electrones de velocidad similar a la del proyectil alcanza para concluir que tal estructura es consecuencia del pico de captura electrónica al continuo.

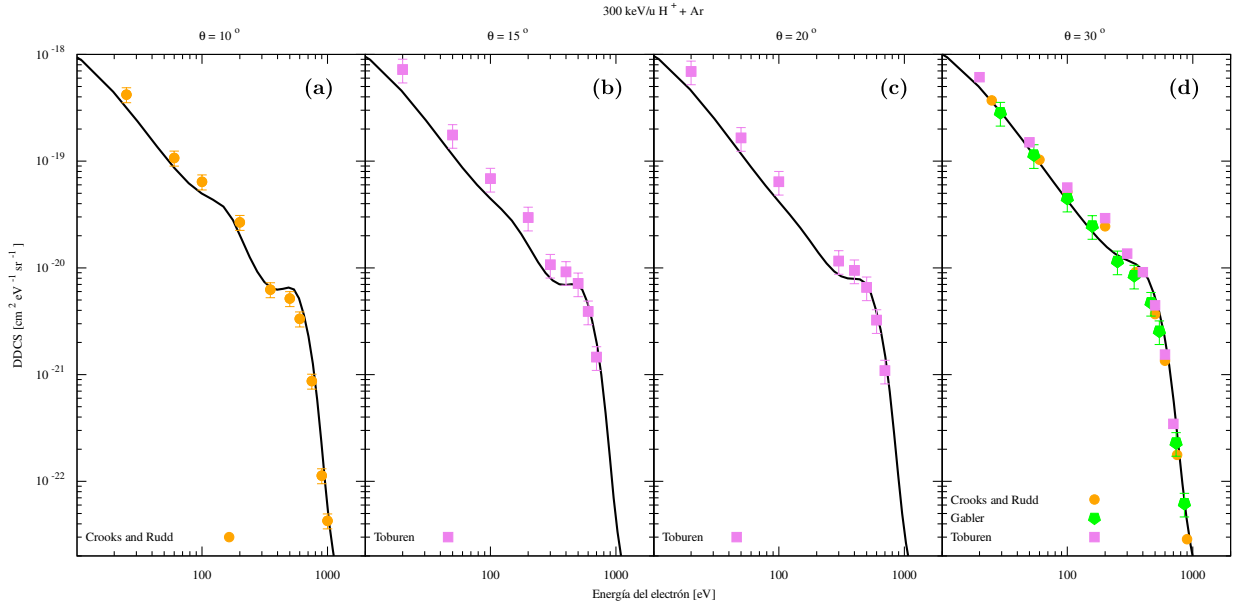


Figura 3.5: Secciones eficaces doble diferencial de ionización del sistema de colisión $300\text{keV/u H}^+ + \text{Ar}$ para emisión a distintos ángulos. Las líneas sólidas se corresponden con el cálculo teórico, con CDW-EIS prior, de la DDCS total y los puntos son mediciones experimentales reportada por distintos autores en [42].

Para agregar a lo que se observa de la Fig.(3.5) hay que decir que son llamativas las mediciones a 200 eV reportadas por Crooks, Rudd y Toburen en la gráfica (d) siendo levemente mayores que las DDCS medidas por Gabler para energías aledañas (150 y 250 eV); el gran acuerdo entre las mediciones de cada grupo en todo el rango de energías y que dos grupos distintos midieran una DDCS relativamente mayor a la esperada en el espectro de emisión a 30° , hacen difícil sospechar de algún tipo de error. En efecto, observemos las gráficas de las Figs.(3.6) y (3.7) donde se presentan las DDCS en función de la energía de emisión para un ángulo fijo de 30° y 70° , respectivamente, y a energías de impacto de 250, 500, 2000 y 5000 keV (a-d); resulta evidente que este pico presente a 200 eV debe ser causa de algún mecanismo de ionización no contemplado por el modelo CDW-EIS y que aporta electrones con energía muy bien definida alrededor de los 200 eV.

En las gráficas de la Fig.(3.8) se muestran las DDCS en función del ángulo de emisión para energías de impacto de 2 MeV/u y 4,2 MeV/u. En ellas podemos apreciar que el pico observado a 200 eV en las gráficas (c) y (d) de las Figs.(3.6) y (3.7) es observable en toda la amplitud angular. Además, en base a la gráfica (b) de la Fig.(3.8) podríamos intuir que es isotrópico, ya que al aumentar la energía de impacto –respecto a la gráfica (a)– las contribuciones de dos centros a la emisión electrónica son menos significativas ($S = 0,1$ en (a) y $S = 0,07$ en (b)) y la contribución a 200 eV tiende a ser isotrópica.

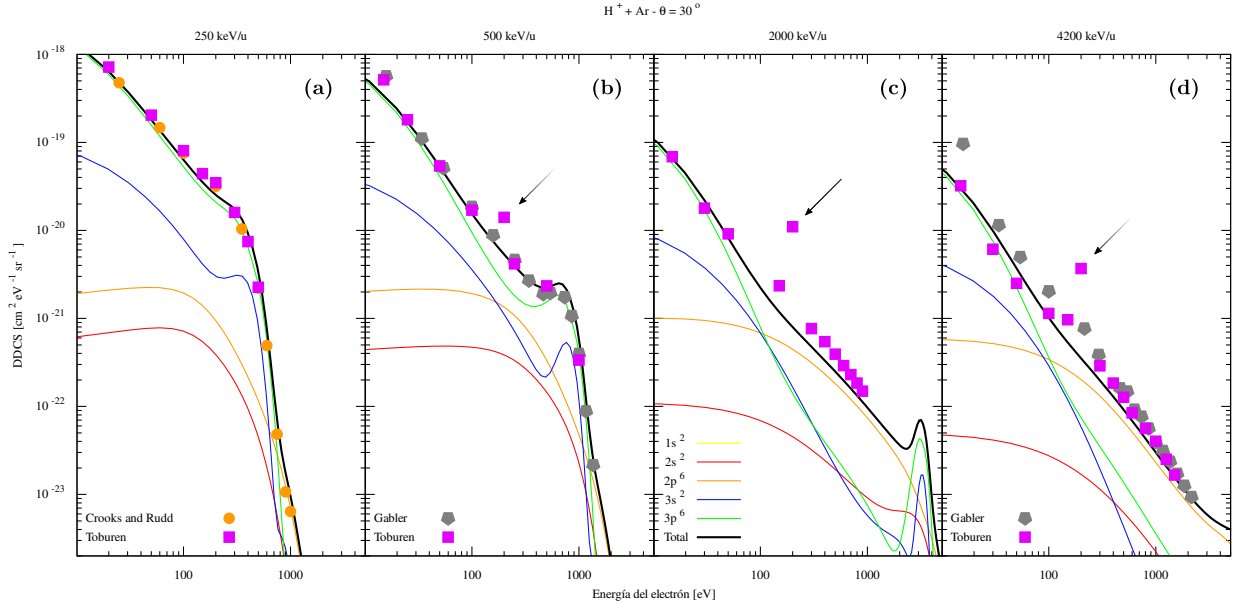


Figura 3.6: Secciones eficaces doble diferencial de ionización, a distintas energías de colisión, del sistema $H^+ + Ar$ para emisión a 30° . Las líneas sólidas se corresponden con el cálculo teórico, con CDW-EIS prior, de la DDCS total como también de la ddcS correspondiente a cada orbital del blanco (la curva correspondiente al orbital $1s$ queda fuera de escala con valores menores a 10^{-24}). Los puntos son mediciones experimentales reportadas por distintos autores en [42].

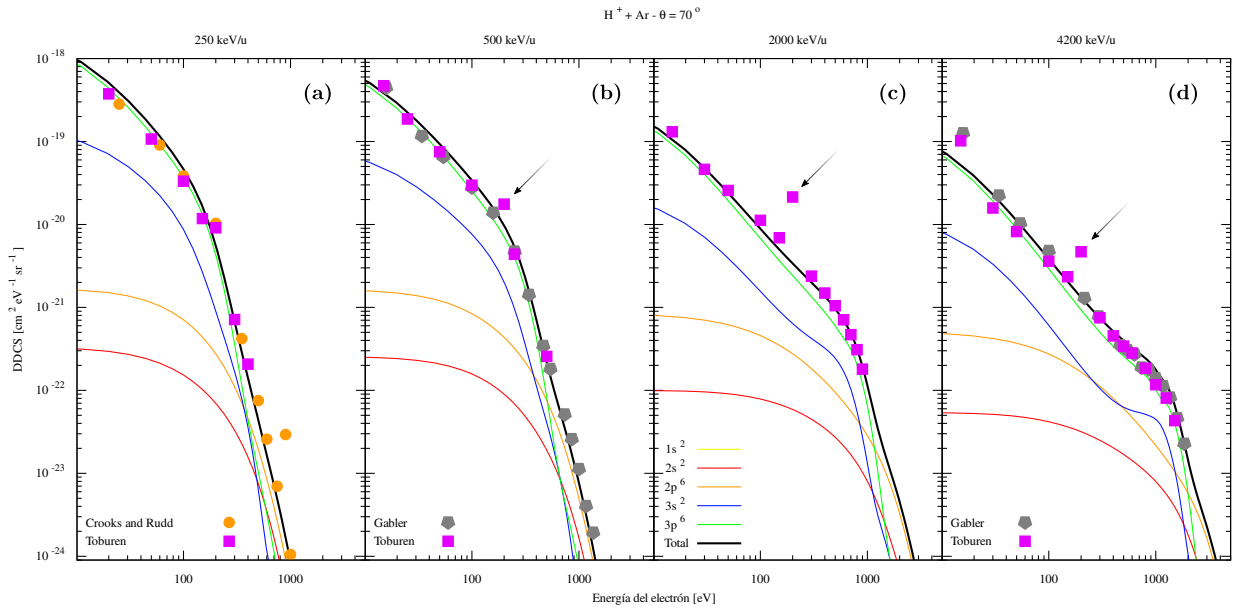


Figura 3.7: Secciones eficaces doble diferencial de ionización, a distintas energías de colisión, del sistema $H^+ + Ar$ para emisión a 70° . Las líneas sólidas se corresponden con el cálculo teórico, con CDW-EIS prior, de la DDCS total como también de la ddcS correspondiente a cada orbital del blanco (la curva correspondiente al orbital $1s$ queda fuera de escala con valores menores a 10^{-24}). Los puntos son mediciones experimentales reportadas por distintos autores en [42].

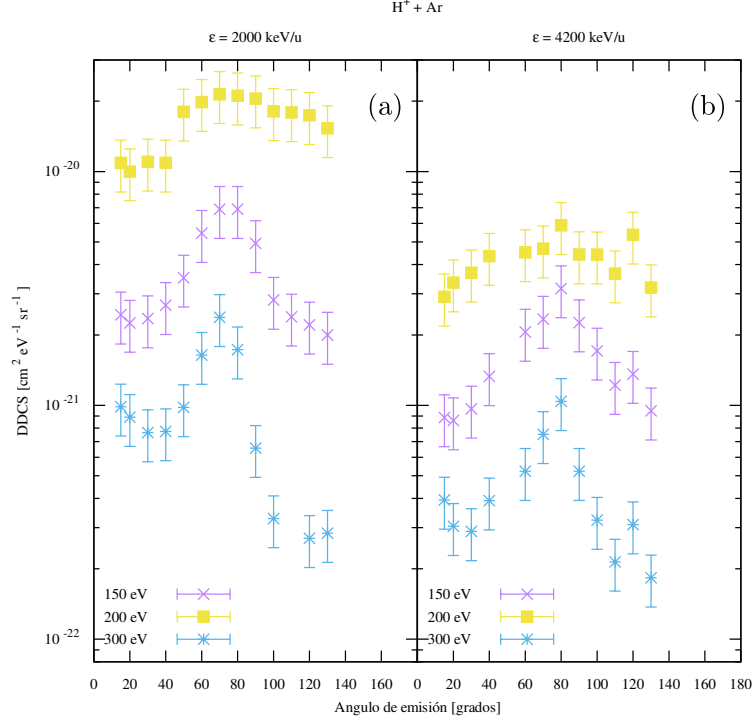


Figura 3.8: Secciones eficaces doble diferencial de ionización en función del ángulo de emisión del sistema $H^+ + Ar$ a energías de impacto de 2 MeV/u (a) y 4,2 MeV/u (b) y energías de emisión de 150, 200 y 300 keV. Los puntos son mediciones experimentales reportadas en [42].

Entonces, por la naturaleza isotrópica del pico, su energía bien definida alrededor de 200 eV y debido a que su causa no está contemplada por un modelo de dos centros como el CDW-EIS, podemos suponer que dicha estructura se relaciona con la conocida emisión de electrones Auger, a saber, luego de la ionización de algún electrón de las capas internas del átomo de Ar, otro electrón de una capa más externa ocupa esa vacancia disminuyendo su energía mediante la emisión de un fotón que es absorbido por un tercer electrón y, en consecuencia, también resulta eyectado del blanco. De hecho, según lo reportado por Schneider *et al.* (1976) en [43], podemos asegurar que el pico en cuestión se corresponde con electrones Auger originados por transiciones del tipo LMM, esto es, mediante la ionización de un electrón de la capa L, uno de la capa M ocupa la vacancia y otro de la capa M resulta también emitido.

La anterior conclusión nos permite encontrar una muy buena concordancia entre la ionización de la capa L (necesaria para desencadenar la transición Auger) y la posición del pico Auger Ar-LMM. Si observamos nuevamente las Fig.(3.6) y (3.7) es notable cómo la amplitud del pico Auger aumenta a medida que la contribución a la DDCS total por parte del orbital $2p$ se hace cada vez más significativa respecto de la ddc de los orbitales de la capa M. Esta observación, junto con el global acuerdo teórico-experimental de la DDCS total, es un buen indicio de la validez de las hipótesis involucradas en la descripción teórica de la ionización simple de átomos multielectrónicos.

Para finalizar, en la Fig.(3.9) se visualizan las secciones eficaces totales para la ionización simple del Ar por colisión de protones. Las mismas se encuentran graficadas en función del parámetro de Sommerfeld $S = Z_P/v$ y se corresponden con energías de impacto que van desde los 5 keV/u hasta los 5000 keV/u. La curva sólida es el cálculo teórico realizado con CDW-EIS y los puntos son integraciones numéricas de secciones eficaces doble diferenciales medidas en forma directa, que se encuentran publicadas en [42]. La gráfica en cuestión permite ver de manera clara cómo a medida

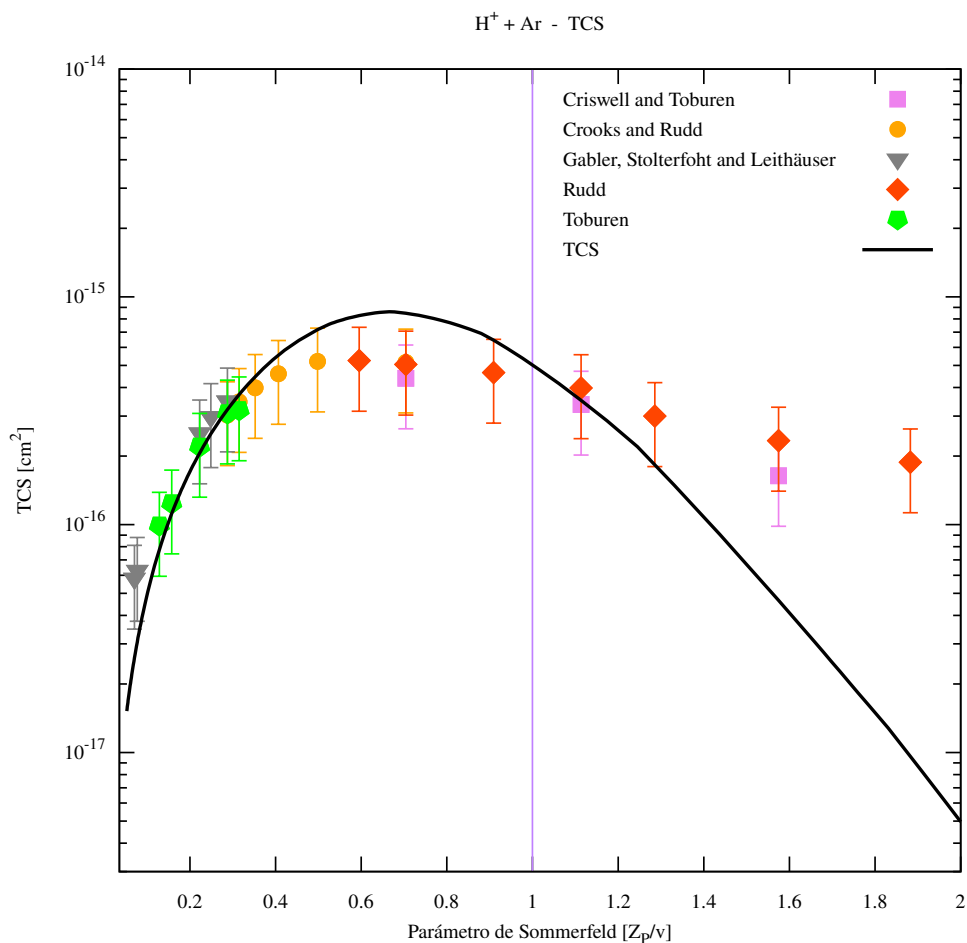


Figura 3.9: Secciones eficaces totales para la ionización simple: comparación entre cálculo teórico con CDW-EIS prior y la integración numérica de resultados experimentales reportadas por distintos autores en [42].

que el parámetro de Sommerfeld disminuye las predicciones teóricas logran reproducir los resultados experimentales, lo que se debe –como ya fue mencionado antes– a la mayor validez de la hipótesis perturbativa del modelo de onda distorsionada.

3.1.5. Partículas alfa y Carbono desnudo sobre moléculas de agua

En la gráfica de la Fig.(3.10) se muestran resultados teóricos y experimentales para la distribución angular de las DDCS de ionización simple de moléculas de agua por impacto de proyectiles He^{2+} (partículas α) a energías de 6 MeV/u. El cálculo con CDW-EIS se llevo a cabo suponiendo las ddc de los orbitales moleculares como una suma de ddc de orbitales atómicos ponderadas por los factores de ocupación electrónica, tal como se describió en §2.1.4. El mismo método fue aplicado para las DDCS de ionización simple de H_2O por impacto de iones C^{6+} a 6 MeV/u, cuyos resultados teóricos se muestran junto con mediciones directas en la gráfica de la Fig.(3.11). En general se presenta un muy buen acuerdo entre las predicciones teóricas y la evidencia experimental, lo que indica la pertinencia de las aproximaciones realizadas en pos de mantener expresiones analíticas para los estados ligados y del continuo del electrón activo. No obstante, la predicción empeora para la región de backscattering

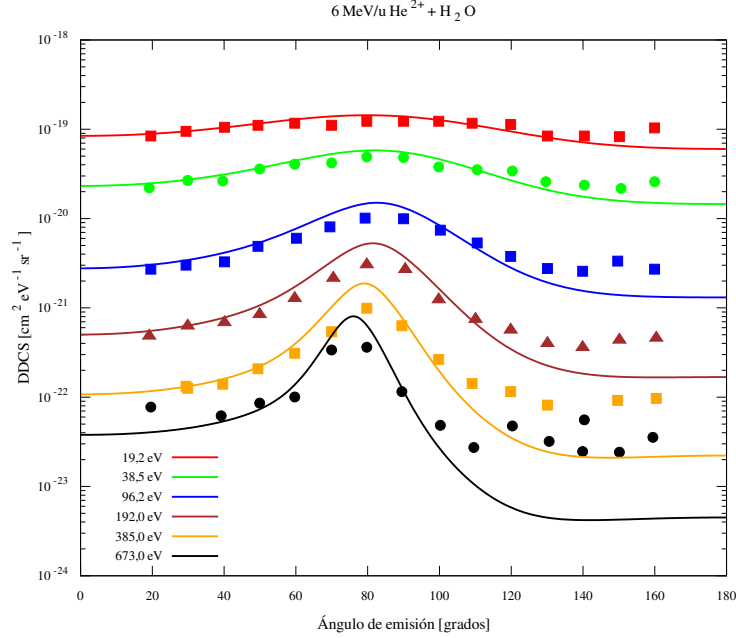


Figura 3.10: Secciones eficaces doble diferencial en función del ángulo de emisión para ionización simple de moléculas de agua por impacto de partículas alfa a 6 MeV/u. Las curvas son resultados teóricos obtenidos con CDW-EIS y los puntos son resultados experimentales publicados en [44].

de la Fig.(3.11).

Comenzando por la Fig.(3.10), podemos observar distribuciones relativamente isotrópicas para electrones de baja energía que tienden a pronunciarse alrededor de 90° a medida que la energía aumenta. Además, a partir de la curva de 96 eV puede apreciarse que mientras que los resultados teóricos predicen distribuciones cada vez más asimétricas, las mediciones experimentales, por el contrario, no muestran diferencias significativas entre las emisiones a 0° y 180° . Visto de otro modo, mientras que a $\theta \leq 90^\circ$ hay un buen acuerdo teórico-experimental, a $\theta \sim 180^\circ$ los cálculos subestiman las mediciones. Por último, es notable también un corrimiento con la energía hacia ángulos más bajos del pico originalmente visible a alrededor de 90° .

La emisión de electrones de baja energía es producto de las colisiones blandas, donde los electrones son inicialmente expedidos a 90° debido a débiles interacciones con el proyectil, por lo que pronto son dispersados por las cargas nucleares. A medida que la energía de emisión aumenta, la dispersión de estos electrones disminuye formándose un pico alrededor de 90° . Luego, dado que mayores transferencias de momento implican parámetros de impacto más chicos las colisiones binarias empiezan a adquirir un rol cada vez más importante. Por argumentos de conservación puede demostrarse que de las colisiones binarias se emiten electrones con momento $k = 2v \cos \theta$, donde v es la velocidad de impacto y θ el ángulo de emisión. A 80° , por ejemplo, las colisiones binarias aportan electrones de ~ 400 eV. Esto refleja el corrimiento del pico originalmente observado a 90° hacia ángulos menores a medida que la energía aumenta.

Con respecto a las discrepancias entre el resultado teórico y el experimento para ángulos de backscattering, hay que considerar que la dispersión “hacia atrás” del electrón es producto de una fuerte interacción con la carga nuclear del blanco una vez ionizado. En este caso el blanco es una molécula triatómica cuyo estado del continuo es aproximado por una función hidrogénica con una carga efectiva tipo Belkić $\lambda = n\sqrt{-2\varepsilon_i}$, donde ε_i es la energía del orbital molecular y n es el número cuántico principal del orbital atómico del que fuera emitido el electrón (recordemos que primero se

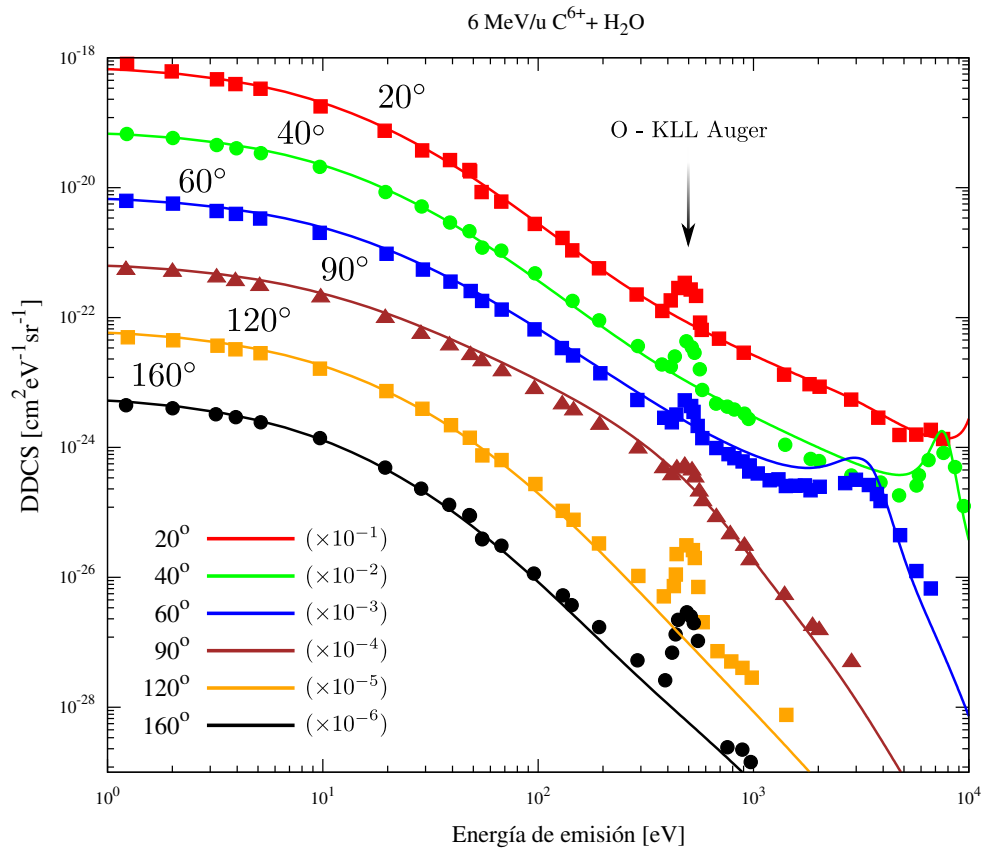


Figura 3.11: Secciones eficaces doble diferencial en función de la energía de emisión para ionización simple de moléculas de agua por impacto de Carbono desnudo a 6 MeV/u. Las curvas son resultados teóricos obtenidos con CDW-EIS y los puntos son resultados experimentales publicados en [45]. Es importante remarcar que para una mejor visualización, cada conjunto de datos fue escalado por el factor que se indica en la leyenda.

calculan las ddc's atómicas y luego se suman para obtener la ddc's del orbital molecular). A grandes distancias, la reducción de la molécula de agua a una descripción de un solo núcleo de carga efectiva es razonable si comparamos al oxígeno, en magnitud y carga nuclear, frente a los hidrógenos. En efecto, a bajas energías el modelo arroja resultados razonables en la región de backscattering, pero para electrones más energéticos en interacción cercana con los centros de la molécula las predicciones empeoran. Además en [25], Tachino *et al.* ha probado una descripción de mayor complejidad para el estado ligado pero con la misma aproximación hidrogenica para el estado del continuo molecular y sus resultados con CDW-EIS prior no muestran grandes diferencias con una mejor descripción del estado ligado. Por lo tanto, para mejorar las predicciones para ángulos de backscattering sería oportuno probar con descripciones más completas del estado del continuo molecular.

Por otra parte, en la Fig.(3.11) se muestran las DDCS de ionización simple en función de la energía de emisión para el sistema 6 MeV/u $C^{6+} + H_2O$ para distintos ángulos de emisión. En ellas es posible observar tanto la presencia del pico binario a altas energías y bajo ángulo, como su corrimiento a menores energías a medida que aumenta el ángulo. No obstante, la característica más llamativa es el pico alrededor de ~ 500 eV, presente en todos los ángulos de emisión considerados. Este pico coincide con la emisión de electrones KLL-Auguer del átomo de oxígeno, donde un electrón de la capa L ocupa una vacancia creada en el orbital 1s provocando la emisión de un segundo electrón pero de la capa L. Esto habla de la fuerte presencia del átomo de oxígeno en la molécula de agua

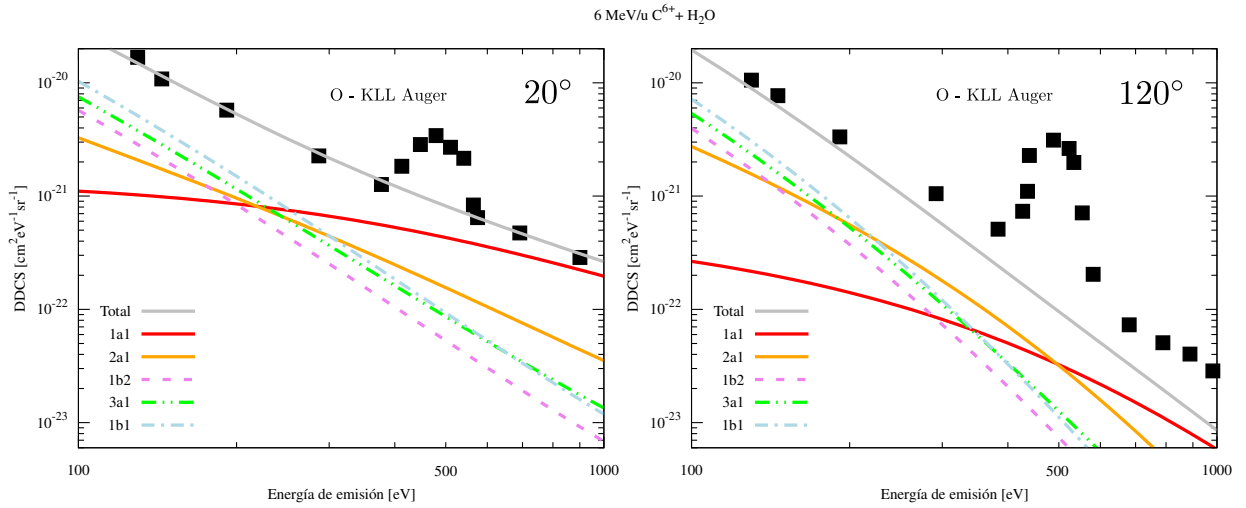


Figura 3.12: Contribución de los orbitales moleculares a la Sección eficaz doble diferencial en función de la energía de emisión para ionización simple de la molécula de agua por impacto carbono desnudo a 6 MeV/u a ángulos fijos de 20° y 120° . Las curvas son resultados teóricos obtenidos con CDW-EIS y los puntos son resultados experimentales publicados en [45].

donde, en efecto, se tiene que el orbital molecular $1a_1$ básicamente coincide con el orbital atómico $1s$ del oxígeno (véase la Fig.(2.4)).

Tal como hicimos para el blanco de Argón (Figs.(3.6) y (3.7)), en las gráficas de la Fig.(3.12) se muestran las contribuciones de los distintos orbitales moleculares a la DDCS total. Nuevamente se observa que el modelo predice una mayor ionización de las capas internas –necesaria para la emisión Auger– en las regiones del pico Auger. No obstante, claro está, que el modelo no contempla mecanismos de ionización Auger y por tanto no logra predecir tal pico en el espectro de emisión.

3.2. Projectiles vestidos

En esta sección presentamos resultados teóricos, contrastados con datos experimentales, para las DDCS de ionización simple de sistemas de colisión entre proyectiles vestidos y blancos atómicos. En particular analizaremos el impacto de átomos e iones de hidrógeno, helio y litio sobre blancos de helio y moléculas de agua. La energía de ionización del helio es de 24,9 eV; la del hidrógeno, 13,6 eV y la del Li, Li^+ y Li^{2+} resulta de 5, 75,7 y 122,4 eV respectivamente. A energías de impacto de 500 y 1000 keV/u está demostrado por Heil, Mailer y colaboradores en [46–48] que la ionización simultánea del proyectil y del blanco (PTI) aporta significativamente al espectro de emisión electrónica por colisión de hidrógeno y helio neutros sobre blancos de helio. Para proyectiles Li^+ y Li^{2+} , por su parte, también sería esperable la ionización simultánea proyectil-blanco según lo sugieren los resultados de Fregenal *et al.* en [36] (2014). Entonces, como mencionamos en la sección §2.2, junto con la emisión de electrones por ionización del blanco (eTI) y la emisión de electrones por ionización del proyectil (ePI), sería pertinente estudiar la PTI. Sin embargo, vista la rudimentaria estimación de la PTI que podemos por el momento realizar, y considerando como objetivo analizar el efecto de incluir una carga dinámica en el modelado de las distorsiones, decidimos en lo que sigue no sumar a la DDCS total el aporte de la ionización simultánea. Esto último con excepción, claro, de que se indique lo contrario.

Respecto a la carga dinámica \tilde{q} recordemos que ésta modela el apantallamiento de la carga nuclear Z_P del proyectil, por parte de sus N electrones pasivos, de acuerdo al momento transferido al electrón activo. Para la emisión de electrones de alta energía la carga \tilde{q} tiende al valor de la carga nuclear, mientras que para la emisión de electrones de baja energía, \tilde{q} tiende a la carga neta o asintótica $q = Z_P - N$. Ésta carga es la que utilizaremos en las distorsiones a la función de onda del electrón activo. No obstante, dado que tenemos distorsiones en ambos canales, de entrada y de salida, se nos presentan entonces distintos casos a analizar en función de en qué canales elijamos utilizar la carga dinámica \tilde{q} . Para estudiar cada situación, presentaremos resultados donde se mantuvo la carga asintótica en el canal de entrada ν y salida ξ , (ν_0, ξ_0) , junto con: el uso de \tilde{q} únicamente en el canal de salida y manteniendo la carga asintótica en el de entrada (ν_0, ξ_K) ; el uso de \tilde{q} únicamente en el canal de entrada y manteniendo la carga asintótica en el de salida (ν_K, ξ_0) , o bien utilizando \tilde{q} en ambos canales (ν_K, ξ_K) .

3.2.1. Hidrógeno y Helio sobre Helio

En las gráficas de la Fig.(3.13) se muestran las distribuciones en función de la energía de emisión de las DDCS de ionización por colisión de un proyectil de hidrógeno con un blanco de helio a 1 MeV/u para distintos ángulos (b-d). Además se muestra el aporte a la emisión por ionización del blanco (eTI) y del proyectil (ePI). En este caso, sendas contribuciones se calcularon tomando la carga dinámica tanto en el canal de entrada como de salida y la suma de ambas, “FFk=1”, se la muestra junto con aquella que considera la carga asintótica en ambos canales, “FFk=0”. A fines comparativos, en la gráfica (a) se presentan resultados teóricos y experimentales de la ionización simple de un sistema protón-helio a 1,5 MeV/u y $\theta = 0^\circ$.

Las diferencias en la energía de impacto y el ángulo de emisión que hay entre las gráficas (a) y (b) no son tan significativas como para comparar cualitativamente el efecto que tiene sobre el espectro de emisión la presencia de un electrón débilmente ligado al proyectil. Dicho esto, notemos cómo la ionización del proyectil, en el marco de referencia del laboratorio, da lugar a un prominente pico en la DDCS total a energías entre los 500 y 600 eV. La gran amplitud del mismo se condice con la pérdida de electrones por colisiones blandas. En el marco de referencia del proyectil, las colisiones blandas emiten electrones de baja energía cinética y tienen, en general, la mayor sección eficaz. Entonces, al

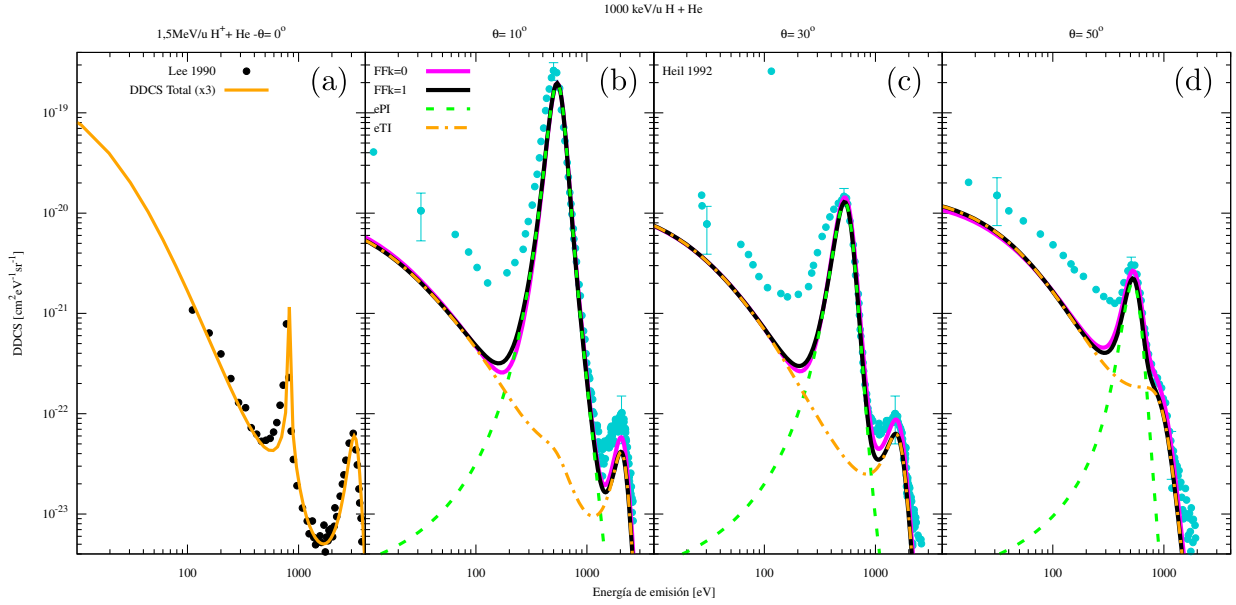


Figura 3.13: Secciones eficaces doble diferencial en función de la energía de emisión para los sistemas: (a) 1,5 MeV/u $H^+ + He$, a un ángulo fijo de 0° y 1 MeV/u $H + He$ a ángulos de 10° (b), 30° (c) y 50° (d). Las curvas son resultados teóricos obtenidos con CDW-EIS. “FFk=0” indica que se utilizó una carga asintótica para las distorsiones del proyectil en ambos canales mientras que “FFk=1” indica el uso de la carga dinámica en ambos canales. Las contribuciones eTI y ePI pertenecen al caso FFk=1. Las mediciones fueron extraídas de [28] (a) y [46] (b-d).

transformar las coordenadas al sistema del laboratorio, la energía cinética de éstos electrones resulta similar a la del proyectil a la vez que su emisión se concentra hacia ángulos menores de 90° . En efecto, en las gráficas (b), (c) y (d) es posible observar cómo la altura del pico de ePI disminuye a medida que aumenta en ángulo de emisión.

En cuanto al efecto de utilizar de una carga asintótica o dinámica, en las gráficas (b), (c) y (d) se ve que ambas curvas teóricas, FFk=0 y FFk=1, convergen a un mismo valor a bajas energías y se diferencian para energías medias y altas. Esto indica que para colisiones de alto parámetro de impacto (bajas energías de emisión) la carga dinámica reproduce los resultados correspondientes a la carga neta o asintótica. Además se observa que en esta región del espectro los resultados experimentales se encuentran subestimados por el modelo CDW-EIS. La causa de esta discrepancia se la atribuimos a la ionización simultánea. Por otro lado, a altas energías de emisión, las diferencias entre las curvas teóricas no resultan significativas en comparación con los datos experimentales. Esto era de esperarse porque 1 MeV/u es una energía de impacto alta para el hidrógeno, de modo que las distorsiones no influyen mucho en las funciones de onda distorsionadas.

Para un mejor análisis del uso de la carga dinámica en los distintos canales, es preciso considerar una menor energía de impacto. Por ello, en las gráficas de la Fig.(3.14) se comparan, para 500 keV/u, las DDCS teóricas y experimentales para un ángulo fijo de 10° y con las distintas elecciones posibles de cargas para las distorsiones de los canales de entrada y salida; lo mismo se muestra en la Fig.(3.15) pero para un ángulo de 30° . Como ya vimos que a bajas energías poco importa qué carga consideremos y para poder ver con mejor resolución el espectro a altas energías, sendos conjuntos de gráficas tienen escala lineal en el eje x. Además, en las gráficas de las Figs.(3.16) y (3.17) se muestra lo correspondiente al sistema 500 keV/u $He + He$.

De las Figs.(3.14) y Fig.(3.16) resulta notable la presencia, en la ionización del blanco, de lo que fuera parte del pico de captura electrónica al continuo únicamente cuando se toma una carga distinta

de cero en el canal final, gráficas (b) y (d). Como mencionamos antes, hay evidencia experimental de la existencia del pico ECC para sistemas de colisión con proyectiles neutros [33]. Entonces, como el uso de la carga dinámica en el canal final logra recuperar efectos de la emisión de dos centros, tenemos buenas expectativas para pensar que su inclusión es correcta. No obstante, una verificación directa contra los datos experimentales disponibles no resulta posible dado que las mediciones de las DDCS tienen la contribución de la pérdida de electrones del proyectil y –como se ve– la ePI es demasiado grande como para evidenciar dicho fenómeno de manera directa.

En relación al contraste experimental de los resultados teóricos puede observarse, para ambos sistemas, un muy buen acuerdo para el pico binario en los casos (ν_0, ξ_0) y (ν_0, ξ_K) , con alguna mejoría para este último. En cambio, para los casos que consideran la carga dinámica en el canal inicial, (ν_K, ξ_0) y (ν_K, ξ_K) , la predicción teórica del pico binario empeora. Por otra parte, en la región del espectro dominada por la ionización del proyectil, para la emisión a 10° los datos experimentales son subestimados en ambos sistemas, lo que tal vez sea debido al aporte de la ionización simultánea en las mediciones. Luego, a 30° , mientras que para el proyectil He hay una mejor predicción teórica del pico ePI en los casos (ν_0, ξ_0) y (ν_0, ξ_K) respecto de (ν_K, ξ_0) y (ν_K, ξ_K) , para el proyectil H en la emisión a 30° sucede lo contrario, con una sobreestimación de las mediciones para los casos (ν_0, ξ_0) y (ν_0, ξ_K) y un mejor acuerdo para (ν_K, ξ_0) y (ν_K, ξ_K) .

Con respecto a las predicciones teóricas del pico binario hay que tener en cuenta que en CDW-EIS las distorsiones del electrón activo en el canal de entrada son aproximadas por una fase eikonal, es decir, por el límite asintótico de la función del continuo hidrogénico. De este modo, en las colisiones binarias –de encuentro cercano– la validez de tal aproximación asintótica podría debilitarse. Luego, el uso de la carga dinámica en estas distorsiones del canal de entrada les otorga un mayor peso en las funciones de onda en la región donde la validez de la aproximación eikonal es más cuestionable. Por ello, el uso de la carga asintótica resultaría en el canal inicial en una mejor aproximación.

En tanto al canal final, el uso de la carga dinámica en la distorsión no solo brinda, en general, mejores resultados sino que además permite recuperar efectos de la emisión de dos centros, de demostrada importancia aún en sistemas con proyectiles neutros [33].

Por último, en las gráficas de las Figs.(3.18) y (3.19) se muestran, nuevamente, las DDCS de ionización simple de los sistemas de colisión de proyectiles neutros de hidrógeno y helio sobre blancos de helio a 500 keV/u, para un ángulo fijo de 10° , pero estimando la ionización simultánea (PTI) según la Ec.(2.112). Comparando con los respectivos casos de las Figs.(3.14) y (3.16) se observan mejores predicciones para zonas de baja y media energía del espectro de emisión, que antes eran subestimadas. A altas energías, en algunos casos el acuerdo con los datos experimentales mejora y en otros empeora. Vale destacar que por construcción la PTI hereda el comportamiento de la eTI y la ePI. Esto podría no ser así, de modo que hasta tanto no se tenga una mejor descripción teórica de los mecanismos de ionización simultánea, no corresponde elaborar muchas conclusiones. No obstante, todo indica que la ionización simultánea es la principal responsable de la subestimación de mediciones para los sistemas en cuestión.

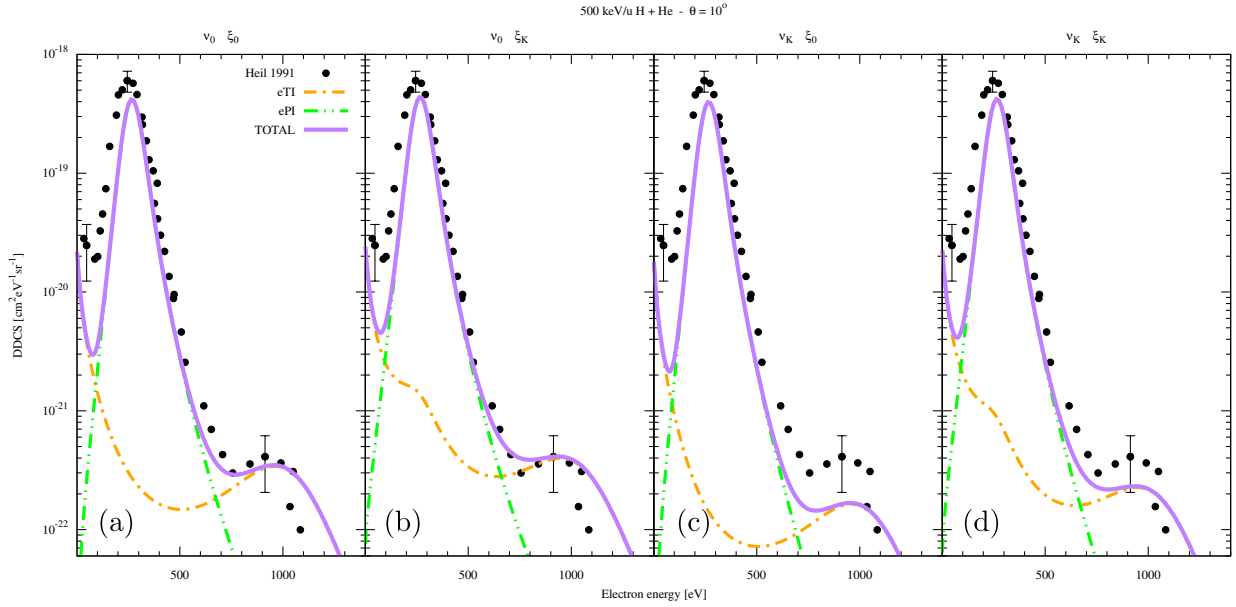


Figura 3.14: Secciones eficaces doble diferencial de ionización simple en función de la energía de emisión para ángulos de 10° en colisiones de hidrógeno sobre blancos de helio a 500 keV/u. Las mediciones experimentales fueron publicadas en [46, 48] y los cálculos teóricos corresponden al modelo CDW-EIS prior considerando: (a) cargas asintóticas $q = 0$ en las distorsiones de los canales de entrada y salida " ν_0, ξ_0 "; (b) carga asintótica en el canal de entrada pero dinámica en el canal de salida " ν_0, ξ_K "; (c) carga dinámica en el canal de entrada pero asintótica en el de salida " ν_K, ξ_0 "; (d) cargas dinámicas en las distorsiones de ambos canales " ν_K, ξ_K ". Además se muestran las contribuciones eTI y ePI en cada caso.

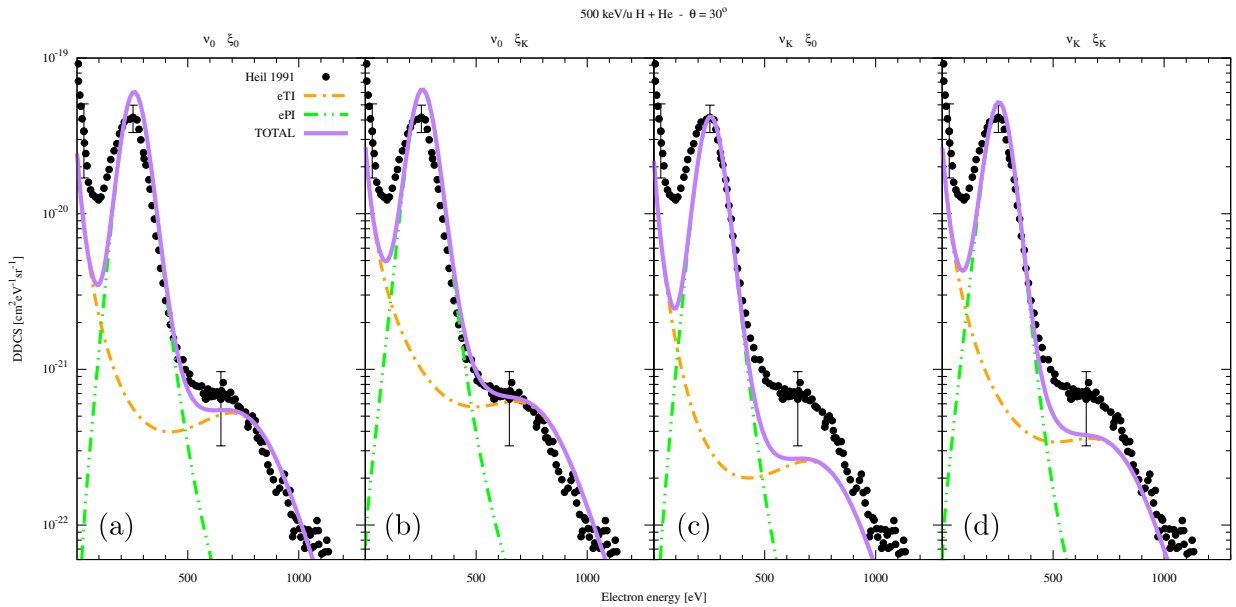


Figura 3.15: Misma descripción que para la Fig.(3.14) para un ángulo de 30°

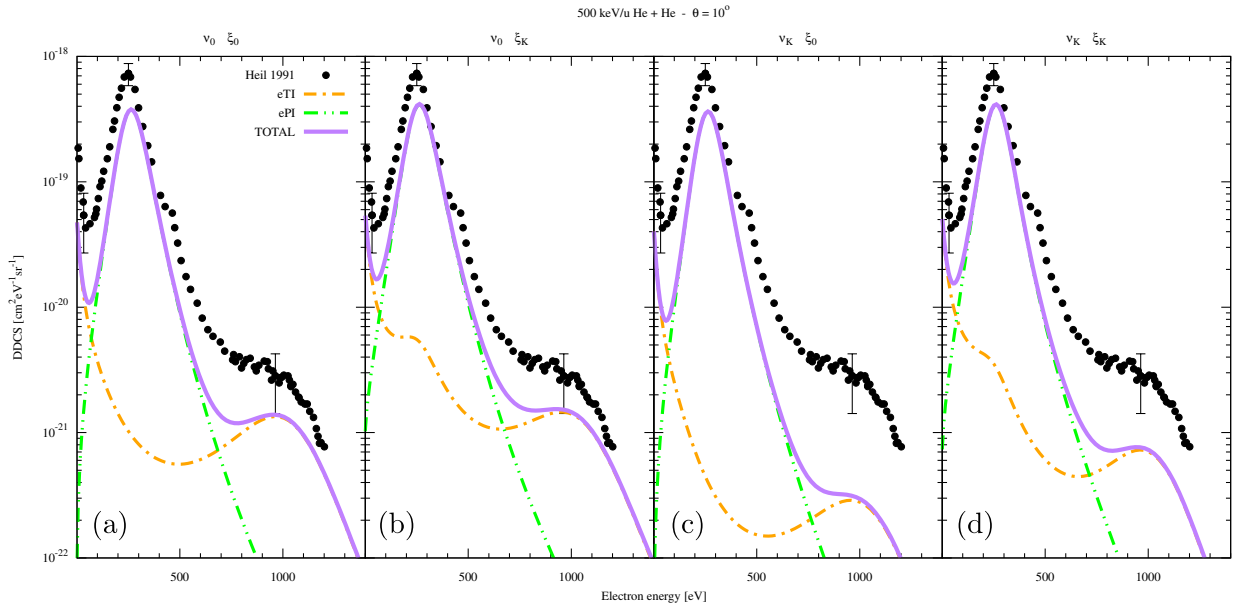


Figura 3.16: Misma descripción que para la Fig.(3.14) para un un proyectil He. Datos experimentales extraídos de [46, 47]

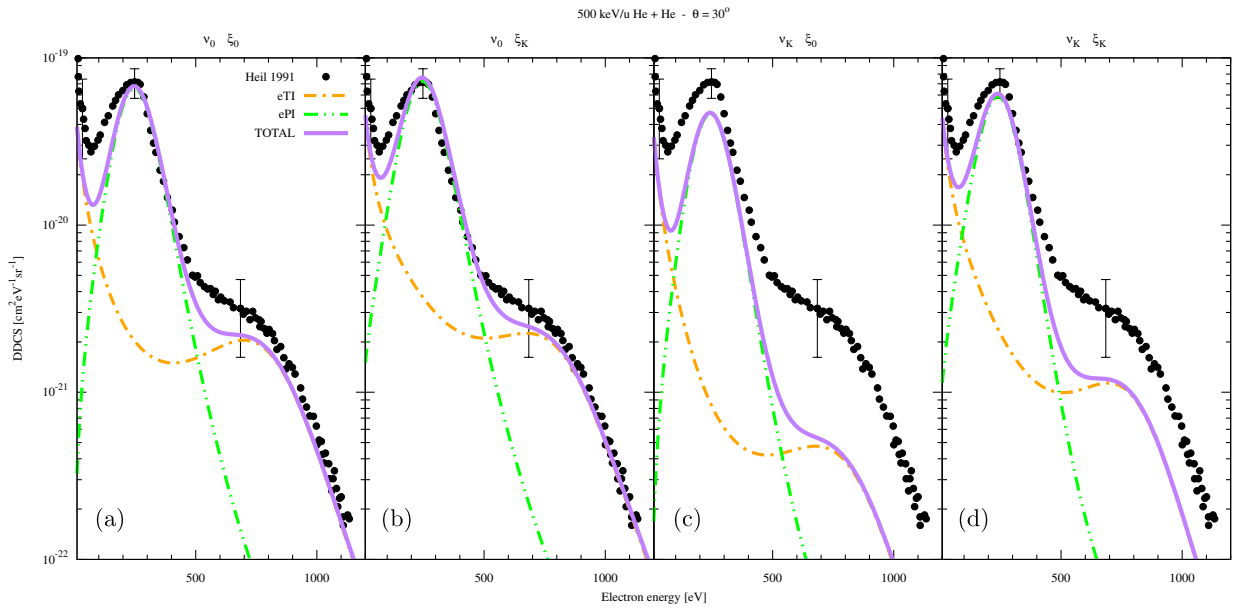


Figura 3.17: Misma descripción que para la Fig.(3.14) para proyectil He y un ángulo de 30° . Datos experimentales extraídos de [46, 47]

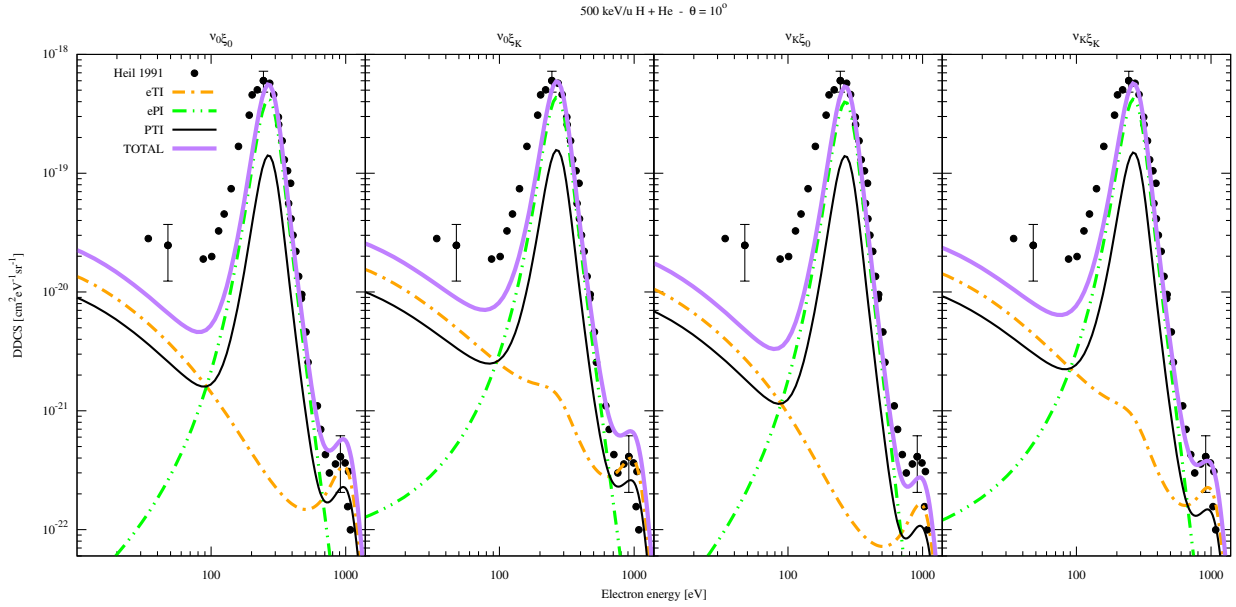


Figura 3.18: Mismos casos de la Fig.(3.14) pero estimando la ionización simultánea.

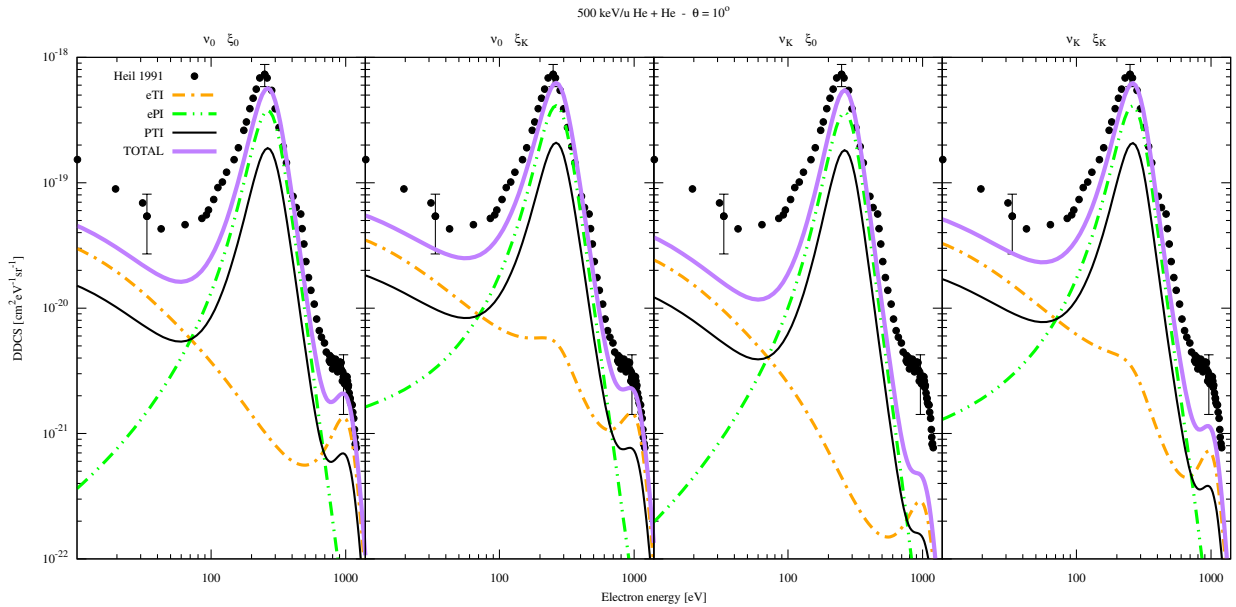


Figura 3.19: Mismos casos de la Fig.(3.16) pero estimando la ionización simultánea.

3.2.2. Iones Litio sobre Helio

En la Fig.(3.20) se muestran resultados teóricos y experimentales para las secciones eficaces de las colisiones de proyectiles Li^{q+} ($q = 1, 2, 3$) contra blancos de Helio a 440 keV/u y ángulos de emisión de 0° , 10° , 120° y 170° . En las distorsiones de proyectiles Li^{2+} y Li^+ se utilizó la carga asintótica en el canal de entrada y la carga dinámica en el de salida, caso que se denota “ ν_0, ξ_K ”.

En líneas generales se observa un muy buen acuerdo entre los datos teóricos y experimentales para proyectiles vestidos con excepción del pico a 0° y 250 eV, que resulta sobreestimado en un

orden de magnitud. Esto sucede justo sobre el pico de captura electrónica al continuo (ECC) y se debe a que en las distorsiones del canal de salida, Ec.(2.83b), dependen de la variable $\xi = \tilde{q}/p$ donde $\vec{p} = \vec{k} - \vec{v}$ se anula para electrones emitidos con momento \vec{k} igual a la velocidad \vec{v} del proyectil. Si bien no son divergencias insalvables, pueden llevar –como se ve– a grandes sobreestimaciones cuando la velocidad de impacto es relativamente baja.

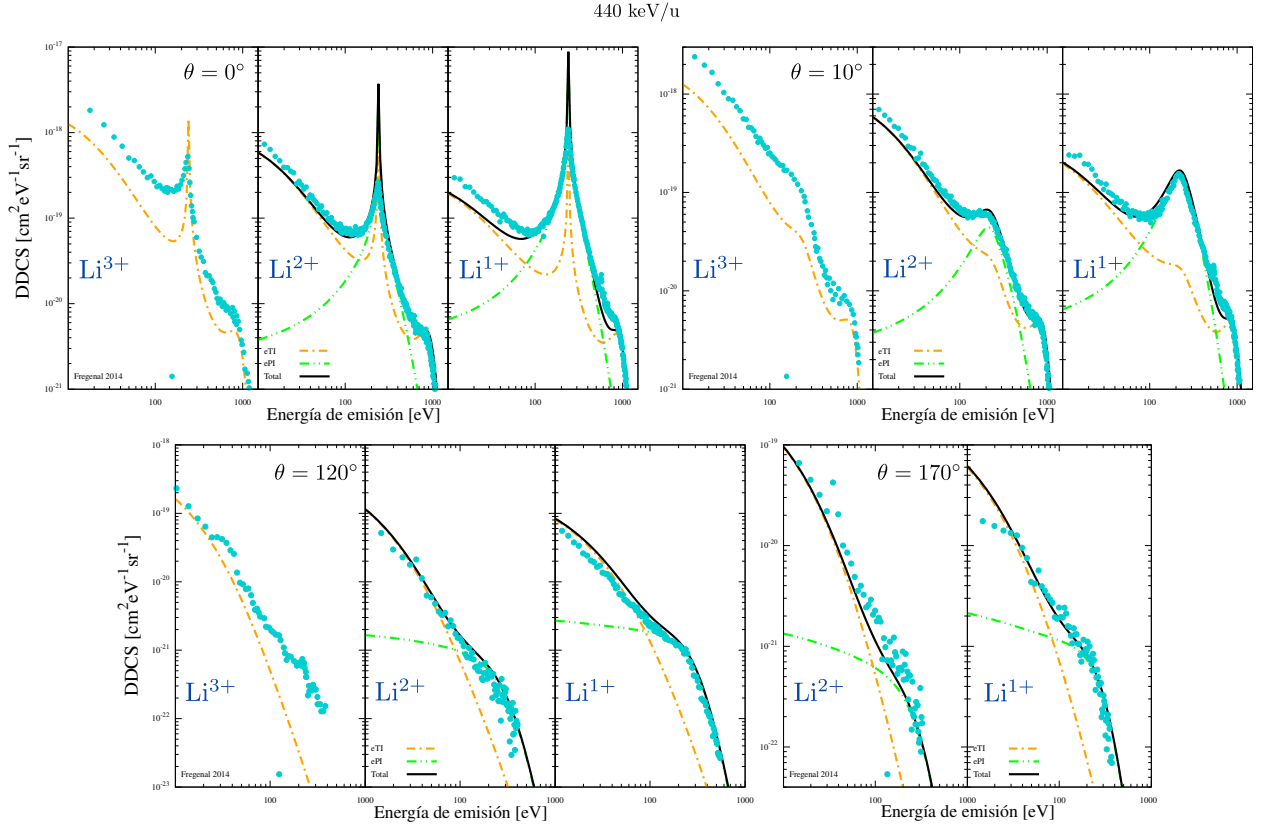


Figura 3.20: Secciones eficaces doble diferencial de ionización simple para el sistema 440keV/u $\text{Li}^{q+} + \text{He}$ ($q = 1, 2, 3$) y ángulos de emisión fijos de 0° , 10° , 120° y 170° . Las curvas sólidas se corresponden con las DDCS totales calculadas con CDW-EIS para el caso “ ν_0, ξ_K ” (véase el texto). Los puntos son mediciones experimentales publicadas en [36, 49].

De la comparación entre los espectros de emisión de los proyectiles Li^{2+} y Li^+ , es posible realizar varias observaciones. En primer lugar hay un incremento en la emisión de electrones debida a la ionización del proyectil (ePI), que se corresponde con la presencia de un electrón extra en el orbital $2s$ del Li^+ . Además, podemos ver que conforme disminuye el valor de la carga asintótica $q = Z_P - N_e$, se reduce la emisión de electrones de baja energía, lo que se condice con las colisiones blandas, de gran parámetro de impacto. A su vez, vemos que la magnitud del pico binario se mantiene invariante a un mismo ángulo para cada sistema de colisión, lo cual es coherente con la ionización de bajo parámetro de impacto, donde pondera más el valor de la carga nuclear del proyectil $Z_P = 3$. Por otra parte, a medida que aumenta el ángulo de emisión (de 0° a 10°) se observa nuevamente una disminución de la contribución ePI como en las gráficas de la Fig.(3.13). No obstante, para ángulos de backscattering (120° y 170°) se ve que la emisión de electrones por ionización del proyectil domina la DDCS para altas energías. La razón de ellos radica en la transformación de coordenadas del sistema del proyectil al sistema del laboratorio; esto quiere decir que los electrones de alta energía en ángulos de backscattering en el sistema del laboratorio se relacionan con electrones emitidos por colisiones

binarias hacia ángulos de $\theta' \sim 0^\circ$ en el sistema de referencia del proyectil.

3.2.3. Ion Carbono sobre moléculas de agua

Finalmente, en la Fig.(3.21) se muestran las DDCS de ionización simple en función de la energía de emisión de la molécula de H₂O por colisión contra proyectiles parcialmente vestidos C⁴⁺ a 6 MeV/u. Las curvas son predicciones teóricas utilizando CDW-EIS prior mientras que los puntos son mediciones experimentales publicadas por Ohsawa *et al.* en [45]. En el cálculo de la pérdida de electrones por ionización del proyectil C⁴⁺ (ePI), los resultados teóricos extienden el uso de potenciales paramétricos GSZ al caso de proyectiles moleculares. Cabe aclarar que no se realizarán correcciones para la carga de las distorsiones mediante el uso de factores de forma, de manera que en la ionización del C⁴⁺ por impacto de H₂O no habrá distorsiones sobre los estados del electrón activo.

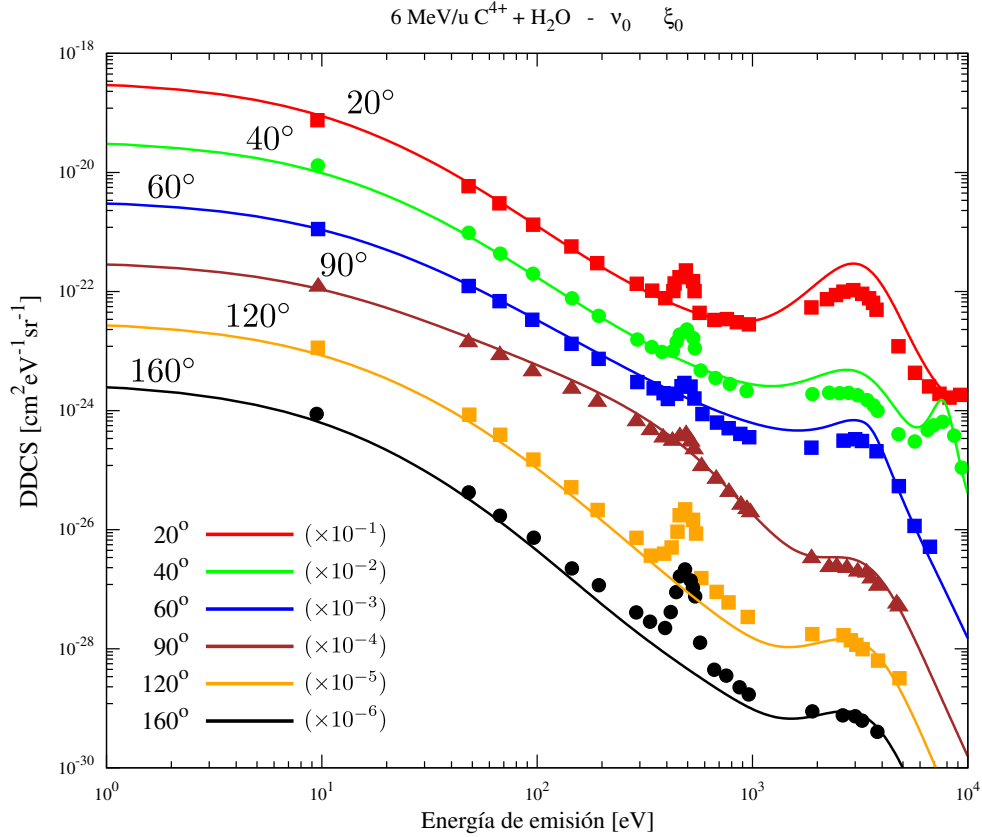


Figura 3.21: Secciones eficaces doble diferencial en función de la energía de emisión para la ionización simple de moléculas de H₂O bajo el impacto de proyectiles C⁴⁺ a 6 MeV/u. Las curvas se corresponden con cálculos teóricos utilizando CDW-EIS prior con el uso de la carga asintótica $q = 4$ en las distorsiones de los canales de entrada y salida. Los puntos son mediciones experimentales publicadas en [45]. Ambos conjuntos de datos fueron escalados por las cantidades que se indican en la leyenda de la gráfica a fin de lograr una mejor visualización.

Si comparamos la gráfica de la Fig.(3.21) con los resultados obtenidos con proyectiles de carbono desnudo en la Fig.(3.11), podemos ver claramente que en la emisión a 40° aparece una nueva estructura en el espectro de emisión entre el pico binario y el pico de emisión Auger cuando se utilizan proyectiles de carbono parcialmente vestidos. Esa estructura se debe entonces a la ionización del

proyector y está presente tanto en ángulos menores como mayores a 90° . Respecto a ángulos de backscattering, la emisión ePI es producto de colisiones binarias contra la molécula de H_2O , resultado análogo al obtenido para el sistema $\text{Li}^{q+} + \text{He}$ ($q=1,2$) de la Fig.(3.20). En contraste con la evidencia experimental podemos decir que aunque cuantitativamente el modelo sobreestima la emisión de electrones por ionización del proyectil, cualitativamente hay un buen acuerdo teórico-experimental lo que brinda grandes expectativas a futuro. En esta línea, estudios próximos podrían focalizarse en el estudio de la interacción entre los electrones pasivos de moléculas y el electrón activo a fin de mejorar los modelos actuales.

Capítulo 4

Conclusiones

A lo largo de este trabajo se realizó una detallada revisión del modelo CDW-EIS utilizado por el Grupo de Colisiones Atómicas de Rosario para el estudio, en particular, de reacciones de ionización simple en diversos sistemas de colisión. Partiendo de sistemas simples hacia otros más complejos se mostraron las actuales descripciones que se utilizan para modelar las interacciones entre los agregados involucrados en la colisión.

Luego fueron presentados los resultados teóricos obtenidos con la versión prior de CDW-EIS, siendo éstos representativos de cada tipo de sistema de colisión, a saber, proyectiles desnudos o vestidos sobre blancos atómicos y la molécula de agua. Las energías comprendidas en general corresponden al rango de energías intermedias y altas, para las que pueda respetarse el régimen perturbativo sobre el cual se encuentran fundados los modelos de onda distorsionada del continuo.

Junto con los resultados teóricos también se mostraron datos experimentales publicados por grupos de investigación de distintos laboratorios. Del contraste teórico-experimental se evidencia un muy buen acuerdo. En particular se encontró que las correcciones a la carga efectiva de las distorsiones del canal de salida definiendo una carga dinámica en función del factor de forma del proyectil, recuperan los efectos de dos centros en las emisiones por colisión contra proyectiles neutros, otorgando además buenas predicciones en todo el espectro de energía de emisión del electrón. No obstante, en CDW-EIS, la inclusión de tal carga dinámica en las distorsiones del canal de entrada en general empeoran las predicciones teóricas, lo que puede ser atribuido a la naturaleza asintótica de la aproximación eikonal.

Por otro lado, para colisiones entre proyectiles vestidos y la molécula de agua no se han considerado correcciones a la carga. Esto en parte se debe a que a partir de los resultados de proyectiles desnudos impactando sobre H_2O se infiere la necesidad de contar con mejores descripciones del estado del continuo molecular, que hasta el momento es aproximado por funciones del continuo hidrogénico. Además, la definición del factor de forma, al igual que los potenciales de corto rango GSZ, actualmente responden a resultados obtenidos para iones y átomos, entonces se decidió no desafiar la validez de tantas hipótesis a la vez. En este contexto es preciso contar con mejores descripciones del continuo molecular como también evaluar nuevos potenciales para la interacción entre los electrones pasivos de un proyectil atómico con aquellos de los orbitales moleculares.

Finalmente, sería también pertinente un estudio más formal de las reacciones de ionización simultánea, de probada importancia para ciertos sistemas de colisión y de presumible significancia para otros, como el caso del $\text{Li}^{q+} + \text{He}$ ($q=1,2$). Entonces, si al menos se encontrase un modo de predecir cuándo la ionización simultánea fuera significativa, sería ya de gran utilidad.

Bibliografía

- [1] D. W. Miller, “A review of proton beam radiation therapy,” *Medical physics*, vol. 22, no. 11, pp. 1943–1954, 1995.
- [2] W. A. Volkert and T. J. Hoffman, “Therapeutic radiopharmaceuticals,” *Chemical reviews*, vol. 99, no. 9, pp. 2269–2292, 1999.
- [3] T. Liersch, J. Meller, B. Kulle, T. M. Behr, P. Markus, C. Langer, B. M. Ghadimi, W. A. Wegener, J. Kovacs, I. D. Horak, *et al.*, “Phase ii trial of carcinoembryonic antigen radioimmunotherapy with ^{131}I -labetuzumab after salvage resection of colorectal metastases in the liver: five-year safety and efficacy results,” *Journal of clinical oncology*, vol. 23, no. 27, pp. 6763–6770, 2005.
- [4] F. Morschhauser, J. Radford, A. Van Hoof, U. Vitolo, P. Soubeyran, H. Tilly, P. C. Huijgens, A. Kolstad, F. d’Amore, M. G. Diaz, *et al.*, “Phase iii trial of consolidation therapy with yttrium-90-ibritumomab tiuxetan compared with no additional therapy after first remission in advanced follicular lymphoma,” *Journal of Clinical Oncology*, vol. 26, no. 32, pp. 5156–5164, 2008.
- [5] P. D. Fainstein, G. H. Olivera, and R. D. Rivarola, “Theoretical calculations of the stopping power for protons traversing h, he and simple molecular targets,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, vol. 107, pp. 19–26, Feb. 1996.
- [6] D. Belkic, “A quantum theory of ionisation in fast collisions between ions and atomic systems,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 11, pp. 3529–3552, Oct. 1978.
- [7] D. S. F. Crothers and J. F. McCann, “Ionisation of atoms by ion impact,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 16, pp. 3229–3242, Sept. 1983.
- [8] P. D. Fainstein, V. H. Ponce, and R. D. Rivarola, “Two-centre effects in ionization by ion impact,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 24, pp. 3091–3119, July 1991.
- [9] N. Stolterfoht, D. Schneider, J. Tanis, H. Altevogt, A. Salin, P. D. Fainstein, R. Rivarola, J. P. Grandin, J. N. Scheurer, S. Andriamonje, D. Bertault, and J. F. Chemin, “Evidence for two-centre effects in the electron emission from 25 mev/u $\text{mo}^{40+} + \text{he}$ collisions: theory and experiment,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 4, p. 899, Oct. 1987.
- [10] N. Stolterfoht, R. D. DuBois, R. DuBois, and R. D. Rivarola, *Electron emission in heavy ion-atom collisions*, vol. 20. Editado por Springer Science, 1997.
- [11] C. MacDowell, *Introduction to the Theory of Ion-atom Collisions*. North-Holland Publishing Company, 1970.
- [12] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: non relativistic theory*, vol. 3. Pergamon Press, 1977.

-
- [13] K. Gottfried and T.-M. Yan, *Quantum mechanics: fundamentals*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [14] J. J. Sakurai and E. D. Commins, *Modern quantum mechanics, revised edition*. American Association of Physics Teachers, 1995.
- [15] M. S. Gravielle and J. E. Miraglia, “Some Nordsieck integrals of interest in radiation and atomic collision theories,” *Computer Physics Communications*, vol. 69, pp. 53–58, Feb. 1992.
- [16] P. D. Fainstein, V. H. Ponce, and R. D. Rivarola, “A theoretical model for ionisation in ion-atom collisions. Application for the impact of multicharged projectiles on helium,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 21, pp. 287–299, Jan. 1988.
- [17] E. Clementi and C. Roetti, “Roothaan-hartree-fock atomic wavefunctions: Basis functions and their coefficients for ground and certain excited states of neutral and ionized atoms, $z \leq 54$,” *Atomic data and nuclear data tables*, vol. 14, no. 3-4, pp. 177–478, 1974.
- [18] J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen, and R. D. Rivarola, “Influence of the dynamic screening on single-electron ionization of multi-electron atoms,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 43, p. 205203, Oct. 2010.
- [19] B. Senger, “Calculated molecular double-differential cross-sections for ionisation under proton impact,” *Zeitschrift fur Physik D Atoms Molecules Clusters*, vol. 9, pp. 79–89, Mar. 1988.
- [20] C. Champion, M. E. Galassi, P. F. Weck, O. Fojón, J. Hanssen, and R. D. Rivarola, *Quantum-Mechanical Contributions to Numerical Simulations of Charged Particle Transport at the DNA Scale*, p. 263. Springer, 2012.
- [21] R. Moccia, “One-Center Basis Set SCF MO’s. III. H_2O , H_2S , and HCl ,” *Journal of Chemical Physics*, vol. 40, pp. 2186–2192, Apr. 1964.
- [22] J. A. Pople, D. P. Santry, and G. A. Segal, “Approximate Self-Consistent Molecular Orbital Theory. I. Invariant Procedures,” *Journal of Chemical Physics*, vol. 43, pp. S129–S135, Nov. 1965.
- [23] B. Senger and R. V. Rechenmann, “Angular and energy distributions of δ -rays ejected from low- z molecular targets by incident protons and α particles,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, vol. 2, pp. 204–207, Mar. 1984.
- [24] G. Herzberg, *Electronic spectra and electronic structure of polyatomic molecules*, vol. 3, pp. 379–394. Princeton, 1966.
- [25] C. A. Tachino, J. M. Monti, O. A. Fojón, C. Champion, and R. D. Rivarola, “Ionization of water molecules by ion beams. On the relevance of dynamic screening and the influence of the description of the initial state,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 47, p. 035203, Feb. 2014.
- [26] C. O. Reinhold, D. R. Schultz, R. E. Olson, C. Kelbch, R. Koch, and H. Schmidt-Böcking, “Quantum interference in clothed-ion-atom binary peak structures,” *Physical Review Letters*, vol. 66, pp. 1842–1845, Apr. 1991.
- [27] J. M. Monti, R. D. Rivarola, and P. D. Fainstein, “FAST TRACK COMMUNICATION: Quantum interferences in swift highly-charged dressed-ion atom collisions,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 41, p. 201001, Oct. 2008.

-
- [28] D. H. Lee, P. Richard, T. J. M. Zouros, J. M. Sanders, J. L. Shinpaugh, and H. Hidmi, “Binary-encounter electrons observed at 0° in collisions of 1-2-MeV/amu H^+ , C^{6+} , N^{7+} , O^{8+} , and F^{9+} ions with H_2 and He targets,” *Physical Review A*, vol. 41, pp. 4816–4823, May 1990.
- [29] A. E. Green, D. L. Sellin, and A. S. Zachor, “Analytic Independent-Particle Model for Atoms,” *Physical Review*, vol. 184, pp. 1–9, Aug. 1969.
- [30] P. P. Szydlik and A. E. Green, “Independent-particle-model potentials for ions and neutral atoms with $Z \leq 18$,” *Physical Review*, vol. 9, pp. 1885–1894, May 1974.
- [31] R. H. Garvey, C. H. Jackman, and A. E. S. Green, “Independent-particle-model potentials for atoms and ions with $36 < Z \leq 54$ and a modified Thomas-Fermi atomic energy formula,” *Physical Review*, vol. 12, pp. 1144–1152, Oct. 1975.
- [32] J. M. Monti, R. D. Rivarola, and P. D. Fainstein, “Distorted wave theories for dressed-ion-atom collisions with GSZ projectile potentials,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 44, p. 195206, Oct. 2011.
- [33] R. O. Barrachina, “Collisional electron capture to the continuum of neutral projectiles,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 23, pp. 2321–2332, Jul 1990.
- [34] R. D. Dubois and S. T. Manson, “Electron emission in He^+ -atom and He^+ -molecule collisions: A combined experimental and theoretical study,” *Physical Review A*, vol. 42, pp. 1222–1230, Aug. 1990.
- [35] J. M. Monti, J. Fiol, D. Fregenal, P. D. Fainstein, R. D. Rivarola, W. Wolff, E. Horsdal, G. Bernardi, and S. Suárez, “Experimental and theoretical results on electron emission in collisions between partially dressed ions with He targets,” *Physica Scripta Volume T*, vol. 156, p. 014031, Sept. 2013.
- [36] D. Fregenal, J. M. Monti, J. Fiol, P. D. Fainstein, R. D. Rivarola, G. Bernardi, and S. Suárez, “Experimental and theoretical results on electron emission in collisions between He targets and dressed Li^{q+} ($q = 1, 2$) projectiles,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 47, p. 155204, Aug. 2014.
- [37] I. Kerby, G. W., M. W. Gealy, Y. Y. Hsu, M. E. Rudd, D. R. Schultz, and C. O. Reinhold, “Energy and angular distributions of electrons from ion impact on atomic and molecular hydrogen. II. 20-114-keV $H^+ + H$,” *Physics Letters A*, vol. 51, pp. 2256–2264, Mar. 1995.
- [38] N. Stolterfoht, H. Platten, G. Schiwietz, D. Schneider, L. Gulyás, P. D. Fainstein, and A. Salin, “Two-center electron emission in collisions of fast, highly charged ions with He: Experiment and theory,” *Physics Letters A*, vol. 52, pp. 3796–3802, Nov. 1995.
- [39] L. C. Tribedi, P. Richard, W. DeHaven, L. Gulyás, M. W. Gealy, and M. E. Rudd, “LETTER TO THE EDITOR: Double-differential distributions of electron emission in a pure three-body collision: ionization of atomic hydrogen by highly charged ions,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 31, pp. L369–L378, Apr. 1998.
- [40] L. C. Tribedi, P. Richard, L. Gulyás, M. E. Rudd, and R. Moshhammer, “Two-center effect on low-energy electron emission in collisions of 1-MeV/u bare ions with atomic hydrogen, molecular hydrogen, and helium. I. Atomic hydrogen,” *Physics Letters A*, vol. 63, p. 062723, June 2001.

-
- [41] P. D. Fainstein, L. Gulyás, and A. Salin, “Distorted-wave models of ionization with Hartree-Fock wavefunctions for the target,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, vol. 124, pp. 206–210, Apr. 1997.
- [42] M. E. Rudd, L. H. Toburen, and N. Stolterfoht, “Differential Cross Sections for Ejection of Electrons from Argon by Protons,” *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, vol. 23, p. 405, Jan. 1979.
- [43] D. Schneider, B. M. Johnson, B. Hodge, and C. F. Moore, “High resolution Ar-LMM and Kr-MNN Auger electron spectra produced in collisions with heavy ions at MeV energies,” *Physics Letters A*, vol. 59, pp. 25–29, Nov. 1976.
- [44] D. Ohsawa, Y. Sato, Y. Okada, V. P. Shevelko, and F. Soga, “6.0–10.0 mev/u he²⁺-ion-induced electron emission from water vapor,” *Phys. Rev. A*, vol. 72, p. 062710, Dec 2005.
- [45] D. Ohsawa, H. Tawara, F. Soga, M. E. Galassi, and R. D. Rivarola, “6.0 mev u⁻¹ carbon ion (c⁶⁺ and c⁴⁺)-induced secondary electron emission from water vapor,” *Physica Scripta Volume T*, vol. 156, p. 014039, Sept. 2013.
- [46] O. Heil, R. D. Dubois, R. Maier, M. Kuzel, and K. O. Groeneveld, “A systematic investigation of ionization occurring in few electron collision system: H⁰, He⁰ impact on He*,” *Zeitschrift fur Physik D Atoms Molecules Clusters*, vol. 21, pp. 235–239, Sept. 1991.
- [47] O. Heil, R. Maier, R. D. Dubois, M. Kuzel, and K. O. Groeneveld, “Doubly differential electron emission cross sections for He⁰ (0.5 MeV/amu) → He collisions,” *Zeitschrift fur Physik D Atoms Molecules Clusters*, vol. 21, pp. S333–S335, Mar. 1991.
- [48] R. Maier, O. Heil, R. D. Dubois, M. Kuzel, and R. O. Groeneveld, *New aspects of simultaneous projectile and target ionization in H⁰ (0.5MeV/1.0MeV) → He collisions*, vol. 376, pp. 81–87. Springer, 1991.
- [49] J. M. Monti, D. Fregenal, S. Suárez, P. D. Fainstein, R. D. Rivarola, G. Bernardi, and J. Fiol, “Experimental and theoretical results on electron emission from helium by the impact of bare li³⁺ ions,” *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, vol. 45, p. 145202, July 2012.