



HAL
open science

Le rôle des interactions électroniques pour le processus d'ionisation d'atomes en collisions avec des ions

Juan Manuel Monti

► **To cite this version:**

Juan Manuel Monti. Le rôle des interactions électroniques pour le processus d'ionisation d'atomes en collisions avec des ions. Autre [cond-mat.other]. Université Paul Verlaine - Metz, 2011. Français. NNT : 2011METZ004S . tel-01748809

HAL Id: tel-01748809

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01748809>

Submitted on 29 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

THÈSE

Présentée le 23 Mars 2011

Pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR EN PHYSIQUE

Par

Juan Manuel MONTI

*Le rôle des interactions électroniques pour le processus
d'ionisation d'atomes en collisions avec des ions*

Discipline : **Physique**

Spécialiste : **Physique des collisions**

Directeurs de Thèse : Pr. Roberto RIVAROLA et Pr. Jocelyn HANSSEN

Membres du jury :

Président	Mme A. Martinez	Professeur, Université National de Rosario, Argentine
Rapporteur	H. Bachau	Directeur de recherche CNRS, Université Bordeaux 1, CELIA
Rapporteur	Mme M.S. Gravielle	Professeur, Université National de Buenos Aires, Argentine
Directeur	R. Rivarola	Professeur, Université National de Rosario, Argentine
Directeur	J. Hanssen	Professeur, Université Paul Verlaine-Metz

Table des matières

Table des matières

1	Introduction	1
2	Ecrantage dynamique	3
2.1	Introduction	3
2.2	La théorie	3
2.2.1	Version de l'amplitude de transition Prior	5
2.2.2	Version de l'amplitude de transition Post	5
2.3	Résultats dans le cas d'une description de la cible par une simple-zeta RHF	6
2.4	Resultats avec une cinq-zeta RHF	8
3	Modèle des ondes distordues à quatre corps	11
3.1	Introduction	11
3.2	La théorie	11
3.3	Résultats	13
4	Ionisation simple de He par impact d'ions non nus et interferences quantiques	17
4.1	Introduction	17
4.2	La théorie	17
4.3	Résultats pour $U^{21+} + He$	19
	Bibliographie	21

Chapitre 1

Introduction

Nous présentons ici un résumé en langue française de la thèse. Il comprendra les principales idées avec les principales équations ainsi que les discussions des résultats.

L'objectif principal de ce travail est d'étudier l'influence des interactions électroniques dans le processus d'ionisation simple d'atomes par impact d'ions multiples chargés. Ces ions peuvent être nu ou non mais dans une gamme d'énergies d'impact comprises entre les énergies élevées et intermédiaires.

Le premier chapitre examine les formes post et prior de l'amplitude de transition de l'approximation CDW-EIS [1] pour utilisée pour l'étude de l'ionisation simple d'atomes multiélectroniques au travers d'un potentiel effectif qui prend en compte l'interaction entre l'électron actif et les électrons passifs de la cible (écranage dynamique). Cette interaction dépendant de la distribution des électrons passifs autour du noyau cible affecte la dynamique de l'électron actif. En conséquence, l'inclusion de cette interaction dans le calcul des sections efficaces CDW-EIS supprime la différence entre les formes post et prior.

Dans le second chapitre, nous introduisons le développement d'un modèle d'onde distordue à quatre corps pour étudier la simple ionisation d'atomes à deux électrons actifs par impact d'ions nus et évoluant dans le même temps. Ce modèle permet d'inclure ce que nous appelons la corrélation électronique dynamique. La comparaison des résultats de ce modèle avec ceux obtenus en utilisant un modèle à électrons dynamiquement non corrélés permet une évaluation de la corrélation électronique dynamique pour ce type de processus. Dans le dernier chapitre nous évaluons l'interaction entre l'électron actif et les électrons liés au projectile. Elle est introduite au travers d'un potentiel paramétrique de courte portée type GSZ (Green-Sellin-Zachor). Ainsi, le potentiel perturbateur du projectile se sépare en deux termes : un potentiel à courte portée due aux la distribution électronique autour du projectile et un à long portée déterminée par la charge nette du projectile entièrement

écrané. Ce modèle permet une interprétation de certaines structures observées dans les spectres expérimentaux des sections efficaces doublement différentiels, en effet, celles-ci peuvent être interprétées comme dû aux interférences entre les contributions de courte et longue portées du potentiel.

Il sera utilisé, sauf indication contraire, le système d'unités atomiques (u.a.) dans laquelle la charge et la masse de l'électron sont considérées comme égale à l'unité.

Chapitre 2

Ecrantage dynamique et post-prior differences dans le modèle CDW-EIS

2.1 Introduction

Dans ce travail, nous incluons dans la version post de l'approximation CDW-EIS ou un potentiel résiduel a toujours été négligé dans tous les calculs précédents [1]. Ce potentiel résiduel est lié à l'interaction des électrons passifs avec l'électron actif dans la voie de sortie produisant ainsi un écrantage dynamique du noyau cible. Pour une évaluation préliminaire de son influence, nous avons introduit une simple zêta fonction et cela pour décrire l'état initial de la cible. Nous avons trouvé que la différence post-prior a été largement diminuée [2].

Plus tard, dans une autre publication (voir Monti *et al.* [3]), nous montrons que l'utilisation de fonctions plus complètes RHF cinq zêta pour décrire l'état initial évite toute divergence post-prior formes. En outre, il est démontré que l'écrantage dynamique donne une contribution importante sur les sections efficaces d'ionisation. A titre d'exemple, le cas de l'impact de protons sur les atomes d'hélium seront analysés.

2.2 La théorie

Prenons l'ionisation simple d'une cible multiélectronique de charge nucléaire Z_T avec N électrons passifs, et d'un électron actif dans une collision avec un ion nu de charge nucléaire Z_P . L'approximation du paramètre d'impact est utilisée, dans ce cas la distance internucléaire est donnée par $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$, avec $\vec{\rho}$ le paramètre d'impact, \vec{v} la vitesse

d'impact, et t le temps l'évolution en prenant pour $t = 0$ la plus proche distance entre les noyaux. Le problème se réduit à la résolution de l'équation de Schrödinger à un électron-actif :

$$\left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_r \right) \Psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.1)$$

ou,

$$\tilde{H} = \tilde{H}_a - \frac{Z_P}{s} + V_s(\vec{R}) + \varepsilon_P \quad (2.2)$$

avec

$$\tilde{H}_a = -\frac{\nabla_x^2}{2} - \frac{Z_T}{x} + V_{ap}(\vec{x}) \quad (2.3)$$

et

$$V_{ap}(\vec{x}) = \left\langle \varphi_i \left| \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.4)$$

l'interaction électrostatique entre l'électron actif les électrons passifs,

$$V_s(\vec{R}) = \frac{Z_P Z_T}{R} - \left\langle \varphi_i \left| \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{s_j} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.5)$$

l'interaction électrostatique entre le projectile et la cible résiduelle, et

$$\varepsilon_P = \left\langle \varphi_i \left| -\sum_{j=1}^N \left(\frac{\nabla_{x_j}^2}{2} + \frac{Z_T}{x_j} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,l=1 \\ j \neq l}}^N \frac{1}{|\vec{x}_j - \vec{x}_l|} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.6)$$

l'énergie des électrons passifs dans l'état φ_i .

Maintenant, suivant le formalisme des ondes distordues, l'initial et final fonctions d'onde sont choisies comme :

$$\chi_i^+(\vec{x}, t) = \psi_i(\vec{x}, t) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \quad (2.7)$$

et

$$\chi_f^-(\vec{x}, t) = \psi_f(\vec{x}, t) \mathcal{L}_f^-(\vec{s}) \quad (2.8)$$

avec :

$$\psi_i(\vec{x}, t) = \phi_i(\vec{x}) \exp(-i\varepsilon_i t) \quad (2.9)$$

et

$$\psi_f(\vec{x}, t) = \phi_f(\vec{x}) \exp(-i\varepsilon_f t), \quad (2.10)$$

nous avons

$$\phi_f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left(i\vec{k} \cdot \vec{x}\right) N^*(\lambda) {}_1F_1\left[-i\lambda, 1, -i\left(kx + \vec{k} \cdot \vec{x}\right)\right], \quad (2.11)$$

représentant l'état continuum de l'électron actif en présence de la cible résiduelle avec $\varepsilon_f = k^2/2$, où, \vec{k} la quantité de mouvement de l'électron éjecté par rapport au noyau cible résiduelle, $N(a) = \exp(\pi a/2)\Gamma(1 + ia)$ (avec Γ la fonction Gamma d'Euler) est le facteur de normalisation de la fonction hypergéométrique ${}_1F_1$ et $\lambda = \tilde{Z}_T/k$ avec \tilde{Z}_T une charge effective ou net de la cible.

Dans (2.7) et (2.8), $\mathcal{L}_i^+(\vec{s})$ est choici comme une phase eikonal,

$$\mathcal{L}_i^+(\vec{s}) = \exp[-i\nu \ln(v s + \vec{v} \cdot \vec{s})] \quad (2.12)$$

et $\mathcal{L}_f^-(\vec{s})$ est

$$\mathcal{L}_f^-(\vec{s}) = N^*(\xi) {}_1F_1[-i\xi, 1, -i(ps + \vec{p} \cdot \vec{s})] \quad (2.13)$$

ou $\nu = Z_P/v$ et $\xi = Z_P/p$, $\vec{p} = \vec{k} - \vec{v}$ le moment de l'électron éjecté à l'égard du projectile.

2.2.1 Version de l'amplitude de transition Prior

Dans le repère de noyau cible, la version prior de l'amplitude de transition s'écrit en fonction du paramètre d'impact :

$$\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}) = -i \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V_s(\vec{R}) dt\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \chi_f^- | (W_i | \chi_i^+) \rangle. \quad (2.14)$$

Dans (2.14), W_i est le EIS opérateur de perturbation :

$$W_i \chi_i^+ = \psi_i(\vec{x}, t) \left[\frac{1}{2} \nabla_{\vec{s}}^2 \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) + \vec{\nabla}_{\vec{x}} \ln \phi_i(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{s}} \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right]. \quad (2.15)$$

2.2.2 Version de l'amplitude de transition Post

La version post de l'amplitude de transition s'écrit comme

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\langle X_f^- | \left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_{\vec{x}} \right)^\dagger \right] | X_i^+ \rangle. \quad (2.16)$$

6 Résultats dans le cas d'une description de la cible par une simple-zeta RHF

Le potentiel $V_T(\vec{x}) = -Z_T/x + V_{ap}(\vec{x})$ in (2.3), est usuellement approximé par un potentiel effectif $V_T(\vec{x}) = -Z_T^{eff}/x$, ou Z_T^{eff} est la charge effective de la cible donnée par $Z_T^{eff} = n_i\sqrt{-2\varepsilon_i}$, avec n_i nombre quantique principal de l'orbital. Donc la post forme de l'amplitude de transition s'écrit,

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = -i \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V_s(\vec{R}) dt\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\langle \chi_f^- | (W_f^\dagger + V_T^{eff}) | \chi_i^+ \rangle\right]. \quad (2.17)$$

Dans (2.17) W_f est l'opérateur de perturbation CDW

$$W_f^- \chi_f^- = \psi_f(\vec{x}, t) \left[\vec{\nabla}_{\vec{x}} \ln \phi_f(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{s}} \mathcal{L}_f^-(\vec{s}) \right]. \quad (2.18)$$

Le potentiel $V_T^{eff}(\vec{x}) = -(Z_T - Z_T^{eff})/x + V_{ap}(\vec{x})$ a été négligée dans tous les calculs précédents. Notez qu'en faisant cette approximation cela implique que $\tilde{Z}_T = Z_T^{eff}$ dans (2.11). En faisant cela, les conditions aux limites asymptotiques ne sont pas satisfaites dans la voie de sortie. Afin de les préserver, la fonction d'onde du continuum cible-electron actif doit être choisi comme celle correspondant à un potentiel asymptotique $-(Z_T - N)/x$. Ceci correspond à prendre $\tilde{Z}_T = (Z_T - N)$ dans (2.11). En consequence, l'amplitude de transition deviens

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = -i \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V_s(\vec{R}) dt\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\langle \chi_f^- | (W_f^\dagger + V_T^{as}) | \chi_i^+ \rangle\right] \quad (2.19)$$

Ou maintenant $V_T^{as}(\vec{x}) = -N/x + V_{ap}(\vec{x})$.

L'inclusion respective des potentiels perturbatif V_T^{eff} et V_T^{as} dans (2.17) et (2.19), complète la post-versions de la amplitudes de transition.

2.3 Résultats dans le cas d'une description de la cible par une simple-zeta RHF

Les figures 2.1 et 2.2 montre les résultats de la section efficace doublement différentielle (Doubly Differential Cross Section, DDCS) pour 1.5 MeV $H^+ + He$, calculées avec la charge asymptotique égale à $Z_T^{as} = (Z_T - 1)$ (figures a) ou avec une charge effective $Z_T^{eff} = 1.339$ (figures b). La comparaison entre les deux versions post (incluant ou excluant le potentiel résiduel) montre explicitement l'influence de l'analyse dynamique dans le DDCS. Lorsque des charges effectives sont utilisées, l'analyse dynamique est considéré d'une façon

approximative, donc la différence entre la DDCS obtenu en incluant ou en excluant le potentiel V_T^{ef} est diminuée.

Les différences qui subsistent entre les approximations post et post plus complète sont dus à une mauvaise description de la fonction d'onde initial par une fonction *simple-zeta* Rothaan-Hartree-Fock [4].

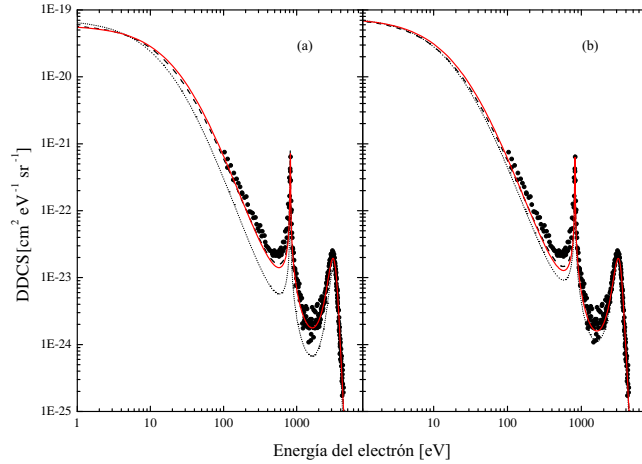


FIG. 2.1 – DDCS pour l'émission électronique dans des collisions H^+ sur He pour une énergie de 1.5 MeV en fonction de l'énergie de l'électron éjecté et pour un angle d'émission de 0° fixé, considérant la charge asymptotique (figure a) et une charge effective (figure b). Théorie : —, prior CDW-EIS; ·····, post CDW-EIS; - - -, post CDW-EIS incluant le terme V_T^{as} (figure a) et V_T^{eff} (figure b). Résultats Experimentaux : ●, Lee *et al.* [5].

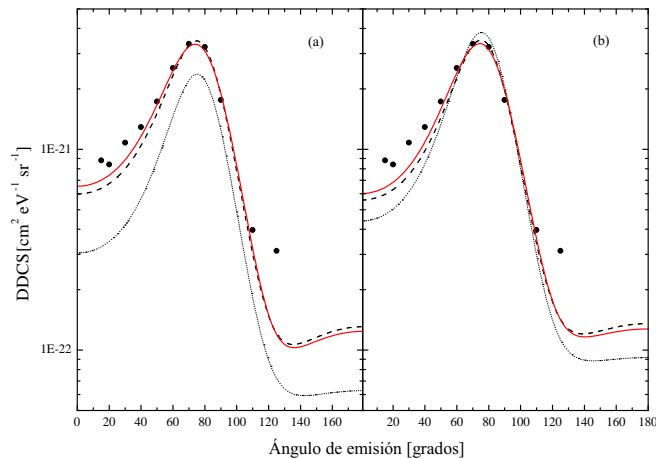


FIG. 2.2 – DDCS pour l'émission électronique dans des collisions H^+ sur He pour une énergie de 1.5 MeV en fonction de l'angle de l'électron éjecté et pour une énergie de 100 eV, considérant la charge asymptotique (figure a) et une charge effective (figure b). Théorie : —, prior CDW-EIS; ·····, post CDW-EIS; - - -, post CDW-EIS incluant le terme V_T^{as} (figure a) et V_T^{eff} (figure b). Résultats Experimentaux : ●, Toburen *et al.* extrait de [6].

2.4 Resultats avec une cinq-zeta RHF

La figure 2.3 montre des calculs pour DDCS pour l'ionisation simple de He par impact de protons 1.5 MeV en fonction de l'angle d'émission pour des énergies des électrons émis de 10 eV, 100 eV et 500 eV. Les figures 2.3.a, 2.3.d et 2.3.g, les résultats des calculs à l'aide de la version antérieure de l'amplitude diffusion sont présentés compte tenu d'un *simple-zeta* RHF [4] pour décrire la fonction de l'état initial et d'une charge liée asymptotique $\tilde{Z}_T = 1$ dans la fonction du continuum cible dans la voie de sortie. En outre, la DDCS calculé avec les versions suivante ou, le choix des fonctions d'onde initiale et finale, mais incluant ou excluant la contribution de $\tilde{V}_T = -1/x + V_{ap}(\vec{x})$, sont présentés. La comparaison entre ces deux post calculs nous permet de montrer une contribution importante sur la DDCS de l'écrantage dynamique associée à \tilde{V}_T . La comparaison entre les calculs montrent que certaines divergences post-avant sont toujours dans la DDCS.

Dans les 2.3.b, 2.3.e et 2.3.h une *cinq-zeta* RHF fonction d'onde est employée pour représenter la fonction d'onde initiale tandis que dans la voie final $\tilde{Z}_T = 1$ est choisie comme précédemment. Il est clair que ce choix aura une incidence sur le calcul de \tilde{V}_T et donc de la contribution de l'écrantage dynamique sur la DDCS. Encore une fois, ce potentiel collabore d'une manière importante à la DDCS, mais un bon accord est maintenant obtenu entre les calculs avec la version prior et post quand dans la dernière, le terme \tilde{V}_T est considéré. L'influence de la dynamique diminue quand une fonction d'onde de *cinq-zeta* RHF est utilisé pour décrire l'état initial lié et une charge effective $\tilde{Z}_T = Z_T^{eff}$ est choisie dans la fonction d'onde du continuum final, comme on peut le voir dans les figures 2.3.c, 2.3.f and 2.3.i. Ce problème peu s'expliquer par le fait qu'une partie de l'écrantage dynamique est pris en compte. Encore une fois, la différence disparaît entre les formes post et prior.

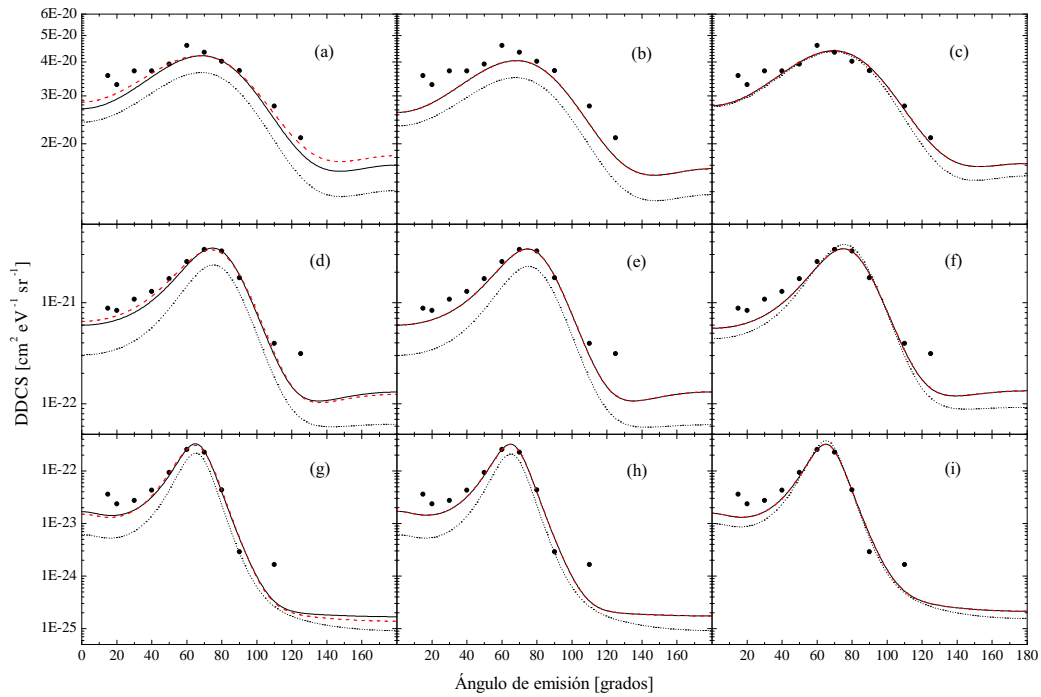


FIG. 2.3 – DDCS pour l'émission électronique dans des collisions H^+ sur He pour une énergie de 1.5 MeV en fonction de l'angle d'émission et pour une énergie de l'électron de 10 eV (figures 2.a, 2.b, 2.c), 100 eV (figures 2.d, 2.e, 2.f) et 500 eV (figures 2.g, 2.h, 2.i). Fonctions d'onde RHF *simple-zeta* (figures 2.a, 2.d, 2.g) et *cinq-zeta* (figures 2.b, 2.c, 2.e, 2.f, 2.h, 2.i) ont été utilisés pour décrire l'état initial lié. Charges asymptotique (figures 2.a, 2.b, 2.d, 2.e, 2.g, 2.h) et effective (figures 2.c, 2.f, 2.i) ont été pris en compte dans le continuum de l'électron actif dans la voie de sortie. Théorie : —, calculs CDW-EIS post complète; ·····, calculs CDW-EIS post; - - -, calculs CDW-EIS prior. Résultats Experimentaux : ●, Toburen *et al.* extrait de [6].

Chapitre 3

Modèle des ondes distordues à quatre corps

3.1 Introduction

Nous proposons ici d'étudier les processus à quatre corps pour la simple ionisation via un modèle à quatre corps. Nous présentons ici un nouveau modèle à quatre corps dans le ondes dans l'approximation des ondes distordues. Dans ce modèle, chacun des électrons interagit simultanément avec l'autre, de sorte que leurs évolutions dynamiques dans le temps sont interdépendantes tout au long de la collision. En conséquence, les deux électrons sont corrélées dynamiquement, d'où une représentation à quatre corps, même si seuls les états du continuum asymptotique de l'électron éjecté sont pris en compte dans le modèle. Ceci est complètement différent des modèles basés sur des représentations à trois corps où chaque électron actif évolue indépendamment de l'autre.

3.2 La théorie

Prenons l'impact d'un ion rapide nus de charge Z_P sur une cible Z_T à deux électrons actifs. Nous décrivons la réaction de simple ionisation électronique en utilisant l'approximation du paramètre d'impact. La réaction est décrite à partir d'un repère fixe lié au noyau cible, et l'équation de Schrödinger associée s'écrit

$$\begin{aligned} \left(H - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_{\alpha,\beta}^{+,-} = & \left[\sum_{j=1,2} \left(-\frac{1}{2} \nabla_{x_j}^2 - \frac{Z_T}{x_j} - \frac{Z_P}{s_j} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} + \frac{Z_T Z_P}{R} - i \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi_{\alpha,\beta}^{+,-} = 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

12 La théorie

avec \vec{x}_j et \vec{s}_j désignant le vecteur position de l'électron j ($j = 1, 2$), vu du noyau cible et du projectile, respectivement, t le temps de collision, \vec{R} le vecteur internucléaire, et Ψ_α^+ et Ψ_β^- les solutions exactes entrantes et sortantes, respectivement.

Les fonctions d'onde distordues initiales et finales sont choisis comme

$$\begin{aligned} \chi_\alpha^+(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = & \varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{L}_\alpha^+(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \times \\ & \times \exp \left[i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln (vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \times \\ & \times \exp(-iE_\alpha t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

et

$$\begin{aligned} \chi_\beta^-(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = & \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathcal{P}_{12}) \left[\varphi_\beta(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{L}_\beta^-(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \right] \times \\ & \times \exp \left[-i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln (vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \times \\ & \times \exp(-iE_\beta t) \end{aligned} \quad (3.3)$$

ou les deux fonctions de distortions sont donnés pour l'initial \mathcal{L}_α^+ et final \mathcal{L}_β^- sont données par

$$\mathcal{L}_\alpha^+(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = \prod_{j=1,2} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_j) = \prod_{j=1,2} \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln (vs_j + \vec{v} \cdot \vec{s}_j) \right] \quad (3.4)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\beta^-(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = & \mathcal{F}_\beta^-(\vec{s}_1) \mathcal{E}_\beta^-(\vec{s}_2) = N^* \left(\frac{Z_P}{p} \right) {}_1F_1 \left[-i \frac{Z_P}{p}, 1, -i(ps_1 + \vec{p} \cdot \vec{s}_1) \right] \times \\ & \times \exp \left[i \frac{Z_P}{v} \ln (vs_2 - \vec{v} \cdot \vec{s}_2) \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

avec $N(a) = \exp(\pi a/2) \Gamma(1 - ia)$ (Γ est la fonction Gamma) est le facteur de normalisation de ${}_1F_1$, la fonction hypergeometric.

Si les fonctions d'onde exactes Ψ_α^+ et Ψ_β^- sont remplacées par χ_α^+ et χ_β^- respectivement, a premier-ordre de la version prior en fonction du parameter impact de l'amplitude de

transition pour l'approximation quatre corps s'écrit comme

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) = & i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp[i(E_\beta - E_\alpha)t] \\
 & \int d^3x_1 d^3x_2 \left\{ \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathcal{P}_{12}) \left\{ \left[\varphi_\beta(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{L}_\beta^-(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \right]^* \right\} \right] \times \right. \\
 & \times \sum_{\substack{j,k=1,2 \\ j \neq k}} \left[\varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_k) \frac{\nabla_{s_j}^2}{2} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_j) + \right. \\
 & \left. \left. + \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_k) \nabla_{x_j} \varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \nabla_{s_j} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_j) \right] \right\} \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

Nous pouvons appeler cette approximation *four-body distorted wave-eikonal initial state* (4B-DW-EIS).

Dans nos calculs (3.6) l'état fondamental de la cible (helium) est décrit par la Roothaan-Hartree-Fock approximation tabulé en référence [4] :

$$\varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \phi_\alpha(\vec{x}_1) \phi_\alpha(\vec{x}_2) \quad (3.7)$$

Cette fonction d'onde décrit approximativement 98.7% de la corrélation radial. La fonction d'onde à deux électrons φ_β est choisit comme

$$\begin{aligned}
 \varphi_\beta(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = & \phi_\beta^c(\vec{x}_1) \phi_\beta(\vec{x}_2) = \phi_\beta(\vec{x}_2) \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}_1)}{(2\pi)^{3/2}} \times \\
 & \times N^* \left(\frac{Z_T - 1}{k} \right) \times \\
 & \times {}_1F_1 \left[-i \frac{(Z_T - 1)}{k}, 1, -i(kx_1 + \vec{k} \cdot \vec{x}_1) \right] \quad (3.8)
 \end{aligned}$$

où \vec{k} est le vecteur d'onde de l'électron éjecté vu du noyau cible. Dans (3.8), ϕ_β représente un état hydrogénoïde final.

3.3 Résultats

Les sections efficaces doublement différentielles (DDCS) sont obtenues en utilisant la 4B-DW-EIS et CB-CDW-EIS [7]. Les résultats sont présentés dans les figures 3.1 et 3.2 pour le cas de 1.5 MeV $H^+ + \text{He}$. Une incertitude de l'ordre de 10% dans la détermination des valeurs de 4B DDCS-DW-EIS est produite en raison d'une singularité apparaissant

dans l'intégrande qui n'affecte pas le profil des intégrales (ou des DDCS). Nous l'avons vérifié numériquement que les valeurs moyennes des 4B-DW-EIS DDCS surestime CB-CDW-EIS DDCS dans la limite de cette incertitude (pour l'éjection vers l'avant à des énergies très d'émissions faibles), nous avons normalisé les résultats 4B-DW-EIS à CB-CDW-EIS pour des électrons d'émission de 1 eV des électrons. Ainsi, la comparaison entre les deux modèles donnent une limite inférieure de la corrélation dynamique électronique. Les résultats sont présentés en fonction de l'énergie finale de l'électron éjecté pour des angles fixes d'émission électronique de 0° et 40° (figure 3.1) et en fonction de l'angle d'émission pour une énergie des électrons fixé à 300 eV (figure 3.2.a) et 500 eV (figure 3.2.b).

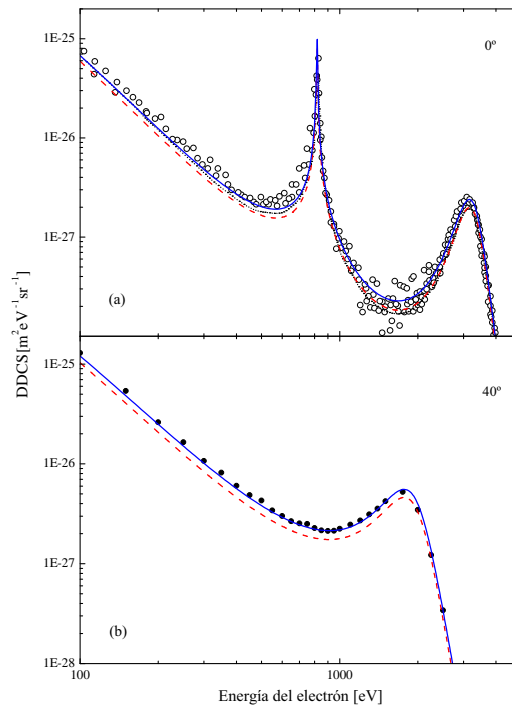


FIG. 3.1 – DDCS pour l'émission électronique dans des collisions H^+ sur He pour une énergie de 1.5 MeV en fonction de l'énergie de l'électron éjecté et pour un angle d'émission de 0° et 40° fixé. Théorie : —, 4B-DW-EIS ; - - -, CB-CDW-EIS ; ·····, post CDW-EIS [9]. Résultats Experimentaux : \circ , Lee *et al.* [5]; \bullet , Toburen *et al.* extrait de [6].

Un bon accord entre les deux modèles avec les données expérimentales [5, 6, 8] est trouvé. Nous remarquons que seul l'état final de $He^+(1s)$ est considéré dans les calculs, qui est la voie dominante pour cette réaction d'ionisation. La différence entre 4B-DW-EIS et CB-CDW-EIS semble être plus important dans l'émission avant et en arrière.

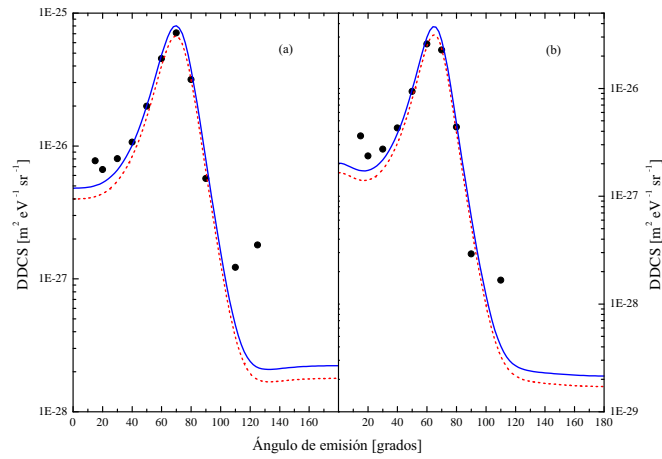


FIG. 3.2 – DDCS pour l'émission électronique dans des collisions H^+ sur He pour une énergie de 1.5 MeV en fonction de l'angle d'émission et pour (a) 300 eV et (b) 500 eV. Théorie : —, 4B-DW-EIS ; - - - , CB-CDW-EIS. Résultats Experimentaux : ● , Toburen *et al.* extrait de [6].

Chapitre 4

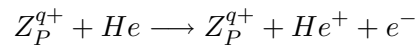
Ionisation simple de He par impact d'ions non nus et interférences quantiques

4.1 Introduction

Nous avons étendu les modèles CDW-EIS (voir Monti *et al.* [10]) et CDW (Monti *et al.* [11]) pour le cas d'ions possédant des couches électroniques non vides représenté via un potentiel GSZ [12, 13, 14].

4.2 La théorie

Nous considérons la simple ionisation de He par un ion charge nucléaire Z_P et de degré d'ionisation q , les électrons du projectile sont considérés gelés durant la collision :



Le problème se réduit à un électron résolvant l'Hamiltonien :

$$H_a = H_T + V_P(\vec{s}) \quad (4.1)$$

avec

$$H_T = -\frac{\nabla_x^2}{2} + V_T(\vec{x}) \quad (4.2)$$

$$V_T = -\frac{Z_T}{x} + \left\langle \varphi_i \left| \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (4.3)$$

où \vec{x} (\vec{x}_j) représente le vecteur position de l'électron actif (le j -ème électron passif de la cible) à partir d'un repère fixe lié au noyau cible, $\vec{s} = \vec{x} - \vec{R}$ est le vecteur position de l'électron actif à partir d'un repère fixe dans le noyau projectile, Z_T est la charge cible nucléaire, V_T et V_P sont les potentiels de la cible et du projectile ressentie par l'électron actif, enfin \vec{R} est le vecteur internucléaire. Dans (4.3) φ_i représente la distribution des électrons passifs de la cible.

Le potentiel GSZ peut être séparé en un terme à courte portée plus un terme à longue portée :

$$V_P(s) = V_P^{sr}(s) + V_P^{lr}(s) \quad (4.4)$$

ou

$$V_P^{sr}(s) = -\frac{1}{s}(Z_P - q) \left[H(e^{s/d} - 1) + 1 \right]^{-1} \quad (4.5)$$

$$V_P^{lr}(s) = -\frac{q}{s} \quad (4.6)$$

et H et d sont des paramètres ajustables (voir Szydlik et Green [13], Garvey *et al.* [14]).

Dans le formalisme des ondes distordues l'écriture en fonction de V_P (4.4) des amplitudes de transition peut être séparé en deux termes

$$a_{if}^{\pm}(\vec{\rho}) = a_{if}^{lr,\pm}(\vec{\rho}) + a_{if}^{sr}(\vec{\rho}), \quad (4.7)$$

ou

$$a_{if}^{lr,+}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| \left(-\frac{\nabla_x^2}{2} + V_T(\vec{x}) - \frac{q}{s} - i\frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \chi_i^+ \right\rangle \quad (4.8)$$

$$a_{if}^{lr,-}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| \left(-\frac{\nabla_x^2}{2} + V_T(\vec{x}) - \frac{q}{s} - i\frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \chi_i^+ \right\rangle, \quad (4.9)$$

et

$$a_{if}^{sr}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| \left(-\frac{1}{s}(Z_P - q) \left[H(e^{s/d} - 1) + 1 \right]^{-1} \right) \right| \chi_i^+ \right\rangle. \quad (4.10)$$

où, $a_{if}^{lr,\pm}$ sont les amplitudes de transition correspondant à l'ionisation simple par un impact d'ions de charge q nu, et a_{if}^{sr} est un nouveau terme qui est lié à la partie à courte portée du potentiel V_P .

4.3 Résultats pour $U^{21+} + He$

Nous avons considéré le cas d'un ion U^{21+} de 1 MeV/u sur un atome d'He, pour ce système. Reinhold *et al.* ([15]) ont montré que les interférences dans la section efficace élastique pour la diffusion de l'électron cible avec le projectile partiellement habillés qui apparaissent au sommet du pic binaire est un résultat d'effets d'interférences quantiques. Dans la figure 4.1 nous présentons les résultats pour la section efficace doublement différentielle (DDCS) en fonction de l'énergie de l'électron éjecté pour un angle d'émission fixe de 35° . Pour ce cas, le modèle CTMC-IA prédit des interférences dues à des effets quantiques dans la section efficace élastique. Notre calcul CDW-EIS montre également une structure dans la région du pic binaire. Les potentiels à long terme et à court-terme peuvent expliquer ses structures de l'interférencielles cohérente.

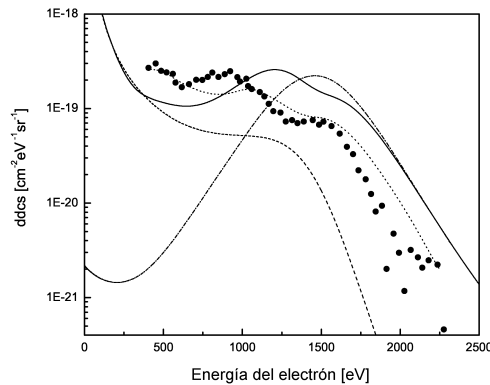


FIG. 4.1 – DDCS pour l'émission électronique dans des collisions $U^{21+} + He$ pour une énergie de 1 MeV en fonction de l'énergie de l'électron émit pour 35° . Théory : —, modèle actuel CDW-EIS ; - - -, calcul CDW-EIS avec uniquement la contribution asymptotique du potentiel ; — · —, calcul CDW-EIS avec uniquement la contribution courte- portée du potentiel ; ·····, CTMC-IA Reinhold *et al.* [15]. Données expérimentales : Reinhold *et al.* [15].

Bibliographie

- [1] Stolterfoht N, DuBois R D et Rivarola R D 1997 *Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions* ed. Springer.
- [2] Monti J M, Fojón O A, Hanssen J et Rivarola R D 2010 *J. At. Mol. Opt. Phys.* **2010** 128473.
- [3] Monti J M, Fojón O A, Hanssen J et Rivarola R D 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 205203.
- [4] Clementi E et Roetti C 1974 *Atomic Data et Nuclear Data Tables* **14** 177.
- [5] Lee D H, Richard P, Zouros T J M, Seters J M, Shinpaugh J M et Hidmi H 1990 *Phys. Rev. A* **24** 97.
- [6] Rudd M E, Toburen L H et Stolterfoht N 1976 *Atomic Data et Nuclear Data Tables* **18** 413.
- [7] Monti J M, Fojón O A, Hanssen J, Rivarola R D 2009 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42** 195201.
- [8] Pedersen J O P, Hvelplund P, Petersen A G et Fainstein P D 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 4001.
- [9] Gulyás L, Fainstein P D et Salin A 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 245.
- [10] Monti J M, Fainstein P D et Rivarola R D 2009 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42** 195201.
- [11] Monti J M, Fainstein P D et Rivarola R D, *to be published*.
- [12] Green A E S, Sellin D L et Zachor A S 1969 *Phys. Rev.* **184** 1.
- [13] Szydlík P P et Green A E S 1973 *Phys. Rev. A* **9** 1885.
- [14] Garvey R H, Jackman C H et Green A E S 1975 *Phys. Rev.* **12** 1144.
- [15] Reinhold C O, Schultz D R, Olson R E, Kelbch C, Koch R et Schmidt-Böcking H 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1842.

Agradecimientos

Deseo expresar un profundo agradecimiento a quienes de forma directa o indirecta han contribuido con este trabajo.

Principalmente a mis directores, con quienes he compartido estos cinco años de formación:

a Roberto Rivarola quien ha sabido ser la combinación justa de director, amigo, maestro, y hasta compañero de viajes y de trabajo! un verdadero Sensei. Gracias Rober!

a Jocelyn Hanssen quien me brindó su amistad desde el primer día, y con quien he pasado muy agradables momentos de trabajo en Metz, gracias por las discusiones y la buena voluntad que siempre mostraste. Merci Joc!

a Omar Fojón, siempre a tiempo para salvarme cuando estaba perdido sin saber para donde ir, gracias por las discusiones y las siempre certeras correcciones. Gracias Omar!

Quiero también agradecer a Pablo Fainstein por las colaboraciones, la atención de consultas a la distancia y por la buena voluntad de pasarme muchas de las herramientas que utilicé en este trabajo. Gracias Pablo!

También quiero agradecer a todos los integrantes del grupo de Colisiones Atómicas. Les agradezco su amistad, compañerismo, cariño. A mi compañero de estudio y gran amigo Sebastián Costamagna con quien compartí gran parte de mi carrera. Gracias compañeros!

Igualmente a los integrantes del Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions de la Universidad Paul Verlaine-Metz quienes me han tratado de forma excelente en cada visita. Gracias amigos Metzinos!

*Y finalmente a mi familia, a mis amigos y mi querida compañera quienes también hacen lo suyo para que uno siga adelante y llegue a la meta. Gracias a todos!
Gracias a DIOS.*

Juan

Esta tesis, realizada gracias a una beca de doctorado otorgada por CONICET y a una ayuda económica de la fundación Josefina Prats, está basada en los siguientes trabajos científicos

- * **Quantum interferences in Swift highly-charged dressed- ion – atom collisions.** J. M. Monti, R. D. Rivarola, P. D. Fainstein. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 201001 (2008).
- * **A four-body fully distorted wave – eikonal initial state model for ionization of He targets by ion impact.** J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen, R. D. Rivarola. *Journal of Physics Conference Series* **163**, 012068 (2009).
- * **Ionization of helium targets by proton impact. A four-body distorted wave eikonal initial state model and electron dynamic correlation.** J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen, R. D. Rivarola. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42**, 195201 (2009).
- * **A Distorted Wave model for electron ionization in collisions between clothed-ions and atomic targets.** J. M. Monti, P. D. Fainstein, R. D. Rivarola. *Journal of Physics Conference Series* **194**, 082012 (2009).
- * **A Four-Body Fully Distorted Wave-Eikonal Initial State model for ionization of He by ion impact.** J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen, R. D. Rivarola. *Journal of Physics Conference Series* **194**, 082013 (2009).
- * **A complete post-version of the three-body continuum distorted wave-eikonal initial state approximation for single ionization of multielectron atoms.** J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen, R. D. Rivarola. *Journal of Atomic, Molecular, and Optical Physics* **2010**, 128473 (2010).
- * **Modelo de cuatro cuerpos para la ionización simple de átomos de He por impacto de protones.** J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen, R. D. Rivarola. *Anales AFA* **21**, A112 (2010).
- * **Influence of the dynamic screening on single electron ionization of multielectron atoms.** J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen, R. D. Rivarola. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43**, 205203 (2010).
- * **Dynamic correlation in the electron angular distribution in ionization of helium by ion impact.** J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen, R. D. Rivarola. *Journal of Physics Conference Series* (en prensa).
- * **Quantum interferences in single ionization of He by highly charged dressed-ions impact.** J. M. Monti, P. D. Fainstein, R. D. Rivarola. *Physica Scripta T* (aceptado para publicación).

Resumen

En esta tesis se estudian los efectos de la interacción electrónica en el proceso de ionización simple de blancos atómicos por impacto de iones múltiplemente cargados, pudiendo ser estos desnudos o parcialmente vestidos.

En el caso de proyectiles desnudos se estudia la interacción entre el electrón activo y los electrones pasivos, se reformula la versión *post* de la aproximación de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW-EIS por sus siglas en inglés) incluyendo un potencial residual omitido en cálculos anteriores. Además se desarrolla un modelo de onda distorsionada de cuatro cuerpos para la ionización simple de átomos dielectrónicos en el que ambos electrones son considerados como activos y evolucionando en un mismo marco temporal.

En el caso de considerar como proyectiles iones parcialmente vestidos se estudia la interacción entre el electrón activo del blanco y aquellos ligados al proyectil mediante el desarrollo un modelo de onda distorsionada en el que el potencial perturbador del proyectil se separa en dos términos: uno de largo rango determinado por la carga neta del proyectil totalmente apantallado y otro de corto rango dado por los electrones ligados al proyectil. Este último se aproxima utilizando un potencial paramétrico de tipo GSZ (Green-Sellin-Zachor).

Índice general

Índice general	I
Índice de figuras	III
I Introducción	1
1. Introducción	3
1.1. Introducción general	3
1.2. Teoría formal de dispersión	5
1.2.1. La representación de interacción	6
1.2.2. La matriz S	7
1.2.3. Probabilidad de transición	11
1.2.4. La serie de Born	14
1.2.5. Convergencia de la serie de Born	16
1.2.6. Formalismo de onda distorsionada	18
1.2.7. Potenciales de largo rango	25
1.3. El método de parámetro de impacto	25
1.3.1. Cálculo de la amplitud de transición	26
1.3.2. Tratamiento del potencial internuclear	31
1.3.3. Relación entre T_{if}^{\pm} y a_{if}^{\pm}	35
1.4. Modelos de onda distorsionada	36
1.4.1. Aproximación CDW	37
1.4.2. Aproximación SE	39
1.4.3. Aproximación CDW-EIS	41
II Projectiles desnudos	43
2. Apantallamiento electrónico dinámico	45
2.1. Introducción	45
2.2. Teoría	47
2.2.1. Versión prior de la amplitud de dispersión	51
2.2.2. Versión post de la amplitud de dispersión	52
2.3. Resultados	57
2.3.1. Resultados para una representación <i>single-zeta</i> RHF del blanco	58
2.3.2. Resultados para una representación <i>five-zeta</i> RHF del blanco	62
2.4. Conclusiones	69

II Índice general

3. Modelo de onda distorsionada de cuatro cuerpos	71
3.1. Introducción	71
3.2. Teoría	73
3.3. Resultados	82
3.3.1. Secciones eficaces doble diferenciales en función de la energía del electrón	82
3.3.2. Secciones eficaces doble diferenciales en función del ángulo de emisión	89
3.4. Conclusiones	91
III Projectiles parcialmente vestidos	93
4. Ionización simple de átomos de He por proyectiles vestidos	95
4.1. Introducción	95
4.2. Teoría	96
4.2.1. Aproximación CDW-EIS	98
4.2.2. Aproximación CDW	102
4.3. Resultados	104
4.3.1. Resultados $U^{21+} + He$	104
4.3.2. Resultados $Au^{11+} + He$	107
4.3.3. Resultados $F^{q+} + He$	109
4.4. Conclusiones	111
IV Conclusiones generales - Apéndices - Bibliografía	113
5. Conclusiones generales	115
A. Apéndices del Capítulo 2	119
A.1. Cálculo del potencial V_{ap}	119
A.1.1. Potencial V_{ap} para una representación <i>five-zeta</i> RHF del blanco . . .	119
A.1.2. Potencial V_{ap} para una representación <i>single-zeta</i> RHF del blanco . .	121
B. Apéndices del Capítulo 4	123
B.1. Cálculo de los parámetros H y d del potencial de corto rango	123
Bibliografía	127

Índice de figuras

1.1. Sistema de coordenadas	27
2.1. DDCS <i>single-zeta</i> para 1 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para un ángulo fijo de emisión 0°	59
2.2. DDCS <i>single-zeta</i> para 1 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para un ángulo fijo de emisión 30°	60
2.3. DDCS <i>single-zeta</i> para 1.5 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para un ángulo fijo de emisión 0°	60
2.4. DDCS <i>single-zeta</i> para 1.5 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para un ángulo fijo de emisión 30°	61
2.5. DDCS <i>single-zeta</i> para 1 MeV $H^+ + He$ en función del ángulo de emisión para una energía fija del electrón eyectado de 100 eV.	61
2.6. DDCS <i>single-zeta</i> para 1.5 MeV $H^+ + He$ en función del ángulo de emisión para una energía fija del electrón eyectado de 100 eV.	62
2.7. DDCS <i>five-zeta</i> para 1 MeV $H^+ + He$ en función del ángulo de emisión para energía fija del electrón eyectado de 10 eV, 100 eV y 500 eV.	65
2.8. DDCS <i>five-zeta</i> para 1.5 MeV $H^+ + He$ en función del ángulo de emisión para energía fija del electrón eyectado de 10 eV, 100 eV y 500 eV.	66
2.9. DDCS <i>five-zeta</i> para 100 keV y 500 keV $H^+ + He$ en función del ángulo de emisión para energía fija del electrón eyectado.	67
2.10. SDCS <i>five-zeta</i> en función de la energía del electrón, energía de colisión: 300 keV.	68
2.11. SDCS <i>five-zeta</i> en función de la energía del electrón, energía de colisión: 1 MeV.	68
2.12. SDCS <i>five-zeta</i> en función de la energía del electrón, energía de colisión: 1.5 MeV.	69
3.1. DDCS para 1 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para ángulos fijos de emisión de 15° , 50° y 90°	85
3.2. DDCS para 1.5 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para ángulos fijos de emisión de 20° , 50° y 125°	86
3.3. DDCS para 4.2 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para ángulos fijos de emisión de 22.5° , 90° y 150°	87
3.4. DDCS para 1.5 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para ángulos fijos de emisión de 0° y 40°	88
3.5. DDCS para 1 MeV y 4.2 MeV $H^+ + He$ en función de la energía del electrón para ángulos fijos de emisión de 20° y 22.5° , respectivamente.	89
3.6. DDCS para 1 MeV $H^+ + He$ en función del ángulo de emisión para energías fijas del electrón de 100 eV y 300 eV.	90

IV Índice de figuras

3.7. DDCS para 1.5 MeV $H^+ + He$ en función del ángulo de emisión para energías fijas del electrón de 300 eV y 500 eV.	90
3.8. DDCS para 4.2 MeV $H^+ + He$ en función del ángulo de emisión para energías fijas del electrón de 341 eV y 1166 eV.	91
4.1. DDCS para 1 MeV/u $U^{21+} + He$ en función de la energía del electrón para ángulo fijo de emisión de 30°	106
4.2. DDCS para 1 MeV/u $U^{21+} + He$ en función de la energía del electrón para ángulo fijo de emisión de 35°	107
4.3. DDCS para 1 MeV/u $U^{21+} + He$ en función de la energía del electrón para ángulo fijo de emisión de 40°	107
4.4. DDCS para 0.6 MeV/u $Au^{11+} + He$ en función de la energía del electrón para ángulo fijo de emisión de 25°	108
4.5. DDCS para 0.6 MeV/u $Au^{11+} + He$ en función de la energía del electrón para ángulo fijo de emisión de 27.5°	109
4.6. DDCS para 0.6 MeV/u $Au^{11+} + He$ en función de la energía del electrón para ángulo fijo de emisión de 30°	109
4.7. Relación $DDCS(q)/DDCS(9)$ de altura del pico binario a 0° para 1 MeV/u y 1.5 MeV/u $F^{q+} + He$	110
B.1. Parámetros η_0 y ξ_0 en función del número N de electrones.	126
B.2. Parámetros η_1 y ξ_1 en función del número N de electrones.	126

Parte I

Introducción

Capítulo 1

Introducción y teoría de colisiones atómicas

“La imposibilidad de penetrar el esquema divino del universo no puede, sin embargo, disuadirnos de planear esquemas humanos, aunque nos conste que éstos son provisorios”.

El idioma analítico de John Wilkins. Jorge Luis Borges.

1.1. Introducción general

Al inicio del estudio de un proceso de colisión ion-átomo se debe, en primera instancia, definir el rango de energías de impacto de interés. Típicamente se distinguen tres rangos de energía, a saber: energías bajas, intermedias y altas. Definir el rango de energía de interés resulta importante debido a que cada uno de éstos demanda un tratamiento teórico diferente. El rango de energía puede determinarse al comparar la velocidad v relativa entre el núcleo del proyectil y el del blanco con la *velocidad orbital* v_e de los electrones involucrados en la reacción. La velocidad orbital v_e de un electrón está determinada por la energía cinética media del orbital atómico en el que se encuentra (inicialmente o al final para el caso de captura).

El caso $v \ll v_e$ corresponde al rango de energías bajas. En este caso, al ser la velocidad orbital de los electrones del blanco mucho mayor que la velocidad relativa de los núcleos, los primeros pueden adaptarse instante a instante a las variaciones de las posiciones de los últimos. Este rango de energías también es denominado rango de energías moleculares debido a que es necesario recurrir al uso orbitales moleculares para una correcta descripción de los orbitales electrónicos que se forman durante la colisión.

Cuando $v \gg v_e$ se tiene el caso de energías altas. Aquí la interacción es súbita, debido

a lo cual los electrones no pierden su carácter atómico y los orbitales electrónicos pueden describirse correctamente como combinación de orbitales atómicos.

Por último, cuando $v \approx v_e$ se tiene el caso de energías intermedias. Generalmente el tratamiento teórico del caso de energías intermedias resulta más dificultoso que el resto debido a que no resulta clara la forma de describir los orbitales electrónicos. En este rango de energías usualmente se aplican métodos teóricos desarrollados para energías bajas o altas, o bien combinaciones de los mismos.

Luego, son muchos los posibles resultados del proceso de colisión entre un ion y un blanco atómico, pudiendo producirse la captura, excitación o la ionización ya sea de un solo electrón o de varios electrones del blanco; éstos son llamados procesos simples y múltiples, respectivamente. En el régimen de energía altas e intermedias los procesos múltiples, resultan generalmente de una importancia menor que los simples y usualmente se diferencia al electrón que cambia de estado de aquellos que resultan poco afectados en la colisión. Al primero se lo llama electrón *activo* y a los segundos electrones *pasivos*. Esta discriminación hace posible extender los formalismos teóricos desarrollados para blancos monoelectrónicos al caso de blancos multielectrónicos mediante la reducción del problema de varios electrones al de un electrón activo que evoluciona en un potencial efectivo debido a los electrones pasivos.

El objetivo principal de este trabajo es el estudio de la influencia de las interacciones electrónicas en el proceso de ionización simple de blancos atómicos por impacto de iones múltiplemente cargados, pudiendo ser estos últimos iones desnudos o parcialmente vestidos, en el rango de energías de impacto altas e intermedias. Esta tesis se divide en cuatro partes principales. En la presente se encuentra la actual introducción y conceptos relacionados a la teoría de colisiones atómicas que resultan de interés y necesarios para el desarrollo del trabajo de tesis. Las partes segunda y tercera corresponden a considerar como proyectiles iones desnudos o parcialmente vestidos, respectivamente. En la segunda parte, en el Capítulo 2, se ve la forma *post* de aproximación de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State, CDW-EIS) [61] para el estudio la ionización simple de átomos multielectrónicos. En esta revisión se considera un potencial residual omitido en cálculos anteriores y cuya introducción permite un correcto tratamiento de la interacción entre el electrón activo y los electrones pasivos. Esta interacción depende de la distribución de los electrones pasivos alrededor del núcleo del blanco y afecta la dinámica del electrón activo. Como consecuencia

de su inclusión en los cálculos de secciones eficaces se obtiene la desaparición de las discrepancias entre las formas *post* y *prior* de la aproximación de onda distorsionada CDW-EIS. En el Capítulo 3 se presenta el desarrollo de un modelo de onda distorsionada de cuatro cuerpos para el estudio de la ionización simple de átomos dielectrónicos por impacto de iones desnudos en el que ambos electrones se consideran como activos y evolucionando en un mismo marco temporal. Este modelo permite incluir lo que llamamos correlación electrónica dinámica. La comparación de los resultados obtenidos de este modelo con aquellos que se obtienen utilizando un modelo de electrones dinámicamente no correlacionados permite evaluar la contribución de la correlación electrónica dinámica en el proceso de ionización.

La tercera parte de este trabajo de tesis corresponde al estudio de la ionización simple de átomos de He por impacto de iones parcialmente vestidos. En el Capítulo 4 se evalúa la interacción entre el electrón activo y aquellos electrones ligados al proyectil, la cual se introduce a través de un potencial paramétrico de corto rango del tipo GSZ (Green-Sellin-Zachor). De esta forma el potencial perturbador del proyectil se separa en dos términos: un potencial de corto rango debido a la distribución electrónica alrededor del proyectil y uno de largo rango determinado por la carga neta del proyectil totalmente apantallado. Este modelo permite interpretar ciertas estructuras encontradas en espectros experimentales de secciones eficaces doble diferenciales en términos de efectos de interferencia coherente entre las contribuciones de corto y largo rango del potencial del proyectil a la amplitud de transición.

Finalmente, en la cuarta y última parte se presentan las conclusiones generales, apéndices y bibliografía completa de la tesis.

Se utilizará, a menos que se especifique lo contrario, el sistema de unidades atómicas (u.a.) en el cual la carga y masa del electrón se toman como la unidad de carga y unidad de masa: $e = 1$, $m = 1$, respectivamente, y además $\hbar = 1$ y $4\pi\epsilon_0 = 1$.

1.2. Teoría formal de dispersión

En esta sección presentamos el formalismo dependiente del tiempo en el cual se estudia la evolución temporal de dos o más sistemas físicos que se aproximan, interactúan y finalmente se separan. Así, cualquier proceso de colisión puede pensarse en términos de tres intervalos: en el primer intervalo los agregados de la colisión son preparados (aislados

unos de otros) en sus correspondientes estados iniciales, la interacción toma lugar en el segundo intervalo, y en el tercer intervalo el estado final post colisional de los agregados (o de alguno de ellos) es observado mediante algún aparato de medición. A continuación presentaremos la teoría formal de dispersión aplicada a estados puros.

1.2.1. La representación de interacción

En mecánica cuántica, en lo que a representaciones refiere, por un lado se encuentra la representación de Schrödinger en la cual los observables son operadores hermíticos independientes del tiempo y toda la dependencia temporal se encuentra contenida en las funciones de onda. En el otro extremo se encuentra la representación de Heisenberg en la cual las funciones de onda son constantes en el tiempo y los operadores que representan observables son explícitamente dependientes del tiempo. En algún lugar entre estas dos representaciones se encuentra la que llamamos la representación de interacción que es particularmente útil para describir la interacción entre dos sistemas cuánticos, y es la que utilizaremos en esta sección.

En ausencia de influencias externas la evolución de un sistema cuántico es estrictamente causal. Es decir que conocido el estado del sistema cuántico en algún tiempo t_0 puede conocerse, a través de alguna ecuación de movimiento, el estado del sistema en cualquier tiempo siguiente. En la representación de Schrödinger la ecuación de movimiento a resolver es la ecuación de Schrödinger

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H\Psi(t) \tag{1.1}$$

donde

$$H = H_0 + V \tag{1.2}$$

es el Hamiltoniano total del sistema, H_0 es el Hamiltoniano *no perturbado* que describe los agregados aislados antes del proceso de colisión y V la interacción entre ellos. La función Ψ representa la función de onda del sistema físico constituido por todas las partículas de los agregados de la colisión.

Al ser (1.1) una ecuación que responde a una dinámica causal, si conocemos $\Psi(t_0)$ entonces podemos conocer $\Psi(t)$ a través de un operador de propagación, de la forma:

$$\Psi(t) = U_{Sch}(t, t_0)\Psi(t_0) \tag{1.3}$$

con

$$U_{Sch}(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)}. \quad (1.4)$$

En la representación de interacción, la función de onda total se conecta con la función de onda total de la representación de Schrödinger mediante la relación:

$$\Psi_I(t) = e^{iH_0 t} \Psi(t). \quad (1.5)$$

Luego, reemplazando (1.5) en (1.1) se obtiene la ecuación de evolución en la representación de interacción:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_I(t) = V(t) \Psi_I(t) \quad (1.6)$$

con $V(t) = e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}$. Análogamente a lo encontrado para el caso de la representación de Schrödinger, puede definirse el operador de propagación en la representación de interacción, el cual está dado por [1]:

$$U(t, t_0) = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t}, \quad (1.7)$$

de manera que la evolución de la función de onda total en la representación de interacción resulta

$$\Psi_I(t) = U(t, t_0) \Psi_I(t_0). \quad (1.8)$$

1.2.2. La matriz S

Podemos suponer que en un tiempo muy anterior a la colisión ($t = -\infty$) el sistema se prepara en un estado específico $\Psi_I(-\infty)$. Luego a tiempo muy posterior a la colisión ($t = +\infty$) tendremos que el sistema ha evolucionado al estado $\Psi_I(+\infty)$ de la forma:

$$\Psi_I(+\infty) = S \Psi_I(-\infty), \quad (1.9)$$

donde S es el operador de dispersión que se relaciona con el operador de propagación:

$$S = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow +\infty}} U(t, t_0). \quad (1.10)$$

Si la interacción entre los agregados es de corto alcance es lícito suponer que a tiempos $t = -\infty$ y $t = +\infty$ el sistema puede describirse en la base de autofunciones del Hamiltoniano no perturbado. De manera que si todavía no hay interacción al tiempo t_0 la función de onda en la representación de Schrödinger estará dada por

$$\Psi(t_0) = e^{-iE_i t_0} \psi_i \quad (1.11)$$

y pasando a la representación de interacción (1.5) obtenemos

$$\Psi_I(t_0) = \psi_i. \quad (1.12)$$

El estado final entonces puede expandirse en la base de autofunciones de H_0 de la forma:

$$\Psi_I(+\infty) = \sum_f a_f \psi_f. \quad (1.13)$$

De esta forma la amplitud para la transición del estado ψ_i a un estado ψ_f será directamente el coeficiente a_f en la expansión dada en (1.13)¹. Tal amplitud también puede escribirse como el elemento de matriz S_{if} :

$$\begin{aligned} S_{if} &= \langle \psi_f | S | \psi_i \rangle \\ &= \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow +\infty}} \langle \psi_f | U(t, t_0) | \psi_i \rangle \\ &= \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow +\infty}} \langle U(0, t) \psi_f | U(0, t_0) \psi_i \rangle. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Por lo tanto para calcular S_{if} se debe evaluar el efecto del operador $U(0, t)$ sobre las autofunciones del Hamiltoniano no perturbado:

$$U(0, t) \psi_a = e^{iHt} e^{-iE_a t} \psi_a. \quad (1.15)$$

Aquí ψ_a es una autofunción de H_0 del continuo de los agregados que contiene la estructura interna de cada uno de ellos (en el caso de tenerla).

¹Vale mencionar que $\psi_{i,f}$ verifican la ecuación de autovalores: $(H_0 - E_i, f) \psi_{i,f} = 0$.

El resultado obtenido en (1.15) es poco satisfactorio al intentar estudiar los límites $t \rightarrow \pm\infty$ ya que éstos no están definidos debido al carácter oscilatorio de las funciones exponenciales complejas. Sin embargo el cálculo es posible si se utiliza algún artificio que amortigüe las oscilaciones en $t \rightarrow \pm\infty$. Este puede encontrarse en el trabajo publicado por Gell-Mann y Goldberger [2].

Utilizando el artificio mencionado, se pueden definir los operadores de Møller Ω^\pm [2],

$$\Omega^\pm = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} U(0, t) \quad (1.16)$$

$$\Omega^\pm \psi_a = \Psi_a^\pm, \quad (1.17)$$

de manera que el operador $\Omega^{+(-)}$ actuando sobre una autofunción del continuo de H_0 genera una autofunción del continuo de H que satisface condiciones de contorno salientes (entrantes).

Tales autofunciones de H satisfacen las ecuaciones integrales ²

$$\Psi_a^\pm = \psi_a + [E_a - H \pm i\varepsilon]^{-1} V \psi_a. \quad (1.18)$$

Así, el elemento de matriz S_{if} del operador S adquiere la forma

$$\begin{aligned} S_{if} &= \langle \Psi_f^- | \Psi_i^+ \rangle \\ &= \langle \Psi_f^+ | \Psi_i^+ \rangle + \langle \Psi_f^- - \Psi_f^+ | \Psi_i^+ \rangle. \end{aligned} \quad (1.19)$$

En la ecuación (1.19) Ψ_i^+ y Ψ_f^+ verifican

$$\langle \Psi_f^+ | \Psi_i^+ \rangle = \delta_{if} \quad (1.20)$$

que es una delta de Dirac en energía y una delta de Kronecker en los números cuánticos, y después de algunos pasos algebraicos puede escribirse

$$S_{if} = \delta_{if} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{if} \quad (1.21)$$

donde

$$T_{if} = \langle \psi_f | V | \Psi_i^+ \rangle \quad (1.22)$$

²Aquí está implícito el límite $\varepsilon \rightarrow 0^+$.

es un elemento de matriz del operador T definido como

$$T\psi_i = V\Psi_i^+. \quad (1.23)$$

También (1.19) puede escribirse como

$$S_{if} = \langle \Psi_f^- | \Psi_i^- \rangle + \langle \Psi_f^- | \Psi_i^+ - \Psi_i^- \rangle \quad (1.24)$$

y resulta

$$S_{if} = \delta_{if} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{if} \quad (1.25)$$

siendo aquí

$$T_{if} = \langle \Psi_f^- | V | \psi_i \rangle. \quad (1.26)$$

Las ecuaciones (1.22) y (1.26) son las llamadas formas *post* y *prior*, respectivamente, del elemento de matriz T_{if} . En el caso de contar con funciones de onda exactas para $\Psi_{i,f}^{+,-}$ y $\psi_{i,f}$ estas expresiones para T_{if} resultan iguales; de no ser así pueden encontrarse las llamadas *discrepancias post-prior*.

Lo realizado hasta aquí es válido para las llamadas colisiones directas, en las cuales el Hamiltoniano no perturbado es el mismo antes y después de la colisión. Estas expresiones pueden generalizarse para el caso de colisiones con rearrreglo [1]. Para este tipo de reacciones es conveniente separar el Hamiltoniano total como

$$H = H_i + V_i = H_f + V_f. \quad (1.27)$$

Aquí H_i (H_f) y V_i (V_f) son el Hamiltoniano no perturbado y la perturbación correspondientes al canal inicial (final). Si se tiene interés en la transición de un autoestado de H_i a otro autoestado del mismo Hamiltoniano (colisión directa), el elemento de matriz de transición relevante resulta ser

$$T_{if} = \langle \psi_f | V_i | \Psi_i^+ \rangle \quad (1.28)$$

donde

$$\Psi_i^+ = \psi_i + [E_i - H + i\varepsilon]^{-1} V_i \psi_i \quad (1.29)$$

y ψ_i y ψ_f son autofunciones de H_i correspondientes a la misma energía total E_i . Aunque la función de onda Ψ_i^+ fue introducida para el caso de colisiones directas es claro que, al ser una autofunción del Hamiltoniano total H , representa una solución completa del problema de dispersión.

Si lo que se desea calcular es la probabilidad que un sistema, que en un tiempo anterior a la colisión está en un estado ψ_i de H_i , evolucione bajo la acción del Hamiltoniano H y finalmente termine en un autoestado específico ψ_f de H_f , se puede proceder de manera semejante. A pesar de que para colisiones con rearreglo ψ_i y ψ_f son autofunciones de distintos Hamiltonianos podemos no obstante redefinir el operador de transición T [3]

$$T\psi_i = V_f\Psi_i^+ \quad (1.30)$$

y podemos adoptar la notación

$$\begin{aligned} T_{if}^+ &= \langle \psi_f | T | \psi_i \rangle \\ &= \langle \psi_f | V_f | \Psi_i^+ \rangle \end{aligned} \quad (1.31)$$

Análogamente podemos escribir

$$T_{if}^- = \langle \Psi_f^- | V_i | \psi_i \rangle, \quad (1.32)$$

con

$$\Psi_f^- = \psi_f + [E_f - H - i\varepsilon]^{-1} V_f \psi_f. \quad (1.33)$$

Nuevamente (1.31) y (1.32) representan las formas *post* y *prior*, respectivamente, del elemento de matriz T_{if} .

1.2.3. Probabilidad de transición

A partir de lo visto en la sección anterior podríamos concluir que la probabilidad de encontrar al sistema en un estado ψ_f , habiendo estado el un estado inicial ψ_i , es directamente $|S_{if}|^2$. Esto, si bien es cierto, no representa una cantidad del todo significativa ya que representa la probabilidad para todo tiempo, y no debemos perder de vista que nuestra percepción del estado final del sistema es a través de algún experimento y éstos necesariamente tienen una duración necesariamente finita. De aquí que la cantidad que

merece estudio es la probabilidad de transición por unidad de tiempo, que para un tiempo t está dada por

$$\begin{aligned} w_{if} &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\langle \psi_f | U(t, t_0) | \psi_i \rangle|^2 \\ &= \frac{d}{dt} |\langle \psi_f | \Psi_I(t) \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.34)$$

$$= \langle \psi_f | \frac{\partial}{\partial t} \Psi_I(t) \rangle|^2. \quad (1.35)$$

Usando (1.6), (1.7) y (1.18) y la definición de T_{if} , resulta [1]:

$$w_{if} = 2\text{Im}(T_{ii})\delta_{if} + 2\pi\delta(E_i - E_f)|T_{if}|^2. \quad (1.36)$$

La ecuación (1.36) representa la probabilidad de transición por unidad de tiempo a un estado final de energía E_f bien definida. Nuevamente, para obtener cantidades que sean consistentes con los resultados experimentales, debemos calcular la probabilidad de transición no a un estado de energía E_f bien definida sino a una distribución de estados con energía definida en $[E_f - \Delta E, E_f + \Delta E]$. Entonces si $\rho(E)$ es la densidad de energía de estos estados por unidad de ángulo sólido, el número de estados cuyos vectores momento yacen en $d\Omega$ y con energía entre E y $E + dE$ resulta $\rho(E)dEd\Omega$. Entonces tendremos

$$W_{if} = \int_{E_f - \Delta E}^{E_f + \Delta E} \rho(E) w_{if} dEd\Omega. \quad (1.37)$$

Luego, si ψ_i no está entre los posibles estados finales (como es el caso de ionización del blanco), resulta

$$\begin{aligned} W_{if} &= \int_{E_f - \Delta E}^{E_f + \Delta E} \rho(E) \delta(E_i - E) 2\pi |T_{if}|^2 dEd\Omega \\ &= 2\pi \rho(E_f) |T_{if}|^2 d\Omega, \end{aligned} \quad (1.38)$$

con $E_f = E_i$.

Ahora una expresión para la densidad final de estados puede obtenerse considerando los posibles estados de una partícula libre en una caja con condiciones de contorno periódicas.

Al hacer esto resulta [1]:

$$\rho(E) = \frac{\mu k}{8\pi^3}, \quad (1.39)$$

donde μ es la masa de la partícula, k su momento y $E = k^2/2\mu$ su energía. Al aplicar este resultado a un problema de colisión E es ahora la energía asociada al movimiento relativo de los agregados de la colisión y μ es su masa reducida. Entonces (1.38) resulta

$$W_{if} = \frac{\mu_f k_f}{4\pi^2} |T_{if}|^2 d\Omega, \quad (1.40)$$

donde k_f es el momento relativo final entre los agregados.

Luego, si se tiene un flujo incidente de N partículas por unidad de tiempo y por unidad de área, el número de partículas por unidad de tiempo que pueden causar la transición deseada y son dispersadas a un elemento de ángulo sólido $d\Omega$ es $N\sigma(\Omega)d\Omega$. Y dado que W_{if} es la probabilidad de transición por unidad de tiempo correspondiente a un flujo incidente con velocidad $v_i = k_i/\mu_i$, la sección eficaz diferencial en el ángulo sólido subtendido por el proyectil dispersado resulta [1]

$$\begin{aligned} q(\Omega) &= \frac{dQ}{d\Omega} = \frac{\mu_i}{k_i} \frac{W_{if}}{d\Omega} \\ &= \frac{\mu_i \mu_f}{4\pi^2} \frac{k_f}{k_i} |T_{if}|^2. \end{aligned} \quad (1.41)$$

En el caso de ionización las secciones eficaces dependerán también del momento lineal del electrón ionizado, es decir de la energía y el ángulo sólido subtendido por el electrón emitido. De manera que debemos definir la sección eficaz doble diferencial en la energía y ángulo del electrón eyectado como:

$$\begin{aligned} \sigma(E_k, \theta_k) &= \frac{d\sigma}{dE_k d\theta_k} = k \int q(\Omega) d\Omega \\ &= k \frac{\mu_i \mu_f}{4\pi^2} \frac{k_i}{k_f} \int |T_{if}|^2 d\Omega. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Luego, las secciones eficaces simple diferenciales en función de la energía del electrón o el ángulo de inización resultan:

$$\sigma(E_k) = \frac{d\sigma}{dE_k} = \int \sigma(E_k, \theta_k) d\theta_k \quad (1.43)$$

$$\sigma(\theta_k) = \frac{d\sigma}{d\theta_k} = \int \sigma(E_k, \theta_k) dE_k, \quad (1.44)$$

respectivamente. Y finalmente la sección eficaz total:

$$\sigma = \int \sigma(E_k) dE_k = \int \sigma(\theta_k) d\theta_k. \quad (1.45)$$

1.2.4. La serie de Born

Volviendo a la definición (1.31) de los elementos de matriz T_{if} y utilizando la ecuación (1.29), podemos escribir

$$T_{if}^+ = \langle \psi_f | V_f | \Psi_i^+ \rangle = \langle \psi_f | V_f (1 + G^+ V_i) | \psi_i \rangle, \quad (1.46)$$

y, análogamente, usando (1.33) y (1.32) obtenemos

$$T_{if}^- = \langle \Psi_f^- | V_i | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | (1 + V_f G^+) V_i | \psi_i \rangle. \quad (1.47)$$

En (1.46) y (1.47) hacemos uso de los operadores de Green asociados al Hamiltoniano total H , definidos por

$$G^\pm(E) = [E - H \pm i\varepsilon]^{-1} \quad (1.48)$$

donde implícitamente se toma el límite $\varepsilon \rightarrow 0$.

Conocer $G^\pm(E)$ es equivalente a tener solucionado el problema de autovalores de H . Este es un problema generalmente muy difícil de resolver, por lo cual es usual recurrir a la búsqueda de soluciones aproximadas. La clave de estas técnicas de aproximación es la ecuación de Lippmann-Schwinger [4] que consiste en expandir los operadores de Green G^\pm en términos de operadores de Green más simples.

Puede demostrarse [1] que G^\pm satisface la ecuación integral

$$\begin{aligned} G^\pm &= G_a^\pm + G_a^\pm (H - H_a) G^\pm \\ &= G_a^\pm + G_a^\pm V_a G^\pm \end{aligned} \quad (1.49)$$

con $H = H_a + V_a$ para un canal arbitrario a , G_a^\pm es el operador de Green asociado al Hamiltoniano H_a . Dependiendo de la elección de H_a se obtienen diferentes maneras de representar a los operadores de Green G^\pm . Luego la expresión dada en (1.49) puede iterarse

obteniéndose un desarrollo en serie

$$\begin{aligned} G^\pm &= G_a^\pm \sum_{n=0}^{+\infty} [(H - H_a)G_a^\pm]^n \\ &= G_a^\pm \sum_{n=0}^{+\infty} [V_a G_a^\pm]^n. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Reemplazando (1.50) en (1.46) se obtienen las llamadas series de Born

$$T_{if}^+ = T_{if}^{B1+} + \langle \psi_f | V_f G_a^+ V_i | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_f G_a^+ V_a G_a^+ V_i | \psi_i \rangle + \dots \quad (1.51)$$

donde

$$T_{if}^{B1+} = \langle \psi_f | V_f | \psi_i \rangle \quad (1.52)$$

es la primera aproximación de Born al elemento de matriz T_{if}^+ y es el mismo cualquiera sea el desarrollo elegido para G^+ . El n -ésimo orden de la serie de Born se obtiene reteniendo hasta los primeros n términos de esta expansión. Como puede observarse los órdenes superiores al primero no están unívocamente determinados, sino que dependen de la expansión utilizada para G^+ .

Una ecuación análoga a (1.51) se obtiene para T_{if}^-

$$T_{if}^- = T_{if}^{B1-} + \langle \psi_f | V_f G_a^- V_i | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_f G_a^- V_a G_a^- V_i | \psi_i \rangle + \dots, \quad (1.53)$$

con

$$T_{if}^{B1-} = \langle \psi_f | V_i | \psi_i \rangle. \quad (1.54)$$

Un caso particular es la serie de Born de partícula libre que resulta tomando $G_a^+ = G_0^+$ y $V_a = V_0$ en (1.51)

$$T_{if}^+ = T_{if}^{B1} + \langle \psi_f | V_f G_0^+ V_0 | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_f G_0^+ V_0 G_0^+ V_0 | \psi_i \rangle + \dots, \quad (1.55)$$

aquí hemos edfinido el operador de Green de partícula libre dado por

$$G_0^\pm(E) = [E - H_0 \pm i\varepsilon]^{-1}, \quad (1.56)$$

donde H_0 es la suma de los operadores de energía cinética de todas las partículas y $V_0 = H - H_0$.

Además podemos reescribir (1.30) utilizando (1.29), con lo que resulta

$$T\psi_i = V_f\Psi_i^+ = V_f(1 + G^+V_i)\psi_i \quad (1.57)$$

y obtenemos que el operador T está también dado por

$$T = V_f + V_fG^+V_i. \quad (1.58)$$

Dado que G^\pm verifica [1]

$$G^\pm = G_a^\pm + G_a^\pm V_a G^\pm \quad (1.59)$$

$$G^\pm = G_a^\pm + G^\pm V_a G_a^\pm, \quad (1.60)$$

entonces T satisface las ecuaciones de Lippmann-Schwinger:

$$T = V_f + V_a G_a^+ T \quad (1.61)$$

$$T = V_f + T G_a^+ V_a. \quad (1.62)$$

Estas últimas expresiones para T pueden escribirse en función de un término inhomogéneo y un *kernel*. Por ejemplo la ecuación (1.61) resulta

$$T = In + KT, \quad (1.63)$$

donde el término inhomogéneo es $In = V_f$ y el kernel $K = V_a G_a^+$. Finalmente una forma de resolver la ecuación (1.63) es mediante un desarrollo en serie de Neumann por iteración

$$T = (1 + K + K^2 + K^3 + \dots)In. \quad (1.64)$$

1.2.5. Convergencia de la serie de Born

Mucha agua ha pasado debajo del puente en el estudio de la convergencia de las series de Born. Para el caso de dispersión de dos partículas con potenciales de corto rango no se ha demostrado formalmente la convergencia de la serie de Born, salvo para casos particu-

lares. Mientras que para el potencial coulombiano sabemos que existe una solución exacta a la ecuación de Schrödinger y que las secciones eficaces calculadas a partir de dicha solución coinciden (asombrosamente) con aquellas que se obtienen a partir del primer orden de la serie de Born [1].

Para el caso de dispersión de más de dos partículas las aguas han bajado turbias. Aaron *et al.* [6] han encontrado subseries divergentes de la serie de Born de partícula libre al estudiar colisiones con rearreglo y sugirieron que estas subseries divergentes pueden implicar la divergencia de la serie de Born completa. Esta suposición ha sido discutida con un contraejemplo por Dettmann y Leibfried [7] en un trabajo realizado con potenciales delformes unidimensionales. Si bien este análisis no establece un criterio para la convergencia de las series de Born T_{if} , pone en evidencia la existencia de un comportamiento indeseado en la aplicación del método de Lippmann-Schwinger al problema de la dispersión de tres partículas (o más). Como consecuencia de la posible divergencia de las subseries de la serie de Born surge la cuestión de si el primer término de la serie de Born para la dispersión de tres partículas (o más) tiene sentido físico y matemático; es decir, si puede ser interpretado como una primera aproximación a la amplitud de transición a través de un análisis perturbativo convergente, como lo es en el caso de dispersión de dos partículas.

El meollo de esta cuestión es si existen, dentro de los kernels definidos anteriormente, lo que se conocen como diagramas desconectados [8] los cuales corresponden al caso en que dos partículas interactúan a través de un potencial de dos cuerpos y la tercera se propaga libremente. La presencia de diagramas desconectados en el kernel pueden provocar la divergencia de su norma ³.

Una forma de obtener una solución convergente es aislar los términos problemáticos de la serie de manera de poder tratarlos exactamente, obteniendo así un kernel sin diagramas desconectados. Tal arreglo fue realizado por primera vez por Ludvig Faddeev en 1960 [9]. Este trabajo representa la primera formulación matemáticamente consistente del problema de dispersión de tres cuerpos (ver también [10, 11, 12, 13]).

Faddeev muestra que para obtener una solución no divergente para la amplitud de transición en el caso de tres cuerpos, se debe reemplazar las ecuaciones de Lippmann-Schwinger por un conjunto de tres ecuaciones integrales acopladas (ecuaciones de Faddeev).

Un ejemplo de aplicación del método de Faddeev es el que puede encontrarse en el trabajo

³Denotando $\|K\|$ a la norma de un operador K , de acuerdo a la definición $\|K\| = [Tr(KK^\dagger)]^{1/2}$, con $Tr(KK^\dagger) = \int d\alpha d\alpha' |\langle \alpha' | K | \alpha \rangle|$ donde α simboliza un conjunto completo de variables.

publicado por Macek en 1970 [14], en el que se estudia la ionización de H y H₂ por impacto de protones a una energía de colisión de 300 keV. En dicho trabajo la ionización se calcula usando el primer término en la expansión de Neumann de la ecuación de Faddeev para el estado final electrón-protón-ion residual.

En 1966, Dodd y Greider abordaron el problema de la convergencia pero trabajando en el marco de una representación de onda distorsionada. El método de onda distorsionada aplicado al cálculo de la serie de Born, así como el método seguido por Dodd y Greider se tratan en la siguiente sección.

1.2.6. Formalismo de onda distorsionada

Una forma de acelerar la convergencia de las series de Born es mediante el método de onda distorsionada [15]. La idea básica de este formalismo es la de sumar al Hamiltoniano H_i (H_f) no perturbado algunas partes de la interacción V_i (V_f) obteniendo así un nuevo Hamiltoniano distorsionado H_i^d (H_f^d) que se trata exactamente, y luego hacer un desarrollo perturbativo. De esta forma el nuevo Hamiltoniano posee más información que el no perturbado y es posible lograr que los términos del desarrollo perturbativo de la serie *distorsionada* sean más pequeños o bien de más fácil tratamiento que aquellos de la serie *no perturbada*.

En un caso general, podemos separar los potenciales perturbativos de los canales inicial y final $V_{i,f}$,

$$V_i = U_i + W_i \quad (1.65)$$

$$V_f = U_f + W_f \quad (1.66)$$

y escribir el Hamiltoniano total de la forma

$$H = H_i^d + W_i = H_f^d + W_f, \quad (1.67)$$

donde

$$H_i^d = H_i + U_i \quad (1.68)$$

$$H_f^d = H_f + U_f. \quad (1.69)$$

Ahora los potenciales $U_{i,f}$ son llamados potenciales de distorsión y $W_{i,f}$ potenciales perturbadores. Luego, notamos con χ_i^\pm a las autofunciones⁴ de H_i^d , y con ξ_f^\pm a las autofunciones⁵ de H_f^d , podemos definir los operadores de Green asociados a $H_{i,f}^d$:

$$g_i^+ = [E - H_i^d + i\varepsilon]^{-1} \quad (1.70)$$

$$g_f^- = [E - H_f^d - i\varepsilon]^{-1} \quad (1.71)$$

y escribir un ecuación análoga a (1.18) para χ_i^+ y ξ_f^- :

$$\chi_i^+ = (1 + g_i^+ U_i) \psi = w_i^+ \psi_i \quad (1.72)$$

$$\xi_f^- = (1 + g_f^- U_f) \psi = w_f^- \psi_f. \quad (1.73)$$

Luego, usando (1.18) podemos escribir

$$|\Psi_i^+\rangle = (1 + G^+ W_i) |\chi_i^+\rangle \quad (1.74)$$

y análogamente

$$|\Psi_f^-\rangle = (1 + G^- W_f) |\xi_f^-\rangle. \quad (1.75)$$

Podemos reescribir los elementos de matriz T_{if} (1.31) y (1.32)

$$T_{if} = \langle \psi_f | H - H_f | \Psi_i^+ \rangle = \langle \Psi_f^- | H - H_i | \psi_i \rangle \quad (1.76)$$

que ahora resultan:

$$T_{if} = \langle \psi_f | V_f - W_i | \chi_i^+ \rangle + \langle \Psi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle \quad (1.77)$$

y

$$T_{if} = \langle \xi_f^- | V_i - W_f^\dagger | \psi_i \rangle + \langle \xi_f^- | W_f^\dagger | \Psi_i^+ \rangle \quad (1.78)$$

donde (1.77) representa la forma *post* de T_{if} y es independiente de U_i , mientras que (1.78) representa la forma *prior* y resulta independiente de U_f .

La primera aproximación de Born a T_{if} dentro del formalismo de onda distorsionada (*Distorted Wave Born*, DWB) se obtiene reemplazando Ψ_f^- por ξ_f^- en (1.77) y Ψ_i^+ por χ_i^+

⁴Funciones de onda distorsionada correspondientes a H_i^d con condiciones de contorno saliente (+) o entrante (-).

⁵Funciones de onda distorsionada correspondientes a H_f^d con condiciones de contorno saliente (+) o entrante (-).

en (1.78); con esto resulta:

$$T_{if}^{DWB-} = \langle \psi_f | V_f - W_i | \chi_i^+ \rangle + \langle \xi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle \quad (1.79)$$

$$T_{if}^{DWB+} = \langle \xi_f^- | V_i - W_f^\dagger | \psi_i \rangle + \langle \xi_f^- | W_f^\dagger | \chi_i^+ \rangle. \quad (1.80)$$

La arbitrariedad en la elección de los potenciales U_i y U_f es un bien preciado ya que puede servir para simplificar el análisis o la precisión de la aproximación, estando usualmente atada a una relación de compromiso entre una correcta descripción del proceso físico y la dificultad del tratamiento matemático.

Una buena elección para U_i y U_f es aquella en la que se anulan los primeros términos de (1.77) y (1.78): $\langle \psi_f | V_f - W_i | \chi_i^+ \rangle$ y $\langle \xi_f^- | V_i - W_f^\dagger | \psi_i \rangle$, respectivamente. Esto se logra imponiendo las condiciones (ver página 289 de la referencia [1])

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} i\varepsilon \langle \psi_f | \chi_i^+ \rangle = 0 \quad (1.81)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} i\varepsilon \langle \xi_f^- | \psi_i \rangle = 0. \quad (1.82)$$

Se apela a estas condiciones sobre $\langle \psi_f | \chi_i^+ \rangle$ y $\langle \xi_f^- | \psi_i \rangle$ (llamados términos de superficie) con el argumento de que la distorsión no debe provocar por sí misma la transición de interés (ver Igarashi *et al.* [16]). Si se eligen U_i y U_f de manera que se verifiquen estas condiciones entonces resulta [1]:

$$T_{if}^{DW-} = \langle \Psi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle = \langle \Psi_f^- | (V_i - U_i) | \chi_i^+ \rangle \quad (1.83)$$

$$T_{if}^{DW+} = \langle \xi_f^- | W_f^\dagger | \Psi_i^+ \rangle = \langle \xi_f^- | (V_f - U_f)^\dagger | \Psi_i^+ \rangle \quad (1.84)$$

y, reemplazando Ψ_f^- por ξ_f^- y Ψ_i^+ por χ_i^+ en (1.83) y (1.84), respectivamente:

$$T_{if}^{DWB-} = \langle \xi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle = \langle \xi_f^- | (V_i - U_i) | \chi_i^+ \rangle \quad (1.85)$$

$$T_{if}^{DWB+} = \langle \xi_f^- | W_f^\dagger | \chi_i^+ \rangle = \langle \xi_f^- | (V_f - U_f)^\dagger | \chi_i^+ \rangle. \quad (1.86)$$

Ya hemos visto que T_{if} puede ser visto como el elemento de matriz del operador T definido como en (1.30). Allí las bases de funciones usadas fueron aquellas que describiesen los estados inicial y final no perturbados. De la misma forma cuando las funciones de la base

son ondas distorsionadas puede definirse un operador T^{DW} mediante la ecuación

$$T_{if}^{DW+} = \langle \xi_f^- | T^{DW+} | \chi_i^+ \rangle, \quad (1.87)$$

que también puede escribirse

$$T^{DW+} = W_f^\dagger [1 + G_i^+ W_i]. \quad (1.88)$$

Análogamente a lo visto para el caso no distorsionado, el operador T^{DW+} definido en (1.88) también verifica la ecuación integral [1]

$$T^{DW+} = W_f^\dagger + T^{DW+} G_i^+ W_i. \quad (1.89)$$

Luego, la serie de Born de onda distorsionada se obtiene iterando esta ecuación. Es fácil ver que el primer término de la serie de Born de onda distorsionada $T_{if}^{DW\pm}$ es el elemento $T_{if}^{DWB\pm}$ dados por (1.85) y (1.86). El primer término de la serie de Born de onda distorsionada contiene términos de orden superior de la serie de Born no distorsionada. Nuevamente, así como para el caso de la serie de Born no distorsionada, nos encontramos con el problema de la convergencia de la serie y de si el primer término dado por $T_{if}^{DWB\pm}$ tiene relevancia física y matemática.

En 1966 Greider y Dodd [17] mostraron que el kernel de la ecuación (1.89) contiene una parte desconectada que corresponde a la propagación libre de una de las partículas mientras las otras dos interactúan entre sí. Además mostraron que esta parte desconectada es la misma que aparece al tratar con la serie de Born no distorsionada. En una publicación siguiente [18] (literalmente es la publicación que sigue a [17] en el volumen **146** de la revista *Physical Review*) los mismos autores describen los medios para extraer la parte desconectada del kernel de manera de obtener una nueva ecuación integral para T^{DW} con un kernel de buen comportamiento. Ellos obtienen dos ecuaciones acopladas (en lugar de las tres obtenidas por Faddeev) que pueden ser resueltas como una sola utilizando la restricción de que la masa de una de las partículas sea mucho menor o mucho mayor que las masas de cada una de las otras dos y trabajando con operadores de Green que contienen dos potenciales de dos cuerpos en lugar de uno solo.

Esencialmente la característica de su método es la introducción de un potencial arbitrario

V_x y el operador de Green asociado

$$g_x^+ = [E - H + V_x + i\varepsilon]^{-1}. \quad (1.90)$$

Luego, puede escribirse [1]

$$G^+ = (1 + G^+V_x)g_x^+ \quad (1.91)$$

y su reemplazo en (1.88) conduce a

$$T^{DW+} = W_f^\dagger + W_f^\dagger g_x^+ W_i + W_f^\dagger G^+ V_x g_x^+ W_i \quad (1.92)$$

y finalmente esta última ecuación puede reescribirse de la forma

$$T^{DW+} = W_f^\dagger + W_f^\dagger g_x^+ W_i + T^{DW+} [E - H_i - U_i + i\varepsilon]^{-1} V_x g_x^+ W_i. \quad (1.93)$$

Dada la arbitrariedad de V_x siempre es posible elegir U_i y V_x de manera que el kernel de la ecuación (1.93) sea conectado. En particular, si V_x es una suma de dos potenciales de dos cuerpos, los diagramas desconectados en el kernel pueden ser evitados asegurando que cada potencial en V_x actúe sobre cualquier partícula no afectada por W_i . La ausencia de términos desconectados en el kernel de (1.93) sugiere que su iteración provee una secuencia significativa de aproximaciones a T_{if} .

La aplicación del método de Dodd y Greider al problema de ionización electrónica fue publicada por Belkić en 1978 [19].

La aproximación de Born de Campo Fuerte

La aproximación de Born de campo fuerte (Strong Potential Born, SPB) es un ejemplo interesante de mencionar. Fue elaborada por Macek y colaboradores en 1980 [20] (ver también Macek y Taulbjerg [21], Macek y Alston [22]). Esta aproximación ha sido desarrollada para el caso de captura electrónica en colisiones de alta energía de iones desnudos sobre blancos hidrogénicos y ha sido pensada para el caso asimétrico en el que la carga del proyectil sea mucho mayor que la carga del blanco, o viceversa. En estos casos puede hablarse de un potencial *fuerte* y un potencial *débil*. Podemos separar al Hamiltoniano total como sigue

$$H = H_i + V_i = H_f + V_f \quad (1.94)$$

con

$$H_i = H_0 + V_T \quad (1.95)$$

$$H_f = H_0 + V_P \quad (1.96)$$

y

$$V_i = V_P + V_{TP} \quad (1.97)$$

$$V_f = V_T + V_{TP} \quad (1.98)$$

donde V_T y V_P son los potenciales definidos para las interacciones electrón- blanco y electrón- proyectil, respectivamente, y V_{TP} denota la interacción entre el núcleo del blanco y el núcleo del proyectil.

De acuerdo con Macek y Alston [22], la amplitud de transición para este caso resulta

$$T_{if}^+ = \langle \psi_f | V_P + V_T G^+ V_P | \psi_i \rangle, \quad (1.99)$$

luego la amplitud SPB se obtiene aproximando G^+ a la función de Green G_T^+ del blanco

$$G^+ \simeq G_T^+ = [E - H_0 - V_T + i\varepsilon]^{-1} \quad (1.100)$$

con lo que se obtiene

$$T_{if}^{SPB+} = \langle \psi_f | V_P + V_T G_T^+ V_P | \psi_i \rangle. \quad (1.101)$$

Análogamente, aproximando G^- a la función de Green G_P^- del proyectil

$$G^- \simeq G_P^- = [E - H_0 - V_P - i\varepsilon]^{-1}, \quad (1.102)$$

resulta

$$T_{if}^{SPB-} = \langle \psi_f | V_T + V_T G_P^- V_P | \psi_i \rangle. \quad (1.103)$$

Vemos que los primeros órdenes de (1.101) y (1.103) son

$$T_{if}^{SPB0+} = \langle \psi_f | V_P | \psi_i \rangle \quad (1.104)$$

$$T_{if}^{SPB0-} = \langle \psi_f | V_T | \psi_i \rangle, \quad (1.105)$$

De esta forma (1.101) resultaría más apropiada para aquellos casos en que sea $V_T \gg V_P$ y (1.103) para aquellos en que $V_P \gg V_T$, ya que así la perturbación del potencial fuerte aparece en todos los órdenes mientras que el potencial débil aparece en primer orden.

Sin embargo la serie SPB presenta inconvenientes en su formulación. En particular ha sido demostrado por Dewangan y Eicler en 1985 para el caso de captura [23] y luego en 1986 para el caso de excitación [24], que la amplitud T_{if}^{SPB} tal como fuera presentada por Macek *et al.* es divergente. El origen de tal divergencia yace en la presencia del canal intermedio elástico $\langle \psi_i | V_P | \psi_i \rangle$ (ó $\langle \psi_f | V_T | \psi_f \rangle$) el cual sólo es válido para interacciones de corto rango, mientras que las interacciones V_P y V_T son potenciales Coulombianos puros.

Luego, en 1987 Rivarola *et al.* [25] proponen un método mediante el cual es posible remover completamente el canal elástico en SPB para evitar estas divergencias.

Siguiendo este lineamiento, en 1990 Taulbjerg *et al.* [26] obtienen, para el caso de captura electrónica, una expresión para la amplitud de transición SPB dentro del formalismo de onda distorsionada (Distorted Strong Potential Born, DSPB):

$$T_{if}^{DSPB-} = \langle \chi_f^- | (V_T - U_f^\dagger) [1 + G_P^+(V_P - U_i)] | \chi_i^+ \rangle. \quad (1.106)$$

Tomando el potencial auxiliar U_i como

$$U_i = \int d\vec{x} |\varphi(\vec{x})|^2 V_P(\vec{s}), \quad (1.107)$$

siendo \vec{x} (\vec{s}) las coordenadas electrónicas respecto del núcleo del blanco (proyectil). Este potencial promedia el potencial V_P sobre la distribución electrónica $\varphi(\vec{x})$ alrededor del proyectil. Este artificio logra remover completamente el canal elástico y así genera una amplitud de transición no divergente. Una extensión de este modelo para el caso de ionización fue desarrollada por Brauner y Maceck en 1992 [27] (ver también Madsen y Taulbjerg [28]).

1.2.7. Potenciales de largo rango

Todo hasta aquí fue presentado asumiendo que los potenciales entre partículas eran de corto alcance. Obviamente la interacción Coulombiana entre partículas cargadas no está contemplada ya que los potenciales Coulombianos son de largo alcance. Sin embargo existe la posibilidad de generalizar todas las expresiones obtenidas para el caso en que aparezcan interacciones Coulombianas. Tal generalización puede encontrarse detallada en un trabajo publicado por Belkić *et al.* [5] para captura electrónica. Dicha extensión al caso de potenciales de largo rango se realiza teniendo en cuenta las correctas condiciones asintóticas [5, 29], evitándose lo discutido sobre la convergencia de las series con incorrectas condiciones asintóticas.

1.3. El método de parámetro de impacto

La característica básica a la hora de simplificar el problema de colisión entre partículas pesadas es que la masa de los núcleos es mucho mayor que la masa de los electrones. Particularmente esta relación entre la masa de los electrones y la masa de los núcleos permite realizar lo que conocemos por *aproximación de parámetro de impacto*. En esta aproximación (ver cap. 4 de [1]) se suponen trayectorias clásicas para las partículas pesadas. La evolución clásica de las partículas pesadas genera un potencial dependiente del tiempo en el cual se mueven los electrones, los cuales son tratados cuánticamente.

Existe un desarrollo publicado por McCarroll y Salin en 1968 del método de parámetro de impacto que hace uso de la relación entre la masa del electrón y la de los núcleos dentro de un formalismo puramente cuántico [30]; tal desarrollo es el análogo cuántico a aquel semiclásico realizado por Bates y Holt en 1966 [31].

La validez de la aproximación de parámetro de impacto puede asegurarse en el rango de energías intermedias y altas (ver [30] y referencias allí citadas).

En los trabajos que componen esta tesis hacemos particular uso de la versión de *línea recta* de la aproximación de parámetro de impacto; la cual consiste en asumir que a energía suficientemente alta el proyectil describe una trayectoria rectilínea definida por

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t \tag{1.108}$$

donde \vec{R} es el vector internuclear, $\vec{\rho}$ es el parámetro de impacto, \vec{v} la velocidad relativa entre el núcleo del proyectil y el núcleo del blanco ($\vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0$), y t el tiempo de la colisión, tomando $t = 0$ en el instante de máxima aproximación entre los núcleos.

Existen además otras versiones de la aproximación de parámetro de impacto que se obtienen utilizando las ecuaciones de movimiento clásicas de Newton donde se describe al proyectil como moviéndose en un potencial efectivo $W(\vec{R})$. Si se considera $W(\vec{R}) = Z_P Z_T / R$, con Z_T (Z_P) la carga nuclear del blanco (proyectil) la dispersión del proyectil es de forma hiperbólica [32]. También ha sido estudiado [33] el caso de considerar que el movimiento electrónico y del proyectil se encuentran acoplados tomando $W(\vec{R}) = Z_P Z_T / R + \langle \Psi | V_P(\vec{s}) | \Psi \rangle$ donde el potencial $V_P(\vec{s}) = -Z_P / s$, siendo \vec{s} el vector electrón-proyectil, es promediado en la distribución electrónica Ψ del blanco. Ha sido demostrado [32, 33] que los efectos producidos por la deflexión del proyectil sobre las secciones eficaces resultan importantes a velocidades de colisión lo suficientemente bajas. A continuación se muestra brevemente el cálculo de las secciones eficaces y el tratamiento del potencial internuclear dentro de la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto.

1.3.1. Cálculo de la amplitud de transición

Consideremos un sistema de tres partículas: un proyectil P de masa M_P y carga Z_P que incide con velocidad \vec{v} sobre un blanco T de masa M_T y carga nuclear Z_T que tiene un electrón activo e. Haremos alusión los casos de captura electrónica e ionización, pudiendo el último puede obtenerse a partir de lo desarrollado para el caso de captura.

Como se mencionó anteriormente, la evolución del electrón activo en el potencial dependiente del tiempo generado por el movimiento de los núcleos se describe cuánticamente mediante la ecuación de Schrödinger

$$\left[H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.109)$$

donde

$$H_{el} = -\frac{1}{2} \nabla_r^2 - \frac{Z_T}{x} - \frac{Z_P}{s} + \frac{Z_P Z_T}{R}. \quad (1.110)$$

Las coordenadas utilizadas se muestran en la Fig. 1.1.

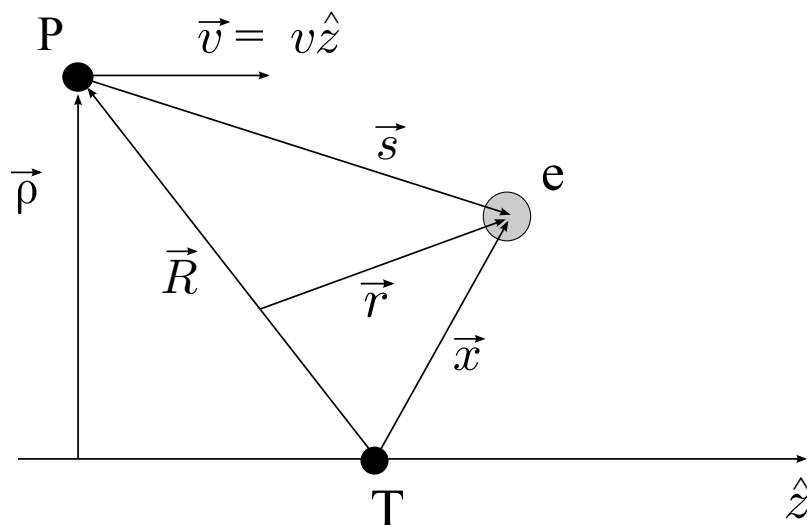


Figura 1.1: Sistema de coordenadas.

Los vectores \vec{x} , \vec{s} y \vec{r} representan la posición del electrón activo respecto del núcleo blanco, del proyectil y de un sistema de referencia fijo a algún punto del eje internuclear, respectivamente. Como en esta versión de la aproximación de parámetro de impacto la velocidad entre los núcleos es constante entonces cualquier sistema fijo a un punto del eje internuclear representa un sistema inercial. En particular, consideraremos un sistema fijo al centro de masa del sistema proyectil-núcleo blanco; en el que resulta:

$$\vec{x} = \vec{r} + q\vec{R} \quad (1.111)$$

$$\vec{s} = \vec{r} + (q - 1)\vec{R} \quad (1.112)$$

con

$$q = \frac{M_P}{M_T + M_P}. \quad (1.113)$$

Definimos ahora los Hamiltonianos no perturbados

$$H_i = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 - \frac{Z_T}{x} \quad (1.114)$$

$$H_f = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 - \frac{Z_P}{s} \quad (1.115)$$

que corresponden al electrón activo ligado al blanco en el canal inicial y al proyectil en el

canal final, respectivamente. Las autofunciones de H_i y H_f resultan

$$\Phi_i(\vec{r}, t) = \phi_i(\vec{x}) \exp \left[-i\varepsilon_i t - iq \vec{v} \cdot \vec{r} - i\frac{1}{2}q^2 v^2 t \right] \quad (1.116)$$

$$\Phi_f(\vec{r}, t) = \phi_f(\vec{s}) \exp \left[-i\varepsilon_f t - i(q-1) \vec{v} \cdot \vec{r} - i\frac{1}{2}(q-1)^2 v^2 t \right], \quad (1.117)$$

respectivamente. En (1.116) y (1.117) ϕ_i y ϕ_f son autofunciones estacionarias del electrón activo ligado al blanco y al proyectil, respectivamente.

Las fases en (1.116) y (1.117) son factores de traslación con forma de ondas planas que provienen del movimiento de los orbitales en el sistema de referencia ligado el eje internuclear. Tal movimiento produce un flujo neto de carga que es descrito por los factores de traslación en forma de ondas planas [34].

Los potenciales perturbadores en los canales inicial y final son:

$$V_i = -\frac{Z_P}{s} + \frac{Z_P Z_T}{R} \quad (1.118)$$

$$V_f = -\frac{Z_T}{x} + \frac{Z_P Z_T}{R}, \quad (1.119)$$

respectivamente. Los potenciales V_i y V_f no son potenciales de corto rango ya que en los límites $t \rightarrow \pm\infty$ resulta⁶

$$V_i \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} \quad (1.120)$$

$$V_f \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \frac{Z_T(Z_P - 1)}{R}. \quad (1.121)$$

Debido a esto Φ_i y Φ_f no pueden considerarse como las evoluciones asintóticas de Ψ ya que estos orbitales son distorsionados por los potenciales perturbadores aún cuando los núcleos estén infinitamente separados.

Para determinar las evoluciones asintóticas de Ψ es necesario considerar, como se ha mencionado anteriormente, las correctas condiciones de contorno de (1.109). Las correctas condiciones asintóticas para el problema de captura fueron determinadas por Cheshire en 1963 [29] y Belkić *et al.* en 1979 [5]. También han sido estudiadas por Corchs *et al.* quienes muestran (ver Corchs *et al.* [35]) que las condiciones asintóticas para el caso de interacciones Coulombianas están unívocamente determinadas en la aproximación de parámetro de

⁶Salvo en el caso particular que $Z_T = 1$ y $Z_P = 1$.

impacto; éstas pueden obtenerse sin ambigüedad aplicando el límite eikonal ($M_{P,T} \rightarrow \infty$) a las ecuaciones cuánticas y resultan ser mínimas. Las correctas condiciones asintóticas resultan:

$$\Phi_i^c(\vec{r}, t) = \Phi_i(\vec{r}, t) \exp \left[i \frac{Z_P(Z_T - 1)}{v} \ln(vR - v^2t) \right] \quad (1.122)$$

$$\Phi_f^c(\vec{r}, t) = \Phi_f(\vec{r}, t) \exp \left[-i \frac{Z_T(Z_P - 1)}{v} \ln(vR + v^2t) \right]. \quad (1.123)$$

Las fases logarítmicas en (1.122) y (1.123) representan el efecto de los potenciales Coulombianos cuando $R \rightarrow +\infty$. Ahora resulta conveniente definir las funciones [35, 36]

$$\Phi_i^{c,dist}(\vec{r}, t) = \Phi_i(\vec{r}, t) \exp \left[i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln(vR - v^2t) - i \frac{Z_P}{v} \ln(v s + \vec{v} \cdot \vec{s}) \right] \quad (1.124)$$

y

$$\Phi_f^{c,dist}(\vec{r}, t) = \Phi_f(\vec{r}, t) \exp \left[-i \frac{Z_T Z_P}{v} \ln(vR + v^2t) + i \frac{Z_T}{v} \ln(v x + \vec{v} \cdot \vec{x}) \right]. \quad (1.125)$$

Las funciones $\Phi_i^{c,dist}$ y $\Phi_f^{c,dist}$ poseen más información que las Φ_i^c y Φ_f^c , ya que en (1.124) aparecen explícitamente las fases logarítmicas correspondientes a las interacciones Coulombianas núcleo-núcleo y proyectil-electrón, y en (1.125) las fases logarítmicas correspondientes a las interacciones Coulombianas núcleo-núcleo y blanco-electrón. Es sencillo ver que las funciones definidas en (1.124) y (1.125) tienen como límite las correspondientes a (1.122) y (1.123), respectivamente, ya que

$$t \rightarrow -\infty \Rightarrow \vec{s} \simeq -\vec{R} \quad (1.126)$$

$$t \rightarrow +\infty \Rightarrow \vec{x} \simeq \vec{R}. \quad (1.127)$$

De esta manera, en el caso de captura electrónica, las soluciones de la ecuación de Schrödinger electrónica (1.109) deben satisfacer las condiciones de contorno:

$$\Psi_i^+(\vec{r}, t) \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} \Phi_i^c(\vec{r}, t) \quad (1.128)$$

$$\Psi_f^-(\vec{r}, t) \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} \Phi_f^c(\vec{r}, t). \quad (1.129)$$

Para el caso de ionización las correctas condiciones de contorno para el canal inicial también está dada por (1.128); mientras que para el canal final se considera (ver Belkić [19],

Salin [37])

$$\Psi_f^-(\vec{r}, t) \xrightarrow[\substack{t \rightarrow +\infty \\ x \rightarrow +\infty \\ s \rightarrow +\infty}]{\phantom{\Psi_f^-(\vec{r}, t)}} \Phi_f^{c,dist}(\vec{r}, t) = \exp \left[-i \frac{Z_T Z_P}{v} \ln(v R + v^2 t) + \right. \\ \left. + i \frac{Z_T}{k} \ln(k x + \vec{k} \cdot \vec{x}) + i \frac{Z_P}{p} \ln(p s + \vec{p} \cdot \vec{s}) \right], \quad (1.130)$$

donde \vec{k} ($\vec{p} = \vec{k} - \vec{v}$) es el momento lineal del electrón ionizado respecto del núcleo del blanco (proyectil). En (1.130) la condición asintótica está dada por $\Phi_f^{c,dist}$ en lugar de Φ_f^c , ya que para satisfacerla debemos incluir la dependencia de la función con las coordenadas electrónicas \vec{x} y \vec{s} .

Luego, la amplitud de transición en el método de parámetro de impacto se define como [1]:

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \Phi_f^c | \Psi_i^+ \rangle \quad (1.131)$$

$$\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \Psi_f^- | \Phi_i^c \rangle. \quad (1.132)$$

Las expresiones (1.131) y (1.132) pueden reescribirse como sigue:

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^t dt' \frac{d}{dt'} \langle \Phi_f^c | \Psi_i^+ \rangle \quad (1.133)$$

$$\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \int_t^{+\infty} dt' \frac{d}{dt'} \langle \Psi_f^- | \Phi_i^c \rangle, \quad (1.134)$$

con la condición

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \langle \Phi_f^c | \Phi_i^c \rangle = 0. \quad (1.135)$$

Finalmente resulta:

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f^c \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \Psi_i^+ \right\rangle \quad (1.136)$$

$$\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Psi_f^- \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \Phi_i^c \right\rangle. \quad (1.137)$$

Las expresiones (1.136) y (1.137) representan las formas post y prior de la amplitud de transición, respectivamente. Debemos observar que para el caso de ionización en las ecuaciones (1.131) a (1.136) en lugar de la función Φ_f^c debe tomarse $\Phi_f^{c,dist}$, dada en (1.130).

1.3.2. Tratamiento del potencial internuclear

En la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto, el potencial internuclear no depende de la coordenada electrónica y por lo tanto es incapaz de producir transiciones entre estados electrónicos. Así, el efecto del potencial internuclear debe traducirse a la amplitud de transición sólo en una fase [5]. El hecho de considerar una trayectoria rectilínea para el proyectil y $M_P \gg 1$ y $M_T \gg 1$ da lugar a la posibilidad de tratar en todos los órdenes el potencial internuclear [5] y es posible escribir:

$$\Psi_i^+(\vec{r}, t) = \Psi_i^{+el}(\vec{r}, t) \exp \left[i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln(vR - v^2 t) \right] \quad (1.138)$$

$$\Psi_f^-(\vec{r}, t) = \Psi_f^{-el}(\vec{r}, t) \exp \left[-i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln(vR + v^2 t) \right], \quad (1.139)$$

es decir separar de $\Psi_{i,f}^{+,-}$ explícitamente la parte que contiene la evolución internuclear, de manera que $\Psi_{i,f}^{+el,-el}$ contengan solamente información correspondiente a la evolución electrónica.

Reemplazando (1.138) en (1.136) y (1.139) en (1.137) y utilizando (1.128) y (1.129) se obtiene, para el caso de captura electrónica:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{if}^{+,capt}(\vec{\rho}) &= -i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \times \\ &\times \left\langle \Phi_f \exp \left[i \frac{Z_T}{v} \ln(vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \Psi_i^{+el} \right\rangle \end{aligned} \quad (1.140)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{if}^{-,capt}(\vec{\rho}) &= -i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \times \\ &\times \left\langle \Psi_f^{-el} \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \right\rangle; \end{aligned} \quad (1.141)$$

mientras que utilizando (1.128) y la expresión para $\Phi_f^{c,dist}$ dada en (1.130) obtenemos lo propio para el caso de ionización:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{if}^{+,ion}(\vec{\rho}) &= -i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \times \\ &\times \left\langle \exp \left[i \frac{Z_T}{k} \ln(kx + \vec{k} \cdot \vec{x}) + i \frac{Z_P}{p} \ln(ps + \vec{p} \cdot \vec{s}) \right] \middle| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \middle| \Psi_i^{+el} \right\rangle \end{aligned} \quad (1.142)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{if}^{-,ion}(\vec{\rho}) &= -i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \times \\ &\times \left\langle \Psi_f^{-el} \middle| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \middle| \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \right\rangle; \end{aligned} \quad (1.143)$$

en este caso Ψ_f^{-el} representa una solución exacta de (1.109) correspondiente a tres partículas en el continuo con correctas condiciones entrantes.

Luego, las secciones eficaces doble diferenciales para ionización en función de la energía E_k y ángulo θ_k del electrón emitido resultan:

$$\sigma(E_k, \theta_k) = \frac{d\sigma}{dE_k d\theta_k} = k \int d\vec{\rho} |\mathcal{A}_{if}^\pm(\vec{\rho})|^2, \quad (1.144)$$

las secciones eficaces simple diferenciales en función de la energía del electrón o el ángulo de emisión:

$$\sigma(E_k) = \frac{d\sigma}{dE_k} = \int d\theta_k \sigma(E_k, \theta_k) \quad (1.145)$$

$$\sigma(\theta_k) = \frac{d\sigma}{d\theta_k} = \int dE_k \sigma(E_k, \theta_k), \quad (1.146)$$

respectivamente. Y por último la sección eficaz total

$$\sigma = \int dE_k \sigma(E_k) = \int d\theta_k \sigma(\theta_k). \quad (1.147)$$

A partir de (1.144) podemos observar que las secciones eficaces doble y simple diferenciales y totales dependen del módulo de la amplitud de transición, por lo tanto es claro que éstas no serán afectadas por la fase introducida por el potencial internuclear. No es así para el caso de secciones eficaces múltiple diferenciales que dependan del ángulo de dispersión del proyectil.

Resulta práctico escribir, para el cálculo de secciones eficaces doble diferenciales:

$$\mathcal{A}_{if}^{\pm}(\vec{\rho}) = -i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} a_{if}^{\pm}(\vec{\rho}), \quad (1.148)$$

con

$$a_{if}^{+,capt}(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f \exp \left[-i \frac{Z_T}{v} \ln(v R + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \Psi_i^{+el} \right\rangle \quad (1.149)$$

$$a_{if}^{-,capt}(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Psi_f^{-el} \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(v R - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \right\rangle, \quad (1.150)$$

para el caso de captura; y para el caso de ionización:

$$\begin{aligned} a_{if}^{+,ion}(\vec{\rho}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \times \\ &\times \left\langle \exp \left[i \frac{Z_T}{k} \ln(k x + \vec{k} \cdot \vec{x}) + i \frac{Z_P}{p} \ln(p s + \vec{p} \cdot \vec{s}) \right] \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \Psi_i^{+el} \right\rangle \end{aligned} \quad (1.151)$$

$$a_{if}^{-,ion}(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Psi_f^{-el} \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(v R - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \right\rangle. \quad (1.152)$$

Luego, el primer orden de las amplitudes de transición a_{if}^{\pm} resulta haciendo las siguientes aproximaciones:

$$\Psi_i^{+el} \simeq \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(v R - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \quad (1.153)$$

en (1.149) y (1.151),

$$\Psi_f^{-el} \simeq \Phi_f \exp \left[-i \frac{Z_T}{v} \ln(v R + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \quad (1.154)$$

en (1.150), y

$$\Psi_f^{-el} \simeq \exp \left[i \frac{Z_T}{k} \ln(k x + \vec{k} \cdot \vec{x}) + i \frac{Z_P}{p} \ln(p s + \vec{p} \cdot \vec{s}) \right] \quad (1.155)$$

en (1.152).

De esta manera resulta:

$$a_{if}^{+,capt}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f \exp \left[-i \frac{Z_T}{v} \ln(vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \middle| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \times \right. \\ \left. \times \left| \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \right\rangle \quad (1.156)$$

$$a_{if}^{-,capt}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f \exp \left[-i \frac{Z_T}{v} \ln(vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \middle| \times \right. \\ \left. \times \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \left| \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \right\rangle, \quad (1.157)$$

y

$$a_{if}^{+,ion}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \times \\ \times \left\langle \exp \left[i \frac{Z_T}{k} \ln(kx + \vec{k} \cdot \vec{x}) + i \frac{Z_P}{p} \ln(ps + \vec{p} \cdot \vec{s}) \right] \middle| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \times \right. \\ \left. \times \left| \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \right\rangle \quad (1.158)$$

$$a_{if}^{-,ion}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \exp \left[i \frac{Z_T}{k} \ln(kx + \vec{k} \cdot \vec{x}) + i \frac{Z_P}{p} \ln(ps + \vec{p} \cdot \vec{s}) \right] \middle| \times \right. \\ \left. \times \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \left| \Phi_i \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \right\rangle. \quad (1.159)$$

Expresiones similares para las amplitudes de transición pueden ser obtenidas dentro del formalismo de onda distorsionada, considerando las versiones dentro de la aproximación de parámetro de impacto de las funciones de onda distorsionada χ_i^{+el} y ξ_f^{-el} . Eligiendo éstas funciones de manera que verifiquen las correctas condiciones de contorno dadas por las expresiones (1.128) y (1.129) para captura electrónica, y (1.128) y (1.130) para ionización, resulta

$$a_{if}^+(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \xi_f^{-el} \middle| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \left| \Psi_i^{+el} \right\rangle \quad (1.160)$$

$$a_{if}^-(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Psi_f^{-el} \middle| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \left| \chi_i^{+el} \right\rangle, \quad (1.161)$$

para ambas reacciones. Luego, se obtiene el primer orden dentro del formalismo de onda distorsionada reemplazando en (1.160) y (1.161) la función de onda exacta Ψ_i^{+el} y Ψ_f^{-el}

por la función de onda distorsionada inicial χ_i^{+el} y final ξ_f^{-el} , respectivamente, con lo cual

$$a_{if}^+(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \xi_f^{-el} \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \chi_i^{+el} \right\rangle \quad (1.162)$$

$$a_{if}^-(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \xi_f^{-el} \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \chi_i^{+el} \right\rangle. \quad (1.163)$$

Ahora podemos introducir la transformada de Fourier bidimensional

$$a_{if}^\pm(\vec{\rho}) = \frac{1}{2\pi} \int d\vec{\eta} e^{-i\vec{\rho}\cdot\vec{\eta}} R_{if}^\pm(\vec{\eta}). \quad (1.164)$$

A partir de aquí las secciones eficaces doble diferenciales pueden calcularse utilizando la identidad de Parseval:

$$\sigma(E_k, \theta_k) = k \int d\vec{\rho} |a_{if}^\pm(\vec{\rho})|^2 = k \int d\vec{\eta} |R_{if}^\pm(\vec{\eta})|^2, \quad (1.165)$$

y como antes, las secciones eficaces simple diferenciales y totales se obtienen por integra-
ciones sucesivas de $\sigma(E_k, \theta_k)$.

La función $R_{if}(\vec{\eta})$ representa la amplitud de transición en función del momento transferido transversal $\vec{\eta}$.

Lo realizado en (1.164) y (1.165) se conoce como el método de transformada de Fourier [1] y es muy frecuentemente utilizado ya que usualmente no es posible calcular $a_{if}(\vec{\rho})$ analíticamente pero sí puede ser posible obtener expresiones analíticas para $R_{if}(\vec{\eta})$.

1.3.3. Relación entre T_{if}^\pm y a_{if}^\pm

Con el fin de relacionar todo lo analizado en esta sección con lo visto en la sección 1.2, resulta útil y de interés relacionar el elemento de matriz de transición T_{if}^\pm con la amplitud de transición definida en la aproximación de parámetro de impacto a_{if}^\pm .

Dentro de la aproximación de parámetro de impacto, las versiones post y prior de los elementos de la matriz T están dados por (ver Busnengo *et al.* [38])

$$T_{if}^+ = v \int d\vec{\rho} \exp(i\vec{\rho}\cdot\vec{\eta}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \xi_f^- \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \Psi_i^+ \right\rangle \quad (1.166)$$

$$T_{if}^- = v \int d\vec{\rho} \exp(i\vec{\rho}\cdot\vec{\eta}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Psi_f^- \left| \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \chi_i^+ \right\rangle. \quad (1.167)$$

La integral temporal en (1.166) y (1.167) puede relacionarse directamente con las amplitudes a_{if}^{\pm} definidas en (1.149) y (1.150), respectivamente.

Precisamente tal relación está dada por la transformada de Fourier bidimensional

$$T_{if}^{\pm} = v \int d\vec{\rho} \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}) a_{if}^{\pm}(\vec{\rho}). \quad (1.168)$$

Luego, podemos escribir a a_{if}^{\pm} en función de T_{if}^{\pm} , con lo que resulta (ver Deco y Rivarola [39])

$$a_{if}^{\pm}(\vec{\rho}) = \frac{1}{v(2\pi)^2} \int d\vec{\eta} e^{-i\vec{\rho} \cdot \vec{\eta}} T_{if}^{\pm}. \quad (1.169)$$

De manera que si tenemos un desarrollo en serie para T_{if}^{\pm}

$$T_{if}^{\pm} = \sum_{n=0}^{\infty} T_{if}^{\pm(n)} \quad (1.170)$$

también tendremos un desarrollo en serie para la amplitud de transición a_{if}^{\pm} :

$$a_{if}^{\pm}(\vec{\rho}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{if}^{\pm(n)}(\vec{\rho}) \quad (1.171)$$

donde el término de orden n de la serie para la amplitud de transición a_{if}^{\pm} se relaciona con el término de orden n de la serie para T_{if}^{\pm} mediante una ecuación análoga a (1.169)

$$a_{if}^{\pm(n)}(\vec{\rho}) = \frac{1}{v(2\pi)^2} \int d\vec{\eta} e^{-i\vec{\rho} \cdot \vec{\eta}} T_{if}^{\pm(n)}. \quad (1.172)$$

De esta forma las conclusiones obtenidas en la sección 1.2.5 sobre la relevancia físico-matemática de los órdenes del desarrollo en serie de T_{if}^{\pm} pueden trasladarse ahora a la serie de a_{if}^{\pm} .

1.4. Modelos de onda distorsionada

A continuación se mencionan los modelos de onda distorsionada que, en mayor o menor medida, se utilizan en el trabajo de tesis. Todos estos modelos fueron desarrollados dentro de la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto. Además son modelos a dos centros; lo que significa que en las funciones de onda distorsionada inicial

y final, la evolución del electrón se describe en la presencia simultánea de los campos del núcleo del blanco y del proyectil.

1.4.1. Aproximación CDW

La aproximación de onda distorsionada del continuo (Continuum Distorted Wave, CDW), que fuera propuesta por Cheshire en el año 1964 [29] dentro de la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto, ha sido el primer tratamiento al problema de captura electrónica en considerar explícitamente las correctas condiciones de contorno para la interacción Coulombiana. Más tarde, en 1972, Gayet [40] desarrolla esta aproximación dentro del formalismo cuántico de tres cuerpos, demostrando que la ecuación de Lippmann-Schwinger asociada posee un kernel compacto, representando un primer orden del desarrollo perturbativo de Dodd y Greider [18], el cual fue específicamente diseñado para evitar diagramas desconectados.

Este modelo posee problemas con el cálculo de secciones eficaces totales para la doble dispersión de Thomas (ver Belkić *et al.* [5], Briggs *et al.* [41], Dubé [42], Dewangan y Eichler [43], Janev y Winter [44], McGuire *et al.* [45]). Por otro lado, pero también para el caso de secciones eficaces totales, la aproximación CDW tiene tendencia a sobreestimar los datos experimentales correspondientes energías intermedias, debido a que las funciones de distorsión elegidas pierden la normalización en el rango de energías intermedias (ver Crothers [46]). Además presenta una estructura espúrea en forma de valle muy pronunciado superpuesto al pico de Thomas (ver McGuire *et al.* [45], Rivarola y Miraglia [47], Rivarola y Salin [48]).

El modelo CDW es una aproximación simétrica en la que, tanto en el canal inicial como en el final, se introducen funciones del continuo del centro perturbador.

En el caso de ionización, en los canales inicial y final el centro perturbador resulta ser el proyectil. Por lo tanto las funciones de onda distorsionada de los canales inicial y final se escriben

$$\chi_{i,f}^{CDW+,-} = \psi_{i,f}(\vec{x}, t) \mathcal{L}_{i,f}^{CDW+,-}(\vec{s}), \quad (1.173)$$

con

$$\psi_{i,f}(\vec{x}, t) = \phi_{i,f}(\vec{x}) \exp(-i\varepsilon_{i,f}t) \quad (1.174)$$

donde $\phi_i(\vec{x})$ representa el estado ligado inicial del blanco con energía ε_i , y $\phi_f(\vec{x})$ un estado del continuo del blanco con energía $\varepsilon_f = k^2/2$, siendo \vec{k} el momento lineal del electrón

emitido respecto del núcleo del blanco.

Las distorsiones $\mathcal{L}_{i,f}^{CDW+,-}$ son

$$\mathcal{L}_i^{CDW+}(\vec{s}) = N(\nu) {}_1F_1[i\nu; 1; i(v s + \vec{v} \cdot \vec{s})] \quad (1.175)$$

$$\mathcal{L}_f^{CDW-}(\vec{s}) = N(\zeta)^* {}_1F_1[-i\zeta; 1; -i(p s + \vec{p} \cdot \vec{s})], \quad (1.176)$$

donde ${}_1F_1$ es la función hipergeométrica confluyente de Kummer, $N(a) = \exp(\pi a/2)\Gamma(1 + ia)$ con Γ la función Gamma, y $\nu = Z_P/v$, $\zeta = Z_P/p$ con $\vec{p} = \vec{k} - \vec{v}$ el momento lineal del electrón ionizado respecto del núcleo del proyectil.

Con esta elección para las distorsiones, los perturbadores de los canales inicial y final resultan

$$W_i^{CDW+} \chi_i^{CDW+} = -\psi_i(\vec{x}, t) \left[\vec{\nabla}_x \ln \phi_i(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_s \mathcal{L}_i^{CDW+}(\vec{s}) \right] \quad (1.177)$$

$$W_f^{CDW-} \chi_f^{CDW-} = -\psi_f(\vec{x}, t) \left[\vec{\nabla}_x \ln \phi_f(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_s \mathcal{L}_f^{CDW-}(\vec{s}) \right]. \quad (1.178)$$

A pesar de los defectos antes mencionados la aproximación CDW ha sido usada ampliamente para la descripción de diversas reacciones.

En el caso de captura electrónica se pueden mencionar como ejemplo trabajos como el de Salin en el año 1970 [49], quien aplica la aproximación CDW para el estudio de captura electrónica desde H(1s) por impacto de protones a alta energía; y luego Belkić y Janev [50] realizan lo propio para el caso de captura electrónica a estados excitados del proyectil en la colisión de partículas alfa sobre átomos H(1s) y He(1s²). Un trabajo de revisión imprescindible para captura electrónica es el de Belkić *et al.* de 1979 [5]. De tiempos más recientes podemos hacer referencia a Abufager *et al.* [51] quienes estudian la captura electrónica al estado fundamental y a estados excitados del proyectil desde estados excitados del blanco en colisiones entre iones desnudos y átomos de hidrógeno.

De mayor interés, en lo que respecta a esta tesis, resultan los trabajos realizados para ionización simple de átomos multielectrónicos por impacto de proyectiles desnudos múltiplemente cargados. Entre los que podemos mencionar se encuentran el de Gulyàs y Fainshtein [52] que utilizan la aproximación CDW para el cálculo de secciones eficaces doble diferenciales, y el de Ciappina y Cravero [53] quienes se centran en el cálculo de secciones eficaces totales.

1.4.2. Aproximación SE

Con el fin de evitar la sobreestimación de las secciones eficaces a energías intermedias producto de la pérdida de normalización de las funciones de distorsión en la aproximación CDW, Maidagan y Rivarola introducen en 1984 la llamada aproximación SE (Symmetric Eikonal, SE) [54] para estudiar el caso de captura electrónica en colisiones entre protones y blancos H y He. Tal aproximación consiste en reemplazar las funciones de onda del continuo de la aproximación CDW por fases eikoniales. Para el caso de captura electrónica se tiene

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i^{SE+}(\vec{s}) &= N(\nu_P) \lim_{s \rightarrow +\infty} {}_1F_1[i\nu_P; 1; i(v s + \vec{v} \cdot \vec{s})] \\ &= \exp[-i\nu_P \ln(v s + \vec{v} \cdot \vec{s})]\end{aligned}\quad (1.179)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_f^{SE-}(\vec{x}) &= N(\nu_T)^* \lim_{x \rightarrow +\infty} {}_1F_1[-i\nu_T; 1; -i(v x + \vec{v} \cdot \vec{x})] \\ &= \exp[i\nu_T \ln(v x + \vec{v} \cdot \vec{x})],\end{aligned}\quad (1.180)$$

con $\nu_P = Z_P/v$ y $\nu_T = Z_T/v$.

Más tarde, en 1986, esta aproximación fue utilizada por Deco *et al.* [55] (ver también Reinhold y Miraglia [56]) para describir el caso de excitación electrónica en la cual \mathcal{L}_i^{SE+} se toma como la definida en (1.179) y \mathcal{L}_f^{SE-} resulta

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_f^{SE-}(\vec{s}) &= N(\zeta)^* \lim_{s \rightarrow +\infty} {}_1F_1[-i\zeta; 1; -i(p s + \vec{p} \cdot \vec{s})] \\ &= \exp[i\zeta \ln(p s + \vec{p} \cdot \vec{s})].\end{aligned}\quad (1.181)$$

La extensión del modelo SE para el estudio del caso de ionización simple fue presentado por Fainstein y Rivarola en 1987 [57]. En este caso también \mathcal{L}_i^{SE+} se considera como la definida en (1.179); mientras que existen dos posibilidades en la elección de \mathcal{L}_f^{SE-} : considerar al electrón ionizado como en un estado del continuo del blanco distorsionado por el potencial del proyectil o suponerlo en un estado del continuo del proyectil distorsionado por el potencial del blanco residual. En la primera \mathcal{L}_f^{SE-} se toma como en el caso de excitación, tal como definida en (1.181), esto da lugar a la aproximación llamada aproximación *eikonal simétrica para excitación* (Symmetric Eikonal for Excitation, SEE) (ver Fainstein

y Rivarola [57]); en la segunda \mathcal{L}_f^{SE-} se elige como

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_f^{SE-}(\vec{x}) &= N(\xi)^* \lim_{x \rightarrow +\infty} {}_1F_1[-i\xi; 1; -i(kx + \vec{k} \cdot \vec{x})] \\ &= \exp \left[i\xi \ln(kx + \vec{k} \cdot \vec{x}) \right],\end{aligned}\tag{1.182}$$

con lo cual se obtiene la aproximación *eikonal simétrica para captura* (Symmetric Eikonal for Capture, SEC) (ver Fainstein y Rivarola [57]).

En la aproximación SEE los perturbadores de los canales inicial y final resultan

$$W_i^{SE+} \chi_i^{SE+} = -\psi_i(\vec{x}, t) \left[\frac{1}{2} \nabla_s^2 \mathcal{L}_i^{SE+}(\vec{s}) + \vec{\nabla}_x \ln \phi_i(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_s \mathcal{L}_i^{SE+}(\vec{s}) \right]\tag{1.183}$$

$$W_f^{SE-} \chi_f^{SE-} = -\psi_f(\vec{x}, t) \left[\frac{1}{2} \nabla_s^2 \mathcal{L}_f^{SE-}(\vec{s}) + \vec{\nabla}_x \ln \phi_f(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_s \mathcal{L}_f^{SE-}(\vec{s}) \right].\tag{1.184}$$

En el caso de la SEC el perturbador del canal inicial es tal como el definido en (1.183), mientras que para el canal final se tiene

$$W_f^{SE-} \chi_f^{SE-} = -\psi_f(\vec{s}, t) \left[\frac{1}{2} \nabla_x^2 \mathcal{L}_f^{SE-}(\vec{x}) + \vec{\nabla}_s \ln \phi_f(\vec{s}) \cdot \vec{\nabla}_x \mathcal{L}_f^{SE-}(\vec{x}) \right].\tag{1.185}$$

La aproximación SE conserva el correcto comportamiento asintótico de la CDW y utiliza funciones distorsionadas normalizadas para todo tiempo. Al igual que la aproximación CDW, la SE es también una aproximación simétrica.

La aproximación SE representa de buena manera los resultados experimentales para secciones eficaces totales a energías intermedias [54]. Sin embargo, como las funciones $\mathcal{L}_{i,f}^{SE+,-}$ solo tienen en cuenta el comportamiento asintótico de las $\mathcal{L}_{i,f}^{CDW+,-}$, no es errado pensar que las primeras poseen menos información que las segundas, y como consecuencia la aproximación SE no logre describir completamente algunos procesos de dispersión múltiple. De hecho, para el caso de captura electrónica, ha sido demostrado (ver Deco y Rivarola [39], y Maidagan y Rivarola [54]) que los términos que reproducen el pico de Thomas están ausentes en el primer orden de la aproximación SE y por lo tanto ésta es incapaz de reproducirlo. Además ha sido mostrado por Deco *et al.* [58, 59] que las secciones eficaces totales obtenidas con la aproximación SE subestiman los resultados experimentales para los casos de captura electrónica simple desde blancos H y He, inclusive en el rango de energías intermedias.

A pesar de lo arriba mencionado, la aproximación SE ha mostrado ser muy útil para el estudio de procesos de excitación simple (ver Deco *et al.* [55]) entre protones y átomos de hidrógeno, y excitación doble (ver Ramírez *et al.* [60]) en colisiones entre proyectiles múltiplemente cargados y átomos de helio.

1.4.3. Aproximación CDW-EIS

La aproximación de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State, CDW- EIS) fue presentado en el año 1983 por Crothers y McCann [61] para el caso de ionización de átomos de hidrógeno por impacto de iones desnudos múltiplemente cargados. En esta aproximación la función de distorsión del canal inicial se toma como aquella correspondiente a la aproximación SE (1.179) y la del canal final como aquella que corresponde a la aproximación CDW (1.176):

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i^{CDW-EIS+}(\vec{s}) &= \mathcal{L}_i^{SE+}(\vec{s}) \\ &= \exp[-i\nu \ln(vs + \vec{v} \cdot \vec{s})]\end{aligned}\quad (1.186)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_f^{CDW-EIS-}(\vec{s}) &= \mathcal{L}_f^{CDW-}(\vec{s}) \\ &= N(\zeta)^* {}_1F_1[-i\zeta; 1; -i(ps + \vec{p} \cdot \vec{s})].\end{aligned}\quad (1.187)$$

La presencia de la función del continuo proyectil-electrón en (1.187) permite describir los procesos de dispersión múltiple.

En esta aproximación los perturbadores resultan

$$\begin{aligned}W_i^{CDW-EIS+} \chi_i^{CDW-EIS+} &= W_i^{SE+} \chi_i^{SE+} \\ &= -\psi_i(\vec{x}, t) \left[\frac{1}{2} \nabla_s^2 \mathcal{L}_i^{SE+}(\vec{s}) + \right. \\ &\quad \left. + \vec{\nabla}_x \ln \phi_i(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_s \mathcal{L}_i^{SE+}(\vec{s}) \right]\end{aligned}\quad (1.188)$$

$$\begin{aligned}W_f^{CDW-EIS-} \chi_f^{CDW-EIS-} &= W_f^{CDW-} \chi_f^{CDW-} \\ &= -\psi_f(\vec{x}, t) \left[\vec{\nabla}_x \ln \phi_f(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_s \mathcal{L}_f^{CDW-}(\vec{s}) \right].\end{aligned}\quad (1.189)$$

Es inmediato notar que esta aproximación no es simétrica ya que los perturbadores de los canales inicial y final resultan diferentes.

El modelo CDW-EIS ha sido ampliamente utilizado para el caso de ionización simple de blancos monoeléctricos (ver [61]) y multielectrónicos (ver Rivarola y Fainstein [62],

Fainstein *et al.* [63, 64, 65, 66, 67]). También ha sido aplicado para la ionización doble de átomos de He por impacto de proyectiles múltiplemente cargados (ver Fainstein *et al.* [68, 69]).

Por otro lado esta aproximación fue introducida por primera vez para el caso de captura electrónica por Martínez *et al.* en 1988 [70], y desde entonces ha sido utilizada para describir numerosos procesos de captura simple (ver Martínez y Rivarola [71], Martínez *et al.* [72], Busnengo *et al.* [38, 73, 74], Abufager *et al.* [75, 76, 77]) y doble (ver Martínez *et al.* [78, 79]).

Podemos mencionar también, aunque no será utilizada en los trabajos de esta tesis, una aproximación semejante a la CDW-EIS propuesta por Busnengo *et al.* en 1995 [73] para estudiar captura electrónica en colisiones asimétricas. Tal aproximación, llamada CDW-EFS (Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State, CDW-EFS), considera una fase eikonal en reemplazo de la función del continuo blanco-electrón del canal final y el factor del continuo proyectil- electrón en lugar de la correspondiente fase eikonal en el canal inicial.

Parte II

Proyectiles desnudos

Capítulo 2

Apantallamiento electrónico dinámico y discrepancias post-prior en el modelo CDW-EIS

2.1. Introducción

El trabajo que se presenta en este capítulo trata con la ionización electrónica simple de átomos en interacción con haces de iones desnudos rápidos. Con el fin de investigar estos procesos para blancos monoelectrónicos y de manera de acelerar la convergencia de una descripción en series de Born, se introdujeron los modelos de onda distorsionada. Entre ellos dos representaciones importantes merecen ser citadas: el modelo de *onda distorsionada del continuo* (Continuum Distorted Wave, CDW; ver sección 1.4.1, Belkić [19]) y el modelo de *onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal* (Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State, CDW-EIS; ver sección 1.4.3, Crothers y McCann [61]). Siguiendo las ideas principales propuestas por Rivarola *et al.* [80] para captura electrónica simple, se presentó una extensión al modelo CDW-EIS a cargo de Fainstein *et al.* [63] para ionización simple de blancos multielectrónicos. De hecho, el electrón a ser ionizado (llamado el electrón *activo*) es descrito en el canal de entrada por una función de onda de dos centros, resultando en el producto de un orbital ligado del blanco y una fase eikonal del continuo del proyectil mientras en el canal de salida el electrón ionizado es descrito también por una función de onda de dos centros dada por el producto de una onda plana y dos factores del continuo, uno asociado con el campo del blanco residual y el otro con el campo del proyectil. En esta aproximación los electrones no ionizados (llamados los electrones *pasivos*) fueron considerados como permaneciendo congelados en sus orbitales iniciales durante toda la colisión. Así, se supuso que estos electrones pasivos afectaban

principalmente la trayectoria del proyectil mientras que se supuso al electrón activo como moviéndose independientemente de ellos. Más aún, se mostró que la ionización puede ser descrita por una aproximación de onda distorsionada de tres cuerpos, siendo estos tres cuerpos el proyectil, el blanco residual considerado como un centro y el electrón activo. En particular el modelo CDW-EIS fue aplicado con éxito para describir numerosos sistemas de colisión (ver Fainstein *et al.* [81], Stolterfoht *et al.* [82]). La aproximación de Hartree-Fock fue empleada para representar los estados atómicos ligados iniciales, mientras que en el canal final se propusieron diferentes estados el continuo del blanco para describir la evolución del electrón activo. Para facilitar los cálculos de los elementos de la matriz de transición, las interacciones residuales no coulombianas de la interacción entre el blanco residual y el electrón activo fueron aproximadas, en el canal de salida, por un potencial coulombiano efectivo que tiene en cuenta la presencia de los electrones pasivos. Como consecuencia de esta aproximación, se obtuvieron discrepancias entre las versiones prior y post de los elementos de la matriz de transición las cuales fueron transmitidas a las secciones eficaces diferenciales y totales correspondientes. Gulyàs *et al.* [83] dentro de una aproximación de tres cuerpos calcularon los autoestados de un electrón ligado y del continuo del blanco considerando para ambos el mismo potencial Hartree-Fock-Slater residual del blanco y resolviendo numéricamente la correspondiente ecuación de Schrödinger del blanco. Con esta elección las discrepancias post-prior fueron eliminadas pero se necesitó arduo trabajo numérico-computacional para calcular las secciones eficaces.

En el presente trabajo incluimos en la versión post de la amplitud de transición un potencial residual que fue omitido en todos los cálculos previos cuando se adoptó un potencial coulombiano efectivo. Este potencial residual está relacionado con la interacción de los electrones pasivos con el electrón activo en el canal de salida produciendo así un apantallamiento dinámico del núcleo del blanco en el canal de salida.

En una evaluación preliminar de su influencia se utilizó un producto de funciones variacionales *single-zeta* en una representación de Roothaan-Hartree-Fock (RHF) para describir el estado ligado inicial del blanco encontrando que las discrepancias post-prior resultaban ampliamente disminuidas (ver Monti *et al.* [84]).

Luego, en una publicación posterior mostramos que utilizando funciones *five-zeta* RHF más completas para el estado ligado inicial, la inclusión del primer orden del apantallamiento dinámico evita cualquier discrepancia post-prior (ver Monti *et al.* [85]). Más aún, se muestra que el apantallamiento dinámico da una contribución cuantitativa importante

en las secciones eficaces doble diferenciales para ionización. Como un ejemplo, se analiza el caso de impacto de protones sobre átomos de helio. Se utilizan unidades atómicas a menos que se indique lo contrario.

2.2. Teoría

Consideremos la ionización simple de un blanco multielectrónico de carga nuclear Z_T , N electrones pasivos, y un electrón activo en colisión con un ion desnudo de carga nuclear Z_P . Se utilizará la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto (ver sección 1.3), donde la distancia internuclear está dada por $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$, con \vec{v} la velocidad de impacto, $\vec{\rho}$ el parámetro de impacto ($\vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0$), y t el tiempo de evolución tomando $t = 0$ en el instante de menor distancia entre los núcleos. El Hamiltoniano electrónico total es expresado como

$$H = -\frac{\nabla_x^2}{2} - \sum_{j=1}^N \frac{\nabla_{x_j}^2}{2} - \frac{Z_T}{x} - \sum_{j=1}^N \frac{Z_T}{x_j} - \frac{Z_P}{s} - \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{s_j} + \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,l=1 \\ j \neq l}}^N \frac{1}{|\vec{x}_j - \vec{x}_l|} + \frac{Z_P Z_T}{R} \quad (2.1)$$

donde \vec{x} (\vec{s}) y \vec{x}_j (\vec{s}_j) representa el vector posición del electrón activo y del j -ésimo electrón pasivo con respecto al núcleo del blanco (proyector), respectivamente. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo que describe la reacción está dada por

$$\left(H - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_r \right) \Psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, \{\vec{r}_j\}, t) = 0 \quad (2.2)$$

donde Ψ_i^+ y Ψ_f^- son las funciones de onda electrónicas exactas inicial y final con correctas condiciones de contorno saliente y entrante, respectivamente; \vec{r} y \vec{r}_j indican los vectores posición del electrón activo y del j -ésimo electrón pasivo con respecto a un sistema de referencia inercial arbitrario. Los estados inicial (ligado) y final (del continuo) del blanco independientes del tiempo deben verificar

$$(H_i - E_i) \Phi_i(\vec{x}, \{\vec{x}_j\}) = 0 \quad (2.3)$$

y

$$(H_f - E_f) \Phi_f(\vec{r}, \{\vec{r}_j\}) = 0, \quad (2.4)$$

respectivamente; con

$$H = H_i + V_i = H_i - \frac{Z_P}{s} - \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{s_j} + \frac{Z_P Z_T}{R} \quad (2.5)$$

$$= H_f + V_f = H_f - \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{s_j} + \frac{Z_P Z_T}{R}, \quad (2.6)$$

donde E_i y E_f son la energía total electrónica inicial y final del blanco, y V_i y V_f representan la perturbación introducida por el proyectil en los canales de ionización inicial y final, respectivamente. El potencial ($-Z_P/s$) ha sido incluido en H_f considerando que el electrón ionizado es descrito en un estado del continuo de dos centros (blanco residual y proyectil) en el canal de salida.

Con el fin de reducir la descripción del problema (ver Fainstein *et al.* [63]), asumimos que los electrones pasivos permanecen congelados en sus orbitales iniciales durante la colisión y que el electrón activo evoluciona independientemente de ellos. Así las funciones de onda exactas inicial y final pueden escribirse como

$$\Psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, \{\vec{r}_j\}, t) = \Psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, t) \varphi_i(\{\vec{x}_j\}) \quad (2.7)$$

con $\varphi_i(\{\vec{x}_j\})$ la función de onda de los electrones pasivos. En la expresión (2.7), $\Psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, t)$ son ahora funciones de onda inicial y final con correctas condiciones de contorno saliente y entrante correspondientes al electrón activo (ver sección 1.3.1, ecuaciones (1.128) y (1.130)).

Las funciones de onda Φ_i y Φ_f resultan entonces dadas por

$$\Phi_i(\vec{x}, \{\vec{x}_j\}) = \phi_i(\vec{x}) \varphi_i(\{\vec{x}_j\}) \quad (2.8)$$

$$\Phi_f(\vec{r}, \{\vec{r}_j\}) = \phi_f(\vec{r}) \varphi_i(\{\vec{x}_j\}) \quad (2.9)$$

donde con $\phi_i(\vec{x})$ and $\phi_f(\vec{r})$ describimos los estados inicial ligado y final del continuo del electrón activo, respectivamente. Entonces promediando sobre las funciones de onda de los electrones pasivos, la ecuación de Schrödinger de múltiples electrones (2.2) se reduce a una ecuación de Schrödinger de un electrón activo dada por

$$\left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \Big|_r \right) \Psi_{i,f}^{+,-}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.10)$$

donde

$$\tilde{H} = \langle \varphi_i | H | \varphi_i \rangle = \tilde{H}_a + \varepsilon_P + \tilde{V}, \quad (2.11)$$

con

$$\tilde{H}_a = -\frac{\nabla_x^2}{2} - \frac{Z_T}{x} + V_{ap}(\vec{x}) \quad (2.12)$$

$$\tilde{V} = \frac{-Z_P}{s} + V_s(\vec{R}); \quad (2.13)$$

siendo

$$V_{ap}(\vec{x}) = \left\langle \varphi_i \left| \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.14)$$

la interacción electrostática entre el electrón activo y los electrones pasivos,

$$V_s(\vec{R}) = \frac{Z_P Z_T}{R} - \left\langle \varphi_i \left| \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{s_j} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.15)$$

la interacción electrostática entre el proyectil y el blanco residual, y

$$\varepsilon_p = \left\langle \varphi_i \left| -\sum_{j=1}^N \left(\frac{\nabla_{x_j}^2}{2} + \frac{Z_T}{x_j} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,l=1 \\ j \neq l}}^N \frac{1}{|\vec{x}_j - \vec{x}_l|} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (2.16)$$

la energía media de los electrones pasivos en el estado φ_i , excluyendo sus interacciones con el electrón activo. Como ε_p es independiente de las coordenadas del electrón activo simplemente añadirá una fase $\exp(i\varepsilon_p t)$ a la función de onda, cambiando la escala de energía mediante la cantidad ε_p . Ahora las ecuaciones de Schrödinger que satisfacen las funciones de onda inicial y final independientes del tiempo del electrón activo resultan

$$\left(\tilde{H}_a - \varepsilon_{i,f} \right) \phi_{i,f}(\vec{x}) = 0 \quad (2.17)$$

con

$$\varepsilon_{i,f} = E_{i,f} - \varepsilon_p. \quad (2.18)$$

Así, las funciones de onda totales inicial y final del electrón activo pueden escribirse como

$$\Psi_i^+ = \psi_i^+(\vec{r}, t) \exp\left(-i \int_{-\infty}^t V_s(\vec{R}) dt'\right) \quad (2.19)$$

y

$$\Psi_f^- = \psi_f^-(\vec{r}, t) \exp\left(+i \int_t^{+\infty} V_s(\vec{R}) dt'\right), \quad (2.20)$$

respectivamente, donde la fase dada por la integral de $V_s(\vec{R})$ solamente es relevante para las distribuciones angulares del proyectil, ya que es independiente de las coordenadas electrónicas. En las ecuaciones (2.19) y (2.20), ψ_i^+ y ψ_f^- son soluciones exactas inicial y final de una ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (la cual excluye el potencial estático $V_s(\vec{R})$) con correctas condiciones de contorno saliente y entrante, respectivamente. Ahora, siguiendo un formalismo de onda distorsionada, las funciones de onda distorsionada inicial y final se eligen como

$$X_i^+ = \chi_i^+(\vec{x}, t) \exp\left(-i \int_{-\infty}^t V_s(\vec{R}) dt'\right) \quad (2.21)$$

y

$$X_f^- = \chi_f^-(\vec{x}, t) \exp\left(+i \int_t^{+\infty} V_s(\vec{R}) dt'\right), \quad (2.22)$$

donde

$$\chi_i^+(\vec{x}, t) = \psi_i(\vec{x}, t) \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \quad (2.23)$$

$$\chi_f^-(\vec{x}, t) = \psi_f(\vec{x}, t) \mathcal{L}_f^-(\vec{s}), \quad (2.24)$$

con $\mathcal{L}_i^+(\vec{s})$ y $\mathcal{L}_f^-(\vec{s})$ funciones de distorsión multiplicativas las cuales consideran las interacciones entre el proyectil y el electrón. Las fases eikonaes multiplicativas en (2.21) y (2.22) representan la dispersión entre el proyectil y el blanco residual.

Las funciones de onda ψ_i^+ y ψ_f^- deben verificar los límites asintóticos

$$\psi_i^+ \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} X_i^+ \quad (2.25)$$

y

$$\psi_f^- \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} X_f^-. \quad (2.26)$$

Los estados del electrón activo (ligado y del continuo del blanco) dependientes del tiempo

están dados por

$$\psi_i(\vec{x}, t) = \phi_i(\vec{x}) \exp(-i\varepsilon_i t) \quad (2.27)$$

$$\psi_f(\vec{x}, t) = \phi_f(\vec{x}) \exp(-i\varepsilon_f t), \quad (2.28)$$

(respectivamente) con

$$\phi_f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left(i\vec{k} \cdot \vec{x}\right) N^*(\lambda) {}_1F_1\left[-i\lambda, 1, -i\left(kx + \vec{k} \cdot \vec{x}\right)\right] \quad (2.29)$$

representando el estado del continuo del electrón activo en presencia del blanco residual con energía $\varepsilon_f = k^2/2$, siendo \vec{k} el momento lineal del electrón ionizado con respecto al núcleo del blanco residual, $N(a) = \exp(\pi a/2)\Gamma(1+ia)$ (con Γ la función Gamma de Euler) es el factor de normalización de la función hipergeométrica confluyente ${}_1F_1$, y $\lambda = \tilde{Z}_T/k$ con \tilde{Z}_T una carga efectiva o neta del blanco a ser elegida.

En (2.23) y (2.24), $\mathcal{L}_i^+(\vec{s})$ se elige como una fase eikonal y $\mathcal{L}_f^-(\vec{s})$ como un factor del continuo,

$$\mathcal{L}_i^+(\vec{s}) = \exp[-i\nu \ln(vs + \vec{v} \cdot \vec{s})] \quad (2.30)$$

$$\mathcal{L}_f^-(\vec{s}) = N^*(\xi) {}_1F_1[-i\xi, 1, -i(ps + \vec{p} \cdot \vec{s})] \quad (2.31)$$

donde $\nu = Z_P/v$ y $\xi = Z_P/p$, siendo \vec{p} el momento lineal del electrón ionizado con respecto al proyectil ($\vec{p} = \vec{k} - \vec{v}$). El uso de estos factores de distorsión asegura la inclusión de correctas condiciones asintóticas (de contorno) correspondientes al campo del proyectil en las funciones de onda de los canales inicial y final.

Somos ahora capaces de escribir el primer orden de las versiones *prior* y *post* de la amplitud de dispersión.

2.2.1. Versión prior de la amplitud de dispersión

En la aproximación de primer orden de la versión prior de la amplitud de transición como función del parámetro de impacto descrita desde un sistema de referencia fijo al

núcleo del blanco tenemos:

$$\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle X_f^- \left| \left[\left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right] \right| X_i^+ \right\rangle \quad (2.32)$$

$$= -i \exp \left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V_s(\vec{R}) dt \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \chi_f^- | (W_i | \chi_i^+) \rangle \quad (2.33)$$

siempre que la función de onda distorsionada inicial χ_i^+ no contribuya a la amplitud de dispersión cuando $t \rightarrow +\infty$, esto es

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \psi_f^- | \chi_i^+ \rangle = 0. \quad (2.34)$$

En (2.33), W_i es el bien conocido operador perturbador EIS:

$$W_i \chi_i^+ = \psi_i(\vec{x}, t) \left[\frac{1}{2} \nabla_{\vec{s}}^2 \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) + \vec{\nabla}_{\vec{x}} \ln \phi_i(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{s}} \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right]. \quad (2.35)$$

Así, la amplitud de transición puede ser escrita como

$$\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}) = -i \exp \left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V_s(\vec{R}) dt \right) a_{if}^-(\vec{\rho}) \quad (2.36)$$

donde

$$a_{if}^-(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\Delta\epsilon t) \int d\vec{x} \left\{ \phi_f^*(\vec{x}) \mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s}) \left[\phi_i(\vec{x}) \frac{1}{2} \nabla_{\vec{s}}^2 \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) + \vec{\nabla}_{\vec{x}} \phi_i(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{s}} \mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right] \right\} \quad (2.37)$$

con $\Delta\epsilon = \epsilon_f - \epsilon_i$.

2.2.2. Versión post de la amplitud de dispersión

En la aproximación de primer orden de la versión post de la amplitud de dispersión tenemos

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle X_f^- \left| \left(\tilde{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| X_i^+ \right\rangle. \quad (2.38)$$

El potencial $V_T(\vec{x}) = -Z_T/x + V_{ap}(\vec{x})$ en (2.12) usualmente es aproximado por un potencial coulombiano efectivo $V_T(\vec{x}) = -Z_T^{ef}/x$, donde Z_T^{ef} es una carga efectiva elegida de

manera de preservar la energía de ligadura ε_i del orbital inicial del electrón activo, i.e. $Z_T^{ef} = n_i\sqrt{-2\varepsilon_i}$, con n_i el número cuántico principal del orbital. Así, la versión post de la amplitud de dispersión se escribe,

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = -i \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V_s(\vec{R}) dt\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\langle \chi_f^- | (W_f^\dagger + V_T^{ef}) | \chi_i^+ \rangle \right] \quad (2.39)$$

siempre que, ahora, la función de onda distorsionada final χ_f^- no contribuya a la amplitud de dispersión cuando $t \rightarrow -\infty$,

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \chi_f^- | \psi_i^+ \rangle = 0. \quad (2.40)$$

En (2.39) W_f es el ampliamente utilizado operador perturbador CDW

$$W_f^- \chi_f^- = \psi_f(\vec{x}, t) \left[\vec{\nabla}_{\vec{x}} \ln \phi_f(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{s}} \mathcal{L}_f^-(\vec{s}) \right]. \quad (2.41)$$

El potencial $V_T^{ef}(\vec{x}) = -(Z_T - Z_T^{ef})/x + V_{ap}(\vec{x})$ ha sido omitido en cálculos previos. Este potencial resulta de tomar $\tilde{Z}_T = Z_T^{ef}$ en (2.29). Haciendo esto, no se satisfacen correctas condiciones de contorno en el canal de salida. A fin de preservarlas, la función de onda del electrón activo en el continuo del blanco debe ser elegida como aquella correspondiente a un potencial asintótico $-(Z_T - N)/x$. Esto corresponde a tomar $\tilde{Z}_T = (Z_T - N)$ en (2.29). En tal caso la amplitud de dispersión resulta

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = -i \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V_s(\vec{R}) dt\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\langle \chi_f^- | (W_f^\dagger + V_T^{as}) | \chi_i^+ \rangle \right] \quad (2.42)$$

donde ahora $V_T^{as}(\vec{x}) = -N/x + V_{ap}(\vec{x})$.

La inclusión de los potenciales perturbativos V_T^{ef} and V_T^{as} en (2.39) y (2.42), originan, respectivamente, versiones post *completas* de las correspondientes amplitudes de dispersión. En este sentido tenemos,

$$\mathcal{A}_{if}^+(\vec{\rho}) = \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V_s(\vec{R}) dt\right) a_{if}^+(\vec{\rho}) \quad (2.43)$$

donde

$$\begin{aligned}
 a_{if}^+(\vec{\rho}) = & -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\Delta\varepsilon t) \\
 & \int d\vec{x} \left\{ \left[\vec{\nabla}_{\vec{x}}\phi_f(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{s}}\mathcal{L}_f^-(\vec{s}) \right]^* \phi_i(\vec{x})\mathcal{L}_i^+(\vec{s}) + \right. \\
 & \left. + \left[-(Z_T - \tilde{Z}_T)/x + V_{ap}(\vec{x}) \right] \phi_f^*(\vec{x})\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s})\phi_i(\vec{x})\mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \right\} \quad (2.44)
 \end{aligned}$$

eligiendo $\tilde{Z}_T = Z_T^{ef}$ o $\tilde{Z}_T = Z_T - N$ en (2.29). Así (2.44) da la forma efectiva o asintótica completa de la versión post de la amplitud de dispersión, respectivamente. Detalles sobre el cálculo del potencial V_{ap} son presentados en el Apéndice A.1.

De (2.44), puede verse fácilmente que la versión post de la amplitud de dispersión puede ser separada en dos términos

$$a_{if}^+(\vec{\rho}) = a_{if}^{+,a}(\vec{\rho}) + a_{if}^{+,b}(\vec{\rho}) \quad (2.45)$$

donde

$$a_{if}^{+,a}(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\Delta\varepsilon t) \int d\vec{x} \left[\vec{\nabla}\phi_f(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}\mathcal{L}_f^-(\vec{s}) \right]^* \phi_i(\vec{x})\mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \quad (2.46)$$

es la amplitud de dispersión encontrada en la referencia [63], y

$$a_{if}^{+,b}(\vec{\rho}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\Delta\varepsilon t) \int d\vec{x} \tilde{V}_T(\vec{x})\phi_f^*(\vec{x})\mathcal{L}_f^{-*}(\vec{s})\phi_i(\vec{x})\mathcal{L}_i^+(\vec{s}) \quad (2.47)$$

otorga una nueva contribución a la amplitud de dispersión asociada con el potencial \tilde{V}_T , donde

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

De acuerdo con la aproximación eikonal (ver McCarroll y Salin [30], Willets y Wallace [86]), el elemento de la matriz de transición $\mathcal{R}_{if}^+(\vec{\eta})$ como función de la transferencia de momento transversal puede ser introducida mediante la relación

$$\mathcal{R}_{if}^+(\vec{\eta}) = \frac{1}{2\pi} \int d\vec{\rho} \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}) a_{if}^+(\vec{\rho}) \quad (2.49)$$

$$= \mathcal{R}_{if}^{+,a}(\vec{\eta}) + \mathcal{R}_{if}^{+,b}(\vec{\eta}) \quad (2.50)$$

donde

$$\mathcal{R}_{if}^{+,a}(\vec{\eta}) = \frac{1}{2\pi} \int d\vec{\rho} \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}) a_{if}^{+,a}(\vec{\rho}) \quad (2.51)$$

y

$$\mathcal{R}_{if}^{+,b}(\vec{\eta}) = \frac{1}{2\pi} \int d\vec{\rho} \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}) a_{if}^{+,b}(\vec{\rho}). \quad (2.52)$$

Como estamos trabajando con la aproximación de parámetro de impacto del modelo eikonal, se consideran todos los posibles momentos angulares finales del electrón ionizado (ver Galassi *et al.* [87]). Hemos considerado el caso de ionización simple de He por impacto de protones, describiendo el estado ligado inicial del electrón activo mediante funciones RHF *single-zeta* y *five-zeta*:

$$\phi_i(\vec{x}) = \psi_i(\vec{x}_1) = \sum_{l=1}^5 N_l \exp(-Z_l x_1) \quad (2.53)$$

donde $N_l = Z_l^{3/2} b_l / \sqrt{\pi}$ y los parámetros Z_l y b_l se encuentran tabulados en la referencia [88]. El caso de una representación RHF con funciones *single-zeta* para el estado ligado inicial del electrón activo puede ser directamente evaluado haciendo $b_1 = 1$ y $b_l = 0$ para $l = 2, \dots, 5$. El modelo podría también ser aplicado al estudio de la ionización simple de otros blancos multielectrónicos considerando que los electrones en el átomo son descritos por un determinante de Slater [88] de manera de tener en cuenta el carácter asimétrico de la función de onda total. En tal caso, el potencial \tilde{V}_T debe ser modificado de acuerdo a esta representación de los electrones del blanco.

Usando el conocido método de transformada de Fourier, los términos $\mathcal{R}_{if}^{+,a}$ and $\mathcal{R}_{if}^{+,b}$ dados por las ecuaciones (2.51) and (2.52), que se necesitan para obtener las versiones post completas de la amplitud de dispersión resultan

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{if}^{+,a}(\vec{\eta}) = & \frac{\tilde{Z}_T Z_P N(\xi) N(\nu) N(\lambda)}{2\pi\alpha\gamma} \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^{-i\xi} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{-i\nu} \\ & \times \exp(-\pi\nu) \left[A_1 {}_2F_1(i\xi, i\nu, 1, z) + \right. \\ & \left. + (-i)\nu A_2 {}_2F_1(1 + i\xi, 1 + i\nu, 2, z) \right] \end{aligned} \quad (2.54)$$

y

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{if}^{+,b}(\vec{\eta}) = & -i \frac{\sqrt{8}}{\pi v^2} \frac{N(\xi)N(\nu)N(\lambda)}{\alpha} \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^{-i\xi} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{-i\nu} \\
& \times [B_1 {}_2F_1(i\xi, i\nu, 1, z) + B_2 {}_2F_1(1 + i\xi, 1 + i\nu, 2, z)] \\
& \times \sum_{l=1}^5 b_l Z_l^{3/2} \left\{ (1 + \tilde{Z}_T - Z_T) \alpha_l (1 - G_l)^{-i\lambda} + \right. \\
& \quad \left. + \sum_{j=1}^5 \sum_{j'=1}^5 a_{jj'} \alpha_{ljj'} (1 - G_{ljj'})^{-i\lambda} \right. \\
& \quad \left. \times [2 + \alpha_{ljj'} Z_{jj'} (2Z_{ljj'} - i\lambda B_{ljj'} (1 - G_{ljj'})^{-1})] \right\} \quad (2.55)
\end{aligned}$$

donde

$$A_1 = \sum_{l=1}^5 \frac{b_l Z_l^{3/2} B_l}{\alpha_l^2} (1 - G_l)^{-(1+i\lambda)} \quad (2.56)$$

$$A_2 = \sum_{l=1}^5 \frac{b_l Z_l^{3/2} B_l \Omega_l}{\alpha_l^2} (1 - G_l)^{-(1+i\lambda)} \quad (2.57)$$

$$B_1 = Z_P q^2 \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\beta} \right) \quad (2.58)$$

$$B_2 = 2i Z_P^2 \alpha^2 \left(\frac{\delta\beta}{v} - \frac{(\delta - \beta)\gamma}{p} \right) \quad (2.59)$$

con

$$\vec{q} = -\vec{\eta} - (\Delta\varepsilon/v)\hat{v} \quad (2.60)$$

$$\alpha = q^2/2 \quad (2.61)$$

$$\beta = -\Delta\varepsilon \quad (2.62)$$

$$\delta = \vec{p} \cdot \vec{v} - pv + \beta \quad (2.63)$$

$$\gamma = \alpha + \vec{p} \cdot \vec{q} \quad (2.64)$$

$$z = 1 - \frac{\alpha\delta}{\beta\gamma} \quad (2.65)$$

$$B_l = \vec{q} \cdot [\vec{q} + \vec{k}(1 + i\lambda_l)] \quad (2.66)$$

$$G_l = \vec{k} \cdot [\vec{q} + \vec{k}(1 + i\lambda_l)] / \alpha_l \quad (2.67)$$

$$C_l = (v/p)(\vec{p} - p\hat{v}) \cdot [\vec{q} + \vec{k}(1 + i\lambda_l)] \quad (2.68)$$

$$\Omega_l = \alpha (\gamma C_l + \delta B_l) / (\beta \gamma B_l) \quad (2.69)$$

$$B_{ljj'} = 2(ik - Z_{ljj'} G_{ljj'}) \quad (2.70)$$

$$G_{ljj'} = \vec{k} \cdot [\vec{q} + \vec{k}(1 + i\lambda_{ljj'})] / \lambda_{ljj'} \quad (2.71)$$

$$\alpha_l = \frac{1}{2} [|\vec{k} + \vec{q}|^2 + Z_l^2] \quad (2.72)$$

$$\alpha_{ljj'} = \frac{1}{2} [|\vec{k} + \vec{q}|^2 + Z_{ljj'}^2] \quad (2.73)$$

$$\lambda_l = Z_l/k \quad (2.74)$$

$$\lambda_{ljj'} = Z_{ljj'}/k \quad (2.75)$$

$$a_{jj'} = -4b_j b_{j'} Z_j^{3/2} Z_{j'}^{3/2} / Z_{jj'}^3 \quad (2.76)$$

$$Z_{jj'} = Z_j + Z_{j'} \quad (2.77)$$

$$Z_{ljj'} = Z_l + Z_j + Z_{j'} \quad (2.78)$$

La expresión para \mathcal{R}_{if}^+ para una representación RHF con funciones *single-zeta* puede ser fácilmente calculada a partir de la expresión obtenida más arriba para el caso de funciones *five-zeta* tomando $b_1 = 1$, $b_l = b_j = b_{j'} = 0$ y $Z_l = Z_j = Z_{j'} = 0$ para $l, j, j' = 2, \dots, 5$; el valor para Z_1 puede ser encontrado en la referencia [88].

Finalmente la sección eficaz doble diferencial en la energía del electrón y ángulo de emisión se define como

$$\frac{d^2\sigma}{dE_k d\Omega_k} = k \int d\vec{\eta} |R(\vec{\eta})|^2. \quad (2.79)$$

2.3. Resultados

En esta sección presentamos los resultados obtenidos para secciones eficaces doble diferenciales en la energía del electrón y el ángulo de emisión para representaciones RHF *single-zeta* del blanco, y secciones eficaces doble diferenciales en la energía del electrón y el ángulo de emisión y simple diferenciales en la energía del electrón para representaciones *five-zeta* del blanco.

2.3.1. Resultados para una representación *single-zeta* RHF del blanco

En las figuras 2.1 y 2.2, se presentan secciones eficaces doble diferenciales (Doubly Differential Cross Sections, DDCS) como función de la energía de emisión del electrón para ángulos fijos de emisión de $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 30^\circ$, respectivamente, para impacto de protones a 1 MeV de energía de colisión. Éstas son calculadas usando las versiones prior y post considerando en la función del continuo del blanco residual una carga asintótica $Z_T^{as} = (Z_T - 1)$ (figuras a) o una carga efectiva $Z_T^{ef} = 1.339$ (figuras b). Las versiones post contemplan los casos de inclusión o exclusión de los correspondientes potenciales perturbativos V_T^{as} y V_T^{ef} . Se evidencia que los cálculos utilizando las versiones post que excluyen estos potenciales subestiman los resultados obtenidos con la versión prior y que incluirlos conduce a un acuerdo cercano entre predicciones post y prior. En el caso de utilizar la carga residual asintótica, la comparación entre las dos versiones post muestra explícitamente la influencia del apantallamiento electrónico dinámico en las DDCS resultantes. La comparación con datos experimentales muestra la relevancia de la inclusión de tal interacción. Cuando se utilizan cargas efectivas, el apantallamiento electrónico dinámico se considera en alguna manera aproximada y por lo tanto la diferencia entre las DDCS obtenidas incluyendo o no el potencial V_T^{ef} en los cálculos resulta reducida. Todo este análisis es también válido para los resultados presentados en las figuras 2.3 y 2.4, donde se muestra el caso de impacto de protones a una energía de colisión de 1.5 MeV.

Como un ejemplo para distribuciones angulares, en figuras 2.5 y 2.6, se presentan DDCS como función del ángulo de emisión para una energía de emisión fija de 100 keV para impacto de protones a una energía de colisión de 1 MeV y 1.5 MeV, respectivamente. Nuevamente, para las DDCS post se obtiene una gran subestimación de los resultados prior cuando se utiliza la carga asintótica sin considerar el potencial V_T^{as} . Así como en las distribuciones energéticas mostradas anteriormente, el apantallamiento electrónico dinámico ha mostrado jugar un papel importante en las DDCS. Como fue explicado, para el caso de cargas efectivas el apantallamiento electrónico dinámico es parcialmente incluido en los cálculos y entonces la diferencia entre los cálculos post y prior resulta reducida. No obstante, todavía quedan grandes diferencias con las DDCS prior a pequeños y grandes ángulos de emisión cuando se consideran cargas asintóticas o efectivas sin incluir los correspondientes términos V_T^{as} y V_T^{ef} en las amplitudes de dispersión post. En todos los casos aquí considerados, se obtiene un buen acuerdo entre las predicciones prior y las post completas, mostrando

además buena concordancia con los resultados experimentales. Las diferencias remanentes entre ambas aproximaciones son atribuidas a la mala representación del blanco al utilizar funciones Rothaan-Hartree-Fock *single-zeta*; lo cual en la aproximación prior tiene como consecuencia una descripción pobre del estado inicial del blanco y en la post una mala representación de la interacción del electrón ionizado con el electrón pasivo. Esto es independiente de elegir funciones de onda asintótica o coulombiana efectiva para la función de onda del continuo que describe al electrón ionizado en el canal de salida.

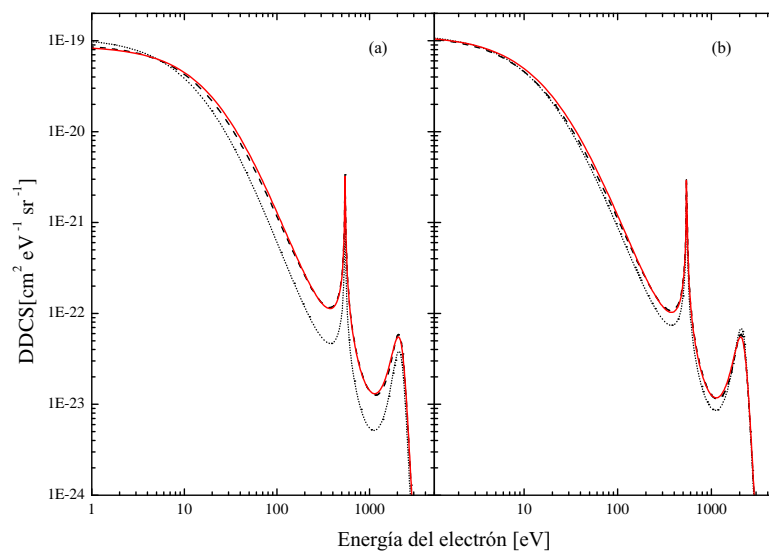


Figura 2.1: Sección eficaz doble diferencial para ionización electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1 MeV como función de la energía del electrón ionizado para un ángulo fijo de emisión de 0° . Se utilizaron funciones de onda RHF *single-zeta* tomando una carga asintótica (figura a) y efectiva (figura b) en el continuo del electrón activo en el canal de salida. Teoría: —, cálculos con el modelo CDW-EIS post completo; ·····, cálculos CDW-EIS post; - - -, cálculos CDW-EIS prior.

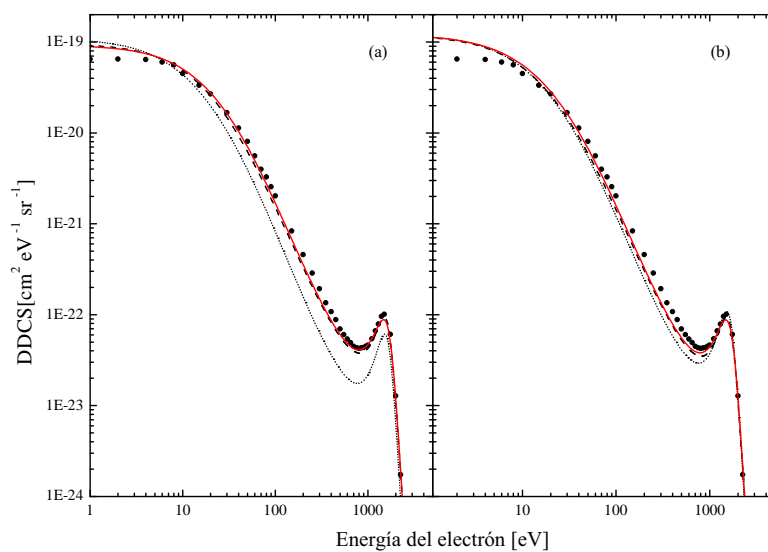


Figura 2.2: Igual a figura 2.1 pero para un ángulo fijo de emisión de 30° . Experimento: \bullet , Toburen *et al.* extraído de referencia [89].

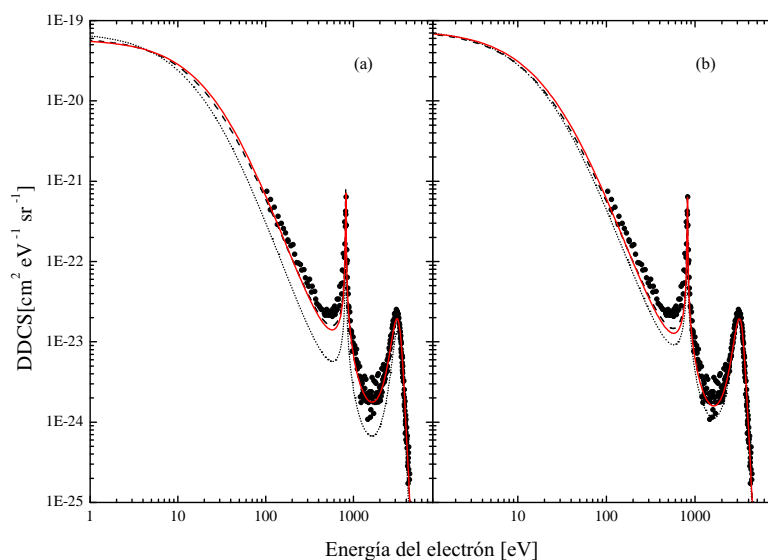


Figura 2.3: Sección eficaz doble diferencial para ionización electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1.5 MeV como función de la energía del electrón ionizado para un ángulo fijo de emisión de 0° . Se utilizaron funciones de onda RHF *single-zeta* tomando una carga asintótica (figura a) y efectiva (figura b) en el continuo del electrón activo en el canal de salida. Teoría: —, cálculos con el modelo CDW-EIS post completo; \cdots , cálculos CDW-EIS post; - - -, cálculos CDW-EIS prior. Experimento: \bullet , Lee *et al.* extraído de referencia [90].

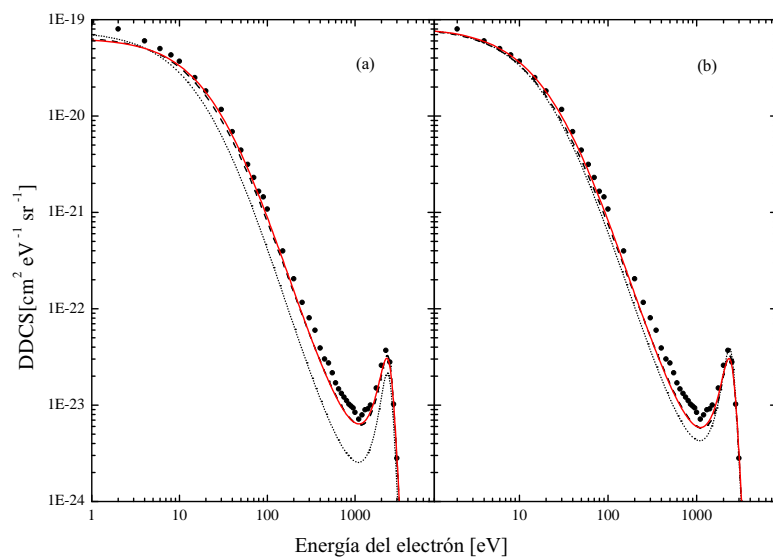


Figura 2.4: Igual a figura 2.3 pero para un ángulo fijo de emisión de 30° . Experimento: \bullet , Toburen *et al.* extraído de referencia [89].

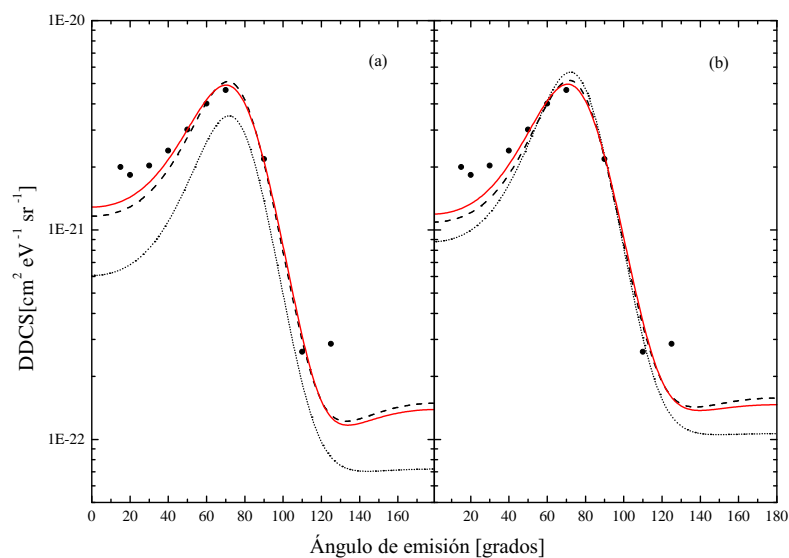


Figura 2.5: Sección eficaz doble diferencial para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1 MeV como función del ángulo de emisión para una energía del electrón ionizado de 100 eV. Se utilizaron funciones de onda RHF *single-zeta* tomando una carga asintótica (figura a) y efectiva (figura b) en el continuo del electrón activo en el canal de salida. Teoría: —, cálculos con el modelo CDW-EIS post completo; \cdots , cálculos CDW-EIS post; - - -, cálculos CDW-EIS prior. Experimento: \bullet , Lee *et al.* extraído de referencia [90].

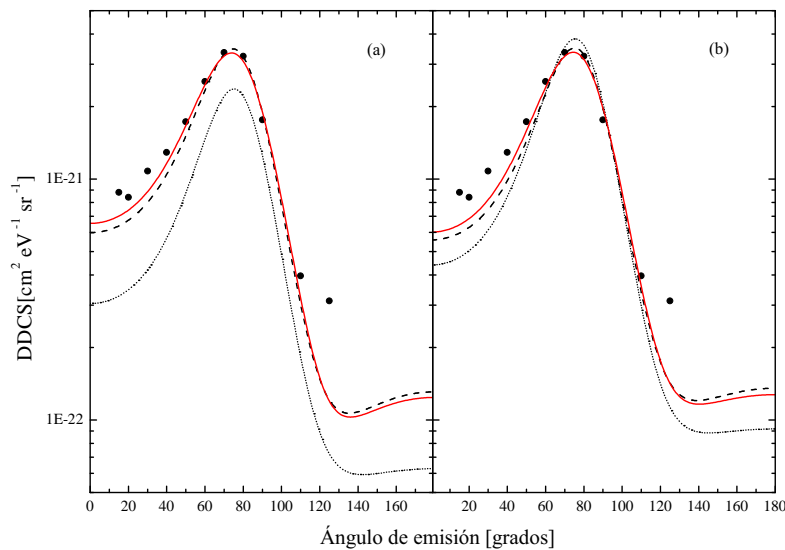


Figura 2.6: Igual a figura 2.5 pero para una energía de colisión de 1.5 MeV.

2.3.2. Resultados para una representación *five-zeta* RHF del blanco

Secciones eficaces doble diferenciales

En las figuras 2.7 y 2.8 se muestran cálculos de secciones eficaces doble diferenciales como función del ángulo azimutal subtendido por el electrón ionizado para energías fijas de ionización para impacto de protones sobre helio a energías de colisión de 1 MeV y 1.5 MeV, respectivamente. Distintas energías de emisión de 10 eV, 100 eV y 500 eV fueron consideradas para ambos casos. Las DDCS teóricas son comparadas con resultados experimentales [89]. En las figuras 2.7.a, 2.7.d y 2.7.g y en las figuras 2.8.a, 2.8.d y 2.8.g, se presentan cálculos utilizando la versión prior de la amplitud de transición considerando una función de onda RHF *single-zeta* [88] para describir el estado ligado inicial y una carga asintótica $\tilde{Z}_T = 1$ en el continuo del electrón activo en el canal de salida. También se muestran DDCS calculadas con las versiones post usando estas elecciones para las funciones de onda inicial y final pero incluyendo o no las contribuciones del potencial $\tilde{V}_T = -1/x + V_{ap}(\vec{x})$. La comparación entre estas dos versiones post nos permite determinar la importante contribución a las DDCS del apantallamiento dinámico asociado con \tilde{V}_T . El contraste entre los cálculos realizados con la versión prior y aquellos obtenidos con las versiones post incluyendo el potencial \tilde{V}_T muestra que aún restan algunas discrepancias post-prior en las DDCS.

En las figuras 2.7.b, 2.7.e y 2.7.h, y en las figuras 2.8.b, 2.8.e y 2.8.h, una función de onda RHF *five-zeta* es utilizada para representar el estado ligado inicial mientras en el canal fi-

nal se elige la carga asintótica $\tilde{Z}_T = 1$ como en el análisis previo. Es claro que esta elección afectará los cálculos del potencial \tilde{V}_T y por lo tanto de la contribución del apantallamiento dinámico a las DDCS. Nuevamente, este potencial colabora de forma importante en las DDCS resultantes, pero un mejor acuerdo se obtiene ahora entre los cálculos obtenidos con las versiones prior y post cuando en la última se considera el término \tilde{V}_T . La influencia del apantallamiento dinámico disminuye cuando se utiliza una función RHF *five-zeta* para describir el estado ligado inicial y una carga efectiva $\tilde{Z}_T = Z_T^{ef}$ es elegida en la función de onda final del continuo, como puede observarse en las figuras 2.7.c, 2.7.f y 2.7.i y en las figuras 2.8.c, 2.8.f y 2.8.i. Este comportamiento surge, como se mencionó anteriormente, del hecho que alguna parte del apantallamiento dinámico es tenida en cuenta cuando se considera una carga efectiva en el continuo del canal de salida. Nuevamente, tiende a desaparecer cualquier discrepancia post-prior.

En la figura 2.9, se presentan DDCS para las versiones post del modelo CDW-EIS excluyendo o incluyendo el potencial \tilde{V}_T . Se consideraron energías de impacto de 100 keV y 500 keV. Se eligieron en el canal inicial funciones de onda RHF *five-zeta* y funciones del continuo coulombianas asintóticas en el canal final. Como \tilde{V}_T es tratado como un potencial perturbativo, la influencia del apantallamiento dinámico es considerada solamente a primer orden y su influencia sobre las DDCS puede obtenerse por comparación entre estas dos versiones post. Por otra parte, cálculos usando funciones de onda numéricas ligadas y del continuo extraídos de la referencia [83] también se muestran en la figura. Estas funciones numéricas son solución de la ecuación de Schrödinger del blanco donde un potencial Hartree-Fock-Slater es utilizado para describir la interacción del electrón activo con el blanco residual. Debemos notar que la función de onda ligada que se obtiene de esta forma se encuentra en muy próximo acuerdo con las funciones RHF *five-zeta* (ver Abufager [91]). No se encuentran discrepancias post-prior ya que se utilizan funciones de onda numéricas y el estado final del continuo contiene todos los órdenes del apantallamiento dinámico. Así, las contribuciones de todos los órdenes o de órdenes superiores que el primero del apantallamiento dinámico pueden ser obtenidas por comparación entre las DDCS obtenidos con el modelo CDW-EIS numérico y las previamente mencionadas versiones post del modelo CDW-EIS incluyendo o excluyendo el potencial \tilde{V}_T , respectivamente. Un muy buen acuerdo se obtiene para dispersión hacia adelante entre las DDCS obtenidas numéricamente y aquellas considerando el apantallamiento dinámico a primer orden, mostrando que los órdenes superiores aportan una contribución pequeña. Sin embargo,

ellos juegan un papel importante para dispersión hacia atrás como puede observarse en la figura 2.9. Este comportamiento puede ser parcialmente atribuido al hecho que en la dispersión de retroceso por el blanco (target backscattering) siguiendo una interacción a primer orden del proyectil con el electrón activo, el último debe penetrar profundamente en la nube de electrones pasivos para impactar en el núcleo del blanco y ser emitido en dirección hacia atrás [82]. De manera de poner en evidencia este efecto también incluimos en la figura 2.9 una versión post completa del modelo CDW-EIS seleccionando la función de onda RHF *five-zeta* para describir el estado inicial pero un continuo coulombiano efectivo de carga $\tilde{Z}_T = Z_T$ en el canal final. De esta manera, el segundo paso de la colisión (entre el electrón activo y el núcleo del blanco) se privilegia en la aproximación empleada. Como cabría esperar, estos cálculos convergen a aquellos correspondientes a las funciones de onda numéricas del continuo para grandes ángulos de dispersión, dando evidencia de que en la dispersión hacia atrás dicho segundo paso juega un rol determinante. Sin embargo, gran discrepancia se obtiene en esta región entre predicciones teóricas y datos experimentales para el caso de energía de impacto de 100 keV. Ha sido mostrado que, en contraste con el modelo CDW-EIS, el primer orden de la serie de Born (B1) usando estados ligados y del continuo numéricos (los cuales satisfacen la ecuación de Schrödinger del blanco más completa) da una mejor representación de las DDCS experimentales a grandes ángulos pero una descripción más pobre de ellas para dispersión hacia adelante (ver Gulyàs *et al.* [83], Madison [92]). Por otra parte, si el factor del continuo del proyectil utilizado en el modelo CDW-EIS es reemplazado por uno con una carga dinámica variable se obtiene un elemento de matriz de transición que puede ser escrito como un producto del elemento de matriz de transición B1 por la densidad de estados del continuo del proyectil (ver Salin [37, 93]). Esta elección para la función de onda final del continuo mejora la descripción de las DDCS experimentales para emisión hacia adelante pero se encuentra un comportamiento menos satisfactorio a grandes ángulos (ver Madison [92], Salin [94]). De esta manera, la limitación de la aproximación CDW-EIS en representar las DDCS para grandes ángulos de emisión puede ser posiblemente atribuida a la forma en la que se elige la descripción de dos centros del estado final del continuo.

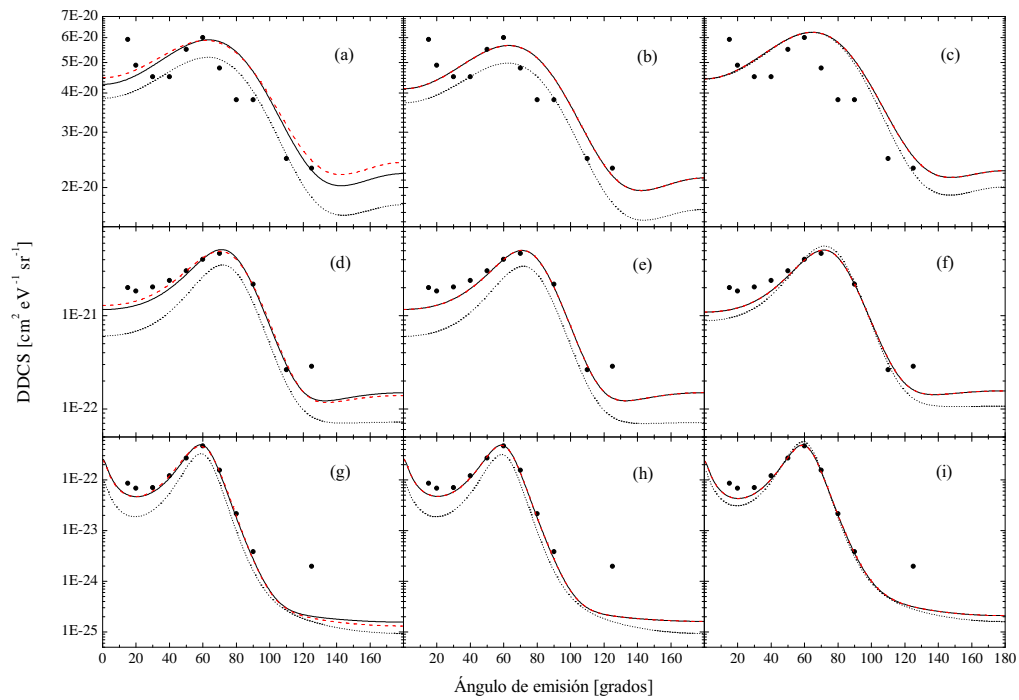


Figura 2.7: Sección eficaz doble diferencial para ionización electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1 MeV como función del ángulo de emisión para energía fija del electrón de 10 eV (figuras a, b, c), 100 eV (figuras d, e, f) y 500 eV (figuras g, h, i). Se utilizaron funciones de onda RHF *single-zeta* (figuras a, d, g) y *five-zeta* (figuras b, c, e, f, h, i) para describir el estado ligado inicial. Fueron consideradas cargas asintóticas (figuras a, b, d, e, g, h) y efectivas (figuras c, f, i) en el continuo del electrón activo en el canal de salida. Teoría: —, cálculos con el modelo CDW-EIS post completo; ·····, cálculos CDW-EIS post; - - - -, cálculos CDW-EIS prior. Experimento: ●, Toburen *et al.* extraído de referencia [89].

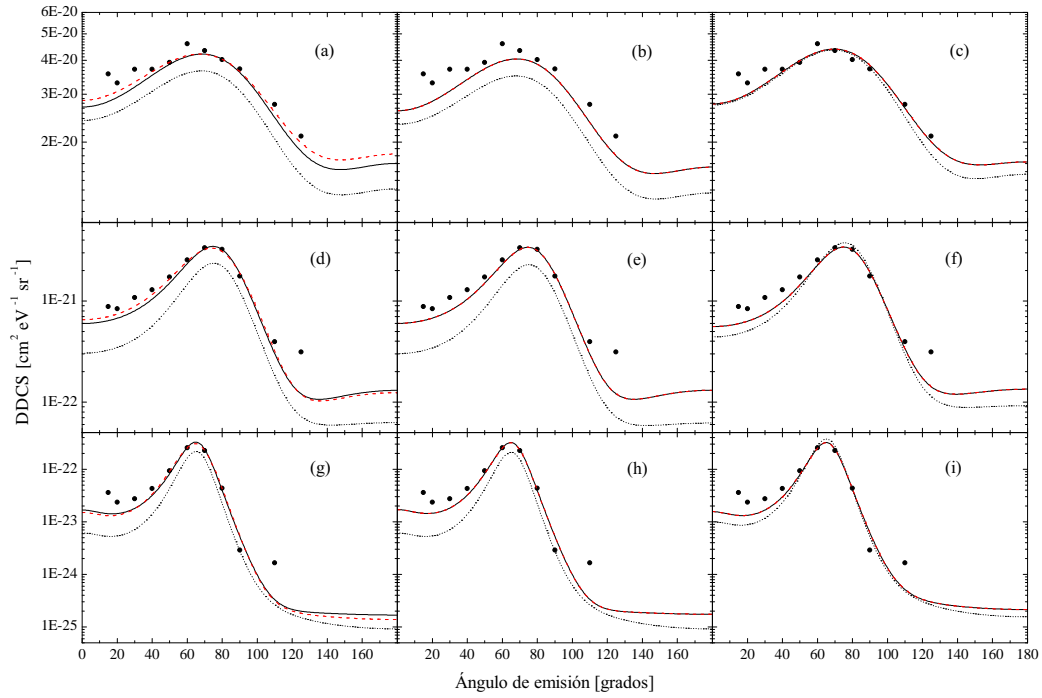


Figura 2.8: Igual a figura 2.7 pero para energía de colisión de 1.5 MeV. Se utilizaron funciones de onda RHF *single-zeta* (figuras 2.a, 2.d, 2.g) y *five-zeta* (figuras b, c, e, f, h, i) para describir el estado ligado inicial. Fueron consideradas cargas asintóticas (figuras a, b, d, e, g, h) y efectivas (figuras c, f, i) en el continuo del electrón activo en el canal de salida. Teoría: —, cálculos con el modelo CDW-EIS post completo; ·····, cálculos CDW-EIS post; - - -, cálculos CDW-EIS prior. Experimento: ●, Toburen *et al.* extraído de referencia [89].

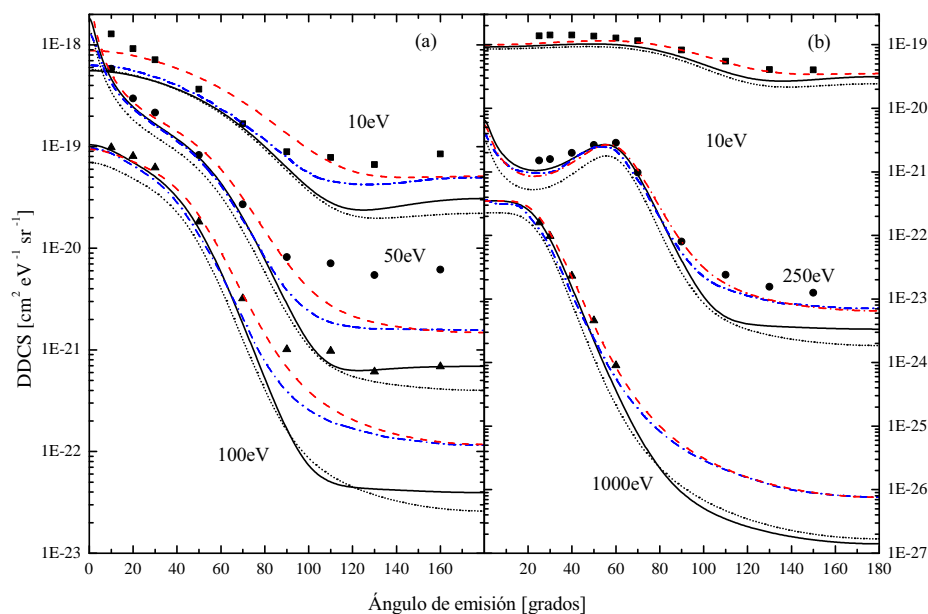


Figura 2.9: Sección eficaz doble diferencial para ionización electrónica en colisiones de H^+ sobre He a energías de colisión de 100 keV (figura a) y 500 keV (figura b) como función del ángulo de emisión para energía fija del electrón. Se utilizaron funciones de onda RHF *five-zeta* para describir el estado ligado inicial. Se consideró una carga asintótica en el continuo del electrón activo en el canal de salida. Teoría: —, cálculos CDW-EIS post completo; ·····, cálculos CDW-EIS post; - - -, cálculos CDW-EIS post completo con $\tilde{Z}_T = 2$; — · —, cálculos CDW-EIS de Gulyàs *et al.* [83]. Experimento: símbolos, Rudd *et al.* extraído de referencia [89].

Secciones eficaces simple diferenciales

En las figuras 2.10, 2.11, 2.12 se muestran resultados de secciones eficaces simple diferenciales (Simply Differential Cross Sections, SDCS) en función de la energía del electrón ionizado para energías de colisión de 300 keV, 1 MeV, y 1.5 MeV, respectivamente, considerando una carga asintótica (figuras (a)) o efectiva (figuras (b)) para el continuo del blanco en el canal final.

Puede observarse en las figuras 2.10.a, 2.11.a y 2.12.a que el efecto del apantallamiento dinámico aún es importante para el caso de secciones eficaces simple diferenciales.

En las figuras 2.10.b, 2.11.b y 2.12.b se observa que considerar una carga efectiva en la versión post *incompleta* para el cálculo de las secciones eficaces simple diferenciales da resultados muy próximos a los que se encuentran considerando la versión post *completa*.

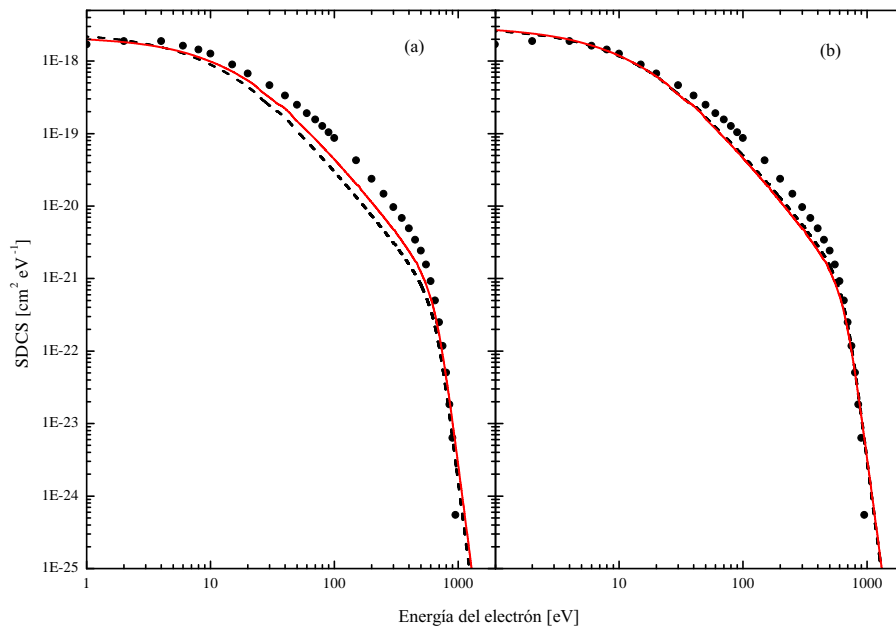


Figura 2.10: Sección eficaz simple diferencial para ionización electrónica en colisiones de H^+ sobre He a energías de colisión de 300 keV en función de la energía del electrón ionizado. Se utilizaron funciones de onda RHF *five-zeta* para describir el estado ligado inicial, considerando una carga asintótica (figura a) o una carga efectiva (figura b) en el continuo del electrón activo en el canal de salida. Teoría: —, cálculos CDW-EIS post completo; - - -, cálculos CDW-EIS post. Experimento: ●, Rudd *et al.* extraído de referencia [89].

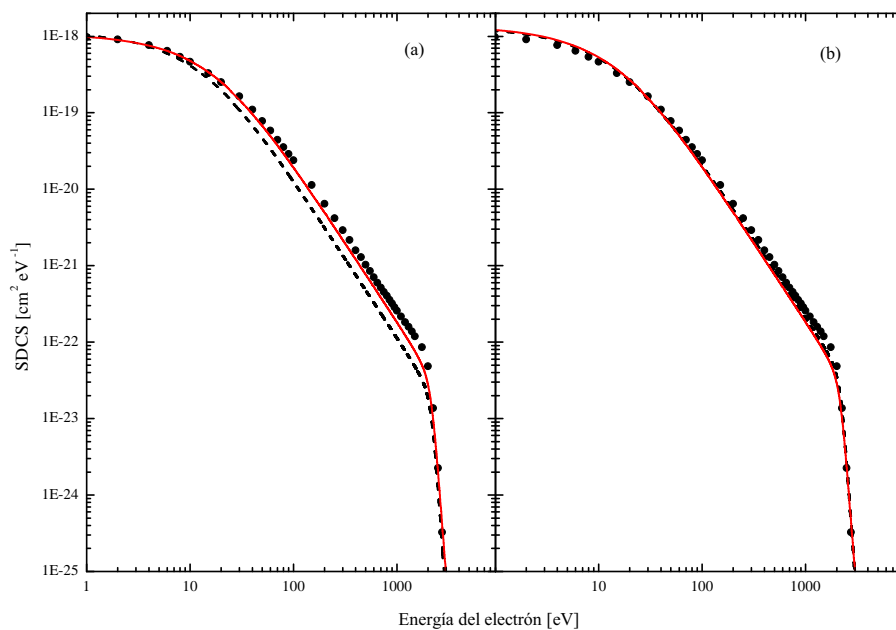


Figura 2.11: Igual a figura 2.10 pero para una energía de colisión de 1 MeV.

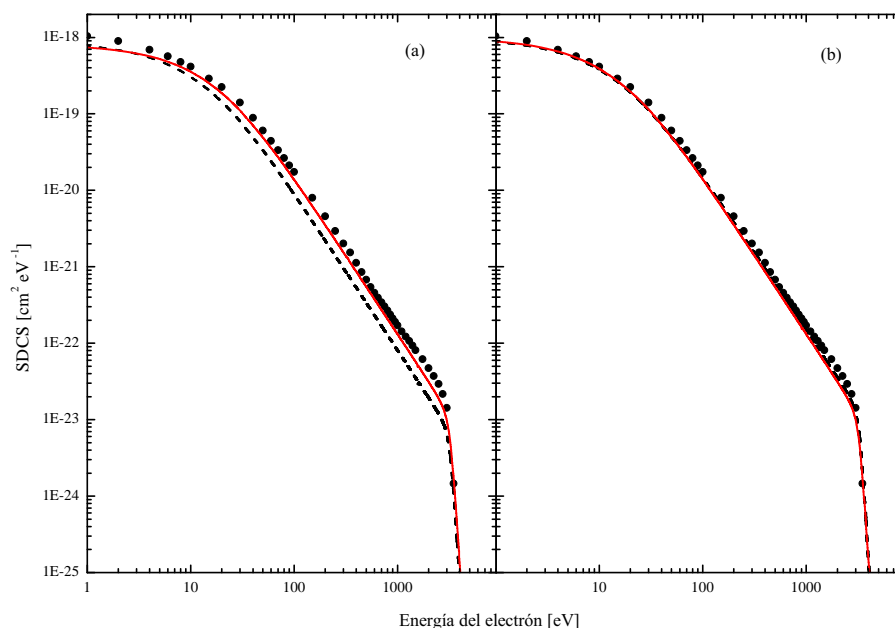


Figura 2.12: Igual a figura 2.10 pero para una energía de colisión de 1.5 MeV.

2.4. Conclusiones

Una versión completa de la forma post de la aproximación CDW-EIS para describir la ionización simple de átomos multielectrónicos por impacto de proyectiles desnudos es considerada mediante la inclusión de las contribuciones del potencial perturbador proveniente de la interacción entre el electrón activo y el blanco residual en el canal final. Como este término afecta la evolución del electrón ionizado, es interpretado como un apantallamiento dinámico del blanco residual que este electrón siente en el canal final. Se analizan las contribuciones de este efecto a primer orden y órdenes superiores. Se muestra que su inclusión tiene una influencia crucial en las DDCS presentadas como función del ángulo de emisión. En tales espectros puede observarse que la inclusión del potencial \tilde{V}_T es esencial hasta para la correcta descripción del pico binario, tanto en los casos en que se considera una carga asintótica Z_t^{as} como en los que se considera una efectiva Z_T^{ef} para la función del continuo del blanco en el canal final. En este último caso se encuentra que la versión post *incompleta* tiende a sobrestimar la altura del pico binario, y la inclusión del potencial \tilde{V}_T corrige tal sobrestimación. Para el caso de secciones simple diferenciales se observa que es aún apreciable la influencia del apantallamiento dinámico cuando se considera una carga asintótica en el continuo del blanco en el canal final, mientras que los resultados que se obtienen con las versiones post completa e incompleta con una carga efectiva resultan muy

próximos. Además, también se muestra que la consideración del apantallamiento dinámico conduce a la desaparición de las conocidas discrepancias post-prior en la aproximación CDW-EIS para blancos atómicos multielectrónicos. La aproximación CDW-EIS aquí presentada está limitada al caso de un electrón activo. Resta para trabajos futuros el análisis de la influencia del apantallamiento dinámico extendido para átomos multielectrónicos más pesados que el helio. Además, el pobre acuerdo con los experimentos para emisión hacia atrás deberá ser también tema de investigaciones futuras.

Capítulo 3

Modelo de onda distorsionada de cuatro cuerpos

3.1. Introducción

La ionización electrónica de blancos atómicos y moleculares por impacto de haces de iones rápidos es asunto de mayor importancia en diferentes disciplinas científicas como Astrofísica y Física de Plasmas así como en áreas aplicadas tales como radioterapia por hadrones y el diseño de reactores de fusión, entre otras. El trabajo que se presenta en este capítulo se enfoca en general en el caso de ionización simple de átomos dielectrónicos en interacción con iones desnudos y particularmente en haces de protones en colisión con átomos de helio. Algunos aspectos fundamentales, como ser la correlación entre los dos electrones que participan en la reacción, son investigados. Esta interdependencia entre los electrones está presente en la preparación del estado inicial y también en la evolución temporal de la reacción, que pueden llamarse *correlación electrónica estática* y *correlación electrónica dinámica*, respectivamente (ver McGuire [95]).

En trabajos previos, esta reacción de cuatro cuerpos fue a menudo descrita usando modelos de tres cuerpos (ver Stolterfoht [82]). Estos modelos fueron obtenidos empleando la aproximación de electrón independiente. La reducción del problema de cuatro cuerpos a uno de tres cuerpos fue por primera vez desarrollado para captura electrónica simple (ver Rivarola *et al.* [80]) y luego para ionización electrónica simple (ver Fainstein *et al.* [63]). En tal reducción, fue necesario considerar al electrón pasivo (el cual queda ligado al blanco residual) como *congelado* (invariante en el tiempo) durante la colisión. A fin de simular la influencia de la correlación dinámica dentro de este modelo de tres cuerpos de electrones independientes, potenciales de tipo coulombianos *efectivos* (ver Fainstein *et al.* [63, 81]) o Hartree-Fock fueron empleados para calcular el estado del continuo del electrón ioni-

zado (ver Gulyàs *et al.* [83]) en el canal de salida. Utilizando la aproximación de onda distorsionada *continuum distorted wave-eikonal initial state* (CDW-EIS) para describir la evolución de la reacción (ver Crothers y McCann [61], Fainstein *et al.* [63, 81], Gulyàs *et al.* [83]), una muy buena representación del espectro experimental diferencial y total fue obtenido para muchos sistemas de colisión. Debe ser mencionado que el uso de funciones de onda del continuo numéricas asociadas con los potenciales Hartree-Fock implica cálculos computacionales de alto consumo de tiempo de cómputo. Otros autores trabajando dentro del modelo de electrones independientes han mejorado la representación de las funciones de onda del continuo de tres cuerpos incluyendo correlación entre el electrón ionizado y los núcleos del blanco y del proyectil (ver Colavecchia *et al.* [96], Ciappina y Cravero [97]). Además, ha sido mostrado que la correlación entre estas tres partículas en el estado inicial afecta la colisión para el caso de proyectiles múltiplemente cargados (ver Ciappina *et al.* [98]).

Aquí proponemos investigar el proceso de cuatro cuerpos de ionización simple por medio de un modelo de cuatro cuerpos. Con este fin en mente, introducimos una nueva aproximación de onda distorsionada de cuatro cuerpos. Investigaciones previas dentro de una aproximación *symmetric eikonal* de cuatro cuerpos fue publicada en estudios de ionización simple y doble en colisiones relativistas entre iones altamente cargados y átomos de helio (ver Voitkiv y Najjari [99], Voitkiv *et al.* [100]). Una revisión completa para este tipo de aproximaciones para colisiones no relativistas es dado en un trabajo reciente de Belkić y otros [101]. En la presente descripción, ambos electrones son distorsionados en pie de igualdad en el canal de entrada por fases eikonales del continuo asociadas con sus interacciones con el proyectil. En el canal de salida, la función de onda de dos electrones es representada por un producto simetrizado de dos funciones, una de ellas describiendo un electrón ligado al blanco residual y la otra describiendo un continuo de dos centros, representado como el producto de una onda plana y dos factores del continuo. Cada uno de estos factores se asocia con las interacciones del electrón ionizado con el proyectil desnudo y con el blanco residual. Además, el factor del continuo correspondiente al campo del blanco residual se elige como aquel correspondiente a la carga neta del blanco residual, describiendo así a la partícula ionizada a grandes distancias (asintóticas) del blanco. Entonces, el electrón ionizado preserva de alguna manera la descripción dada por una aproximación CDW-EIS. La función del electrón ligado en el canal final es distorsionada por una fase eikonal del continuo del proyectil como fue elegida para el canal de entrada. En principio, el electrón

no ionizado puede ser promovido a cualquier estado ligado del blanco residual. La forma en la que este electrón es distorsionado es la misma que la empleada en el modelo *symmetric eikonal* (ver Deco *et al.* [55]) el cual fue usado con éxito para describir procesos de excitación electrónica. Hay que señalar que las funciones de distorsión en los canales de entrada y salida deben verificar correctas condiciones saliente y entrante, respectivamente. En el modelo de cuatro cuerpos, aparecen tres coordenadas independientes: dos de ellas indicando las posiciones de los electrones y una tercera indicando la posición relativa de los agregados de colisión. En una aproximación de parámetro de impacto, el vector que indica la distancia entre los agregados corresponde, para un parámetro de impacto fijo, al tiempo de evolución de la colisión. Así, en nuestro modelo, cada uno de los electrones interactúa simultáneamente con el otro, de manera que su evolución dinámica son interdependientes a todo tiempo durante la colisión. Como consecuencia, la correlación dinámica de dos electrones es incluida en la representación de cuatro cuerpos, inclusive si en el modelo sólo se consideran estados del continuo asintóticos para el electrón ionizado. Esto es completamente diferente de aproximaciones basadas en representaciones de tres cuerpos donde cada electrón activo evoluciona de manera independiente del otro. Cálculos preliminares utilizando este modelo de cuatro cuerpos para impacto de protones sobre He fueron publicados en las actas de una conferencia (ver Monti *et al.* [102]). En tales cálculos cargas efectivas fueron utilizadas para representar la interacción entre el electrón ionizado y el blanco residual mientras que en el estudio presente esta interacción es sólo considerada a separaciones asintóticas para tener en cuenta correctas condiciones de contorno.

Las descripciones teóricas son presentadas en la Sección 3.2, mientras en la Sección 3.3 son analizados los resultados correspondientes a espectros doble diferenciales para distintas energías de colisión en función de la energía de emisión del electrón ionizado a ángulos fijos de emisión y son comparados con predicciones de modelos de tres cuerpos y datos experimentales. Las conclusiones finales son dadas en la Sección 3.4.

3.2. Teoría 4B-DW-EIS

Consideremos el impacto de un ion desnudo rápido de carga Z_P sobre un blanco dielectrónico de carga nuclear Z_T . Describiremos la ionización electrónica simple utilizando la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto. Ambos electrones son considerados como activos durante la colisión.

La reacción es descrita desde un marco de referencia fijo sobre el núcleo del blanco. La ecuación de Schrödinger a ser resuelta se expresa como

$$\begin{aligned} \left(H - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_{\alpha,\beta}^{+,-} = & \left[\sum_{j=1,2} \left(-\frac{1}{2} \nabla_{x_j}^2 - \frac{Z_T}{x_j} - \frac{Z_P}{s_j} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} + \frac{Z_T Z_P}{R} - i \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi_{\alpha,\beta}^{+,-} = 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

donde \vec{x}_j y \vec{s}_j denotan los vectores posición del j -ésimo electrón ($j = 1, 2$) vistos desde los núcleos del blanco y del proyectil, respectivamente, t es el tiempo de colisión, \vec{R} el vector internuclear, y Ψ_{α}^{+} y Ψ_{β}^{-} las soluciones exactas saliente y entrante, respectivamente, las cuales deben verificar correctas condiciones asintóticas:

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha}^{+}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) \underset{t \rightarrow -\infty}{=} & \varphi_{\alpha}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \times \\ & \times \exp \left[i \frac{Z_P (Z_T - 2)}{v} \ln (vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \times \\ & \times \exp (-iE_{\alpha}t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

y

$$\begin{aligned} \Psi_{\beta}^{-}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) \underset{\substack{t \rightarrow +\infty \\ s_1, s_2 \rightarrow \infty}}{=} & \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathcal{P}_{12}) \times \\ & \times \left\{ \varphi_{\beta}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \exp \left[i \frac{Z_P}{p} \ln (ps_1 + \vec{p} \cdot \vec{s}_1) \right] \right\} \times \\ & \times \exp \left[-i \frac{Z_P (Z_T - 1)}{v} \ln (vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \times \\ & \times \exp (-iE_{\beta}t) \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde \vec{v} es la velocidad de impacto, \vec{p} es el momento lineal del electrón ionizado con respecto al proyectil, φ_{α} es la función de onda inicial ligada de dos electrones con energía E_{β} y φ_{β} es una función de dos electrones con energía E_{β} la cual describe un electrón ligado y al otro en un estado del continuo del blanco y \mathcal{P}_{12} es el operador de conmutación de partículas idénticas. En la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto \vec{R} está dado por $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$ con $\vec{\rho}$ el parámetro de impacto. En principio, las funciones φ_{α} y φ_{β} contienen de forma exacta la correlación estática entre los electrones en los canales de entrada y salida, respectivamente.

De acuerdo con estos comportamientos asintóticos, las funciones de onda distorsionada de los canales inicial y final son elegidas como

$$\begin{aligned}\chi_{\alpha}^{+}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = & \varphi_{\alpha}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{L}_{\alpha}^{+}(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \times \\ & \times \exp \left[i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln (vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \times \\ & \times \exp (-iE_{\alpha} t)\end{aligned}\quad (3.4)$$

y

$$\begin{aligned}\chi_{\beta}^{-}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = & \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathcal{P}_{12}) \left[\varphi_{\beta}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{L}_{\beta}^{-}(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \right] \times \\ & \times \exp \left[-i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln (vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \times \\ & \times \exp (-iE_{\beta} t)\end{aligned}\quad (3.5)$$

donde las funciones de distorsión de dos electrones inicial y final, \mathcal{L}_{α}^{+} y \mathcal{L}_{β}^{-} , respectivamente, están dadas por

$$\mathcal{L}_{\alpha}^{+}(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = \prod_{j=1,2} \mathcal{E}_{\alpha}^{+}(\vec{s}_j) = \prod_{j=1,2} \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln (vs_j + \vec{v} \cdot \vec{s}_j) \right] \quad (3.6)$$

y

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{\beta}^{-}(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = & \mathcal{F}_{\beta}^{-}(\vec{s}_1) \mathcal{E}_{\beta}^{-}(\vec{s}_2) = N^{*} \left(\frac{Z_P}{p} \right) {}_1F_1 \left[-i \frac{Z_P}{p}, 1, -i(ps_1 + \vec{p} \cdot \vec{s}_1) \right] \times \\ & \times \exp \left[i \frac{Z_P}{v} \ln (vs_2 - \vec{v} \cdot \vec{s}_2) \right]\end{aligned}\quad (3.7)$$

con $N(a) = \exp(\pi a/2) \Gamma(1 + ia)$ (siendo Γ la función Gamma) el factor de normalización de la función hipergeométrica ${}_1F_1$.

Si las funciones de onda exactas Ψ_{α}^{+} y Ψ_{β}^{-} son reemplazadas por χ_{α}^{+} y χ_{β}^{-} respectivamente (ver ecuaciones (1.160), (1.161) y (1.162), (1.163)), primeros órdenes de las versiones *post* y *prior* de la amplitud de dispersión en función del parámetro de impacto se obtienen dentro del modelo de onda distorsionada de cuatro cuerpos. La versión *prior* puede expresarse en

forma compacta de la forma:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) = & i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp[i(E_\beta - E_\alpha)t] \\
& \int d^3x_1 d^3x_2 \left\{ \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathcal{P}_{12}) \left\{ \left[\varphi_\beta(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{L}_\beta^-(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \right]^* \right\} \right] \times \right. \\
& \times \sum_{\substack{j,k=1,2 \\ j \neq k}} \left[\varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_k) \frac{\nabla_{s_j}^2}{2} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_j) + \right. \\
& \left. \left. + \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_k) \nabla_{x_j} \varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \nabla_{s_j} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_j) \right] \right\} \quad (3.8)
\end{aligned}$$

Llamamos a esta aproximación 4B-DW-EIS de acuerdo al acrónimo de su nombre en inglés *four-Body Distorted Wave-Eikonal Initial State*.

A fin de calcular (3.8) para el estado fundamental de blancos de helio, hemos considerado la función de onda atómica correspondiente al estado ligado inicial de dos electrones como aquella obtenida dentro de la aproximación de Roothaan-Hartree-Fock, la cual emerge como el producto de funciones de un electrón $\phi_\alpha(\vec{x})$, como se encuentra tabulado en la referencia [88]:

$$\varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \phi_\alpha(\vec{x}_1) \phi_\alpha(\vec{x}_2) \quad (3.9)$$

Esta función de onda contiene aproximadamente 98.7% de la correlación estática. La función de onda final de dos electrones φ_β se elige como

$$\begin{aligned}
\varphi_\beta(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = & \phi_\beta^c(\vec{x}_1) \phi_\beta(\vec{x}_2) = \phi_\beta(\vec{x}_2) \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}_1)}{(2\pi)^{3/2}} \times \\
& \times N^* \left(\frac{Z_T - 1}{k} \right) \times \\
& \times {}_1F_1 \left[-i \frac{(Z_T - 1)}{k}, 1, -i(kx_1 + \vec{k} \cdot \vec{x}_1) \right] \quad (3.10)
\end{aligned}$$

donde \vec{k} es el momento del electrón eyectado visto desde el núcleo del blanco. En (3.10), ϕ_β representa un estado hidrogénico correspondiente al blanco residual. Así, la función de onda φ_β describe, en el canal de salida, un electrón que permanece ligado al blanco y un electrón en un estado del continuo del blanco residual a grandes distancias.

Con estas funciones para el canal inicial y final, la amplitud de dispersión puede escribirse

como

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) = i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \sqrt{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[S_{\alpha\beta}^{bound}(\vec{\rho}, t) a_{\alpha\beta}^{ion,-}(\vec{\rho}, t) + S_{\alpha\beta}^{cont}(\vec{\rho}, t) a_{\alpha\beta}^{exc,-}(\vec{\rho}, t) \right] \quad (3.11)$$

donde

$$S_{\alpha\beta}^{bound}(\vec{\rho}, t) = \int d^3x \left[\phi_\beta(\vec{x}) \mathcal{E}_\beta^-(\vec{s}) \right]^* \phi_\alpha(\vec{x}) \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}) \quad (3.12)$$

$$a_{\alpha\beta}^{ion,-}(\vec{\rho}, t) = \int d^3x \exp[i(E_\beta - E_\alpha)t] \left[\phi_\beta^c(\vec{x}) \mathcal{F}_\beta^-(\vec{s}) \right]^* \times \left[\phi_\alpha(\vec{x}) \frac{\nabla_s^2}{2} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}) + \nabla_x \phi_\alpha(\vec{x}) \cdot \nabla_s \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}) \right] \quad (3.13)$$

$$S_{\alpha\beta}^{cont}(\vec{\rho}, t) = \int d^3x \left[\phi_\beta^c(\vec{x}) \mathcal{F}_\beta^-(\vec{s}) \right]^* \phi_\alpha(\vec{x}) \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}) \quad (3.14)$$

$$a_{\alpha\beta}^{exc,-}(\vec{\rho}, t) = \int d^3x \exp[i(E_\beta - E_\alpha)t] \left[\phi_\beta(\vec{x}) \mathcal{E}_\beta^-(\vec{s}) \right]^* \times \left[\phi_\alpha(\vec{x}) \frac{\nabla_s^2}{2} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}) + \nabla_x \phi_\alpha(\vec{x}) \cdot \nabla_s \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}) \right] \quad (3.15)$$

siendo $S_{\alpha\beta}^{bound}(\vec{\rho}, t)$ y $S_{\alpha\beta}^{cont}(\vec{\rho}, t)$ integrales de superposición de un electrón dependientes del tiempo, la primera de ellas correspondiente a un estado final ligado y la segunda a un estado final del continuo. También, en (3.13) y (3.15), $a_{\alpha\beta}^{ion,-}(\vec{\rho}, t)$ y $a_{\alpha\beta}^{exc,-}(\vec{\rho}, t)$ son amplitudes de dispersión de un electrón dependientes del tiempo correspondientes a ionización electrónica y excitación electrónica, respectivamente. Así, (3.11) puede ser interpretada físicamente de la siguiente manera: un electrón es impactado directamente por el proyectil, siendo promovido a un nuevo estado ionizado o excitado pero sintiendo instantáneamente el cambio de estado del otro electrón el cual es promovido a través de un mecanismo de *shake-off* dependiente del tiempo (*shake-off dinámico*). Entonces, cada uno de los electrones evoluciona en cada instante de tiempo dependiendo de la evolución dinámica del otro. La descripción corresponde entonces a una reacción de dos electrones correlacionados.

Una aproximación al modelo 4B-DW-EIS puede obtenerse utilizando las distorsiones

$$\mathcal{L}_\alpha^+(\vec{s}_1, \vec{R}) = \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_1) \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \quad (3.16)$$

y

$$\mathcal{L}_\beta^-(\vec{s}_1, \vec{R}) = \mathcal{F}_\beta^-(\vec{s}_1) \exp \left[i \frac{Z_P}{v} \ln(vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \quad (3.17)$$

en lugar de las dadas por (3.6) y (3.7) respectivamente. Reemplazándolas en (3.8), es posible demostrar que la amplitud de dispersión de dos electrones toma la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) = & i(\rho v)^{2iZ_P(Z_T-1)/v} \sqrt{2} \times \\ & \times \left\{ S_{\alpha\beta}^{bound}(\vec{\rho}) \mathcal{A}_{\alpha\beta}^{ion,-}(\vec{\rho}) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[S_{\alpha\beta}^{cont}(\vec{\rho}, t) \mathcal{A}_{\alpha\beta}^{exc,-}(\vec{\rho}, t) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.18)$$

donde ahora $S_{\alpha\beta}^{cont}(\vec{\rho}, t)$ está dada por (3.14) y

$$S_{\alpha\beta}^{bound}(\vec{\rho}) = \int d^3x [\phi_\beta(\vec{x})]^* \phi_\alpha(\vec{x}) \quad (3.19)$$

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta}^{ion,-}(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt a_{\alpha\beta}^{ion,-}(\vec{\rho}, t) \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\alpha\beta}^{exc,-}(\vec{\rho}, t) = & \int d^3x \exp [i(E_\beta - E_\alpha)t] [\phi_\beta(\vec{x})]^* \times \\ & \times \left(\frac{Z_P}{s} - \frac{Z_P}{R} \right) \phi_\alpha(\vec{x}). \end{aligned} \quad (3.21)$$

La expresión (3.18) está asociada a describir la excitación electrónica dentro de una primera aproximación de Born (first-Born approximation) con correctas condiciones de contorno (aproximación Coulomb Born; CB) y al proceso de ionización dentro del modelo CDW-EIS. Así, elijamos el acrónimo CB-CDW-EIS para denominar este modelo.

Secciones eficaces doble diferenciales para ionización simple, como función de la energía final y ángulo polar del electrón eyectado, pueden ser calculadas mediante la fórmula

$$\frac{d^2\sigma}{dE_k d\Omega_k} = k \int d\vec{\rho} \left| \mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) \right|^2. \quad (3.22)$$

Hemos comprobado numéricamente que, de acuerdo con los resultados obtenidos previamente por Belkić [103] considerando H^- como blanco, el segundo término de la suma en (3.18) puede ser omitido cuando se calculan secciones eficaces doble diferenciales para ionización. De hecho hemos realizado cálculos numéricos, para diferentes condiciones físicas del sistema bajo estudio, confirmando que este segundo término otorga contribuciones

varios órdenes de magnitud menores que el primero. Esto quiere decir que, para este caso, el proceso mediante el cual un electrón es ionizado a través de un mecanismo de shake-off dinámico mientras que el otro resulta excitado por impacto directo del proyectil otorga una contribución despreciable. Por consiguiente, el correspondiente término en (3.18) ha sido omitido en los cálculos, de manera que la evolución de ambos resulta desacoplada. Así, los electrones evolucionan independientemente y la correlación electrónica dinámica no está incluida. En esta aproximación se obtiene entonces que un electrón es ionizado por interacción directa con el proyectil, mientras el otro es excitado mediante un mecanismo de shake-off estático. Por otra parte, hemos encontrado también numéricamente que el segundo término en la amplitud de dispersión dada por (3.11), correspondiente a la aproximación 4B-DW-EIS, presenta el mismo comportamiento cuantitativo que el correspondiente a la aproximación CB-CDW-EIS y así también ha sido omitido en nuestros cálculos. De todas maneras, en la aproximación 4B-DW-EIS la evolución de los electrones resulta correlacionada dinámicamente. Consecuentemente, la influencia de la correlación electrónica dinámica puede ser analizada comparando los resultados correspondientes a las aproximaciones 4B-DW-EIS y CB-CDW-EIS.

Como se ha mencionado anteriormente, resulta conveniente calcular las secciones eficaces doble diferenciales en función de la amplitud de dispersión en función del momento transferido transversal $\mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta})$. La amplitud de dispersión en función del parámetro de impacto se relaciona con la amplitud de transición en función del momento transferido transversal mediante la transformada de Fourier bidimensional

$$\mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta}) = \frac{1}{2\pi} \int d^2\vec{\rho} \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}) \mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) \quad (3.23)$$

y utilizando la identidad de Parseval, obtenemos las secciones eficaces doble diferenciales como función de la energía del electrón ionizado (E_k) y el ángulo de ionización

$$\frac{d^2\sigma}{dE_k d\Omega_k} = k \int d^2\vec{\rho} \left| \mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) \right|^2 = k \int d^2\vec{\eta} \left| \mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta}) \right|^2. \quad (3.24)$$

Haciendo esto obtenemos:

$$\mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta}) = \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^5 b_i b_j \mathcal{R}_{\alpha\beta,ij}^-(\vec{\eta}) \quad (3.25)$$

donde

$$\mathcal{R}_{\alpha\beta,ij}^-(\vec{\eta}) = i \frac{4\pi^2}{v} (\rho v)^{2i} Z_F Z_T / v \sqrt{2} \int d^3 k_2 \mathcal{F}_{ij}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) \Big|_{\vec{q}_{1,2} = -\vec{k}_{1,2}}, \quad (3.26)$$

con $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = -\vec{\eta} - (\Delta E/v)\hat{v}$, $\Delta E = E_\beta - E_\alpha$. La función \mathcal{F}_{ij} está definida por

$$\mathcal{F}_{ij}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) = A_{1i}(\vec{k}_2) A_2(\vec{q}_2) \left[B_{11j}(\vec{k}_1) B_{12}(\vec{q}_1) + \vec{B}_{21j}(\vec{k}_1) \cdot \vec{B}_{22}(\vec{q}_1) \right] \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} A_{1i}(\vec{k}_2) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 x_2 \exp(-i \vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2) \phi_\beta^*(\vec{x}_2) \phi_\alpha(\vec{x}_2) \\ &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/2} (Z_i Z_T)^{3/2} \frac{Z_i + Z_T}{[(Z_i + Z_T)^2 + k_2^2]^2} \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} A_2(\vec{q}_2 = -\vec{k}_2) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 s_2 \exp(-i \vec{q}_2 \cdot \vec{s}_2) \mathcal{E}_\beta^-(\vec{s}_2) \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_2) \\ &= 2\sqrt{2\pi} (2v)^{-2i\nu} \frac{\Gamma(1-i\nu)}{\Gamma(i\nu)} \eta_2^{-2(1+i\nu)} \delta(k_{2z}) \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} B_{11j}(\vec{k}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 x_1 \exp(-i \vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1) \frac{\exp(-i \vec{k} \cdot \vec{x}_1)}{(2\pi)^{3/2}} \phi_{cont}^*(\vec{x}_1) \phi_\alpha(\vec{x}_1) \\ &= \frac{Z_j^{3/2}}{2\pi^{5/2}} N(\lambda) \frac{A_{kj}^{-(1+i\lambda)}}{\alpha_j^2} [Z_j A_{kj} - i\lambda B_{kj}] \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} B_{12}(\vec{q}_1 = -\vec{k}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 s_1 \exp(-i \vec{q}_1 \cdot \vec{s}_1) \mathcal{F}_\beta^-(\vec{s}_1) \frac{\nabla_{s_1}^2}{2} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_1) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} (-v\nu^2) N(\xi) \frac{N(\nu-1)}{\alpha} A_p^{-i\xi} U_v^{-(1+i\nu)} \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \vec{B}_{21j}(\vec{k}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 x_1 \exp(-i \vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1) \frac{\exp(-i \vec{k} \cdot \vec{x}_1)}{(2\pi)^{3/2}} \phi_{cont}^*(\vec{x}_1) \vec{\nabla}_{x_1} \phi_\alpha(\vec{x}_1) \\ &= \frac{-i Z_j^{5/2}}{\pi^{5/2}} N(\lambda) \frac{A_{kj}^{1+i\lambda}}{\alpha_j^2} \left[i\lambda \vec{k} - (A_{kj} - i\lambda A_{kj} + i\lambda) \right] \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned}\vec{B}_{22}(\vec{q}_1 = -\vec{k}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 s_1 \exp(-i \vec{q}_1 \cdot \vec{s}_1) \mathcal{F}_\beta^{-*}(\vec{s}_1) \vec{\nabla}_{s_1} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_1) \\ &= 2i \sqrt{\frac{2}{\pi}} \nu N(\xi) \frac{N(\nu)}{\alpha^2} A_p^{-i\xi} U_v^{-(1+i\nu)} \left[J_1 \vec{v} + J_2 \vec{p} + J_3 \vec{k}_1 \right]\end{aligned}\quad (3.33)$$

$$J_1 = \frac{i\xi p}{A_p} F^+(x) \quad (3.34)$$

$$J_2 = \frac{-i\xi v}{A_p} F^+(x) \quad (3.35)$$

$$J_3 = \frac{-i\xi v U_{pv}}{U_v A_p} F^+(x) - v F(x), \quad (3.36)$$

donde

$$\alpha_j = |\vec{k}_1 + \vec{k}|^2 + Z_j \quad (3.37)$$

$$A_{kj} = 1 - U_{kj} \quad (3.38)$$

$$B_{kj} = 2 [ik + Z_j U_{kj}] \quad (3.39)$$

$$U_{kj} = \frac{-2}{\alpha_j} \left[\vec{k} \cdot (\vec{k}_1 + \vec{k}) + i Z_j k \right] \quad (3.40)$$

$$\alpha = k_1^2 \quad (3.41)$$

$$A_p = 1 + U_p \quad (3.42)$$

$$U_p = \frac{2}{\alpha} \vec{p} \cdot \vec{k}_1 \quad (3.43)$$

$$U_v = \frac{2}{\alpha} \vec{v} \cdot \vec{k}_1 \quad (3.44)$$

$$U_{pv} = \frac{2}{\alpha} (pv - \vec{p} \cdot \vec{v}) \quad (3.45)$$

$$x = 1 - \frac{U_v - U_{pv}}{U_v A_p} \quad (3.46)$$

$$F(x) = {}_2F_1(i\nu, i\xi, 1, x) \quad (3.47)$$

$$F(x)^+ = {}_2F_1(1 + i\nu, 1 + i\xi, 2, x). \quad (3.48)$$

La amplitud de dispersión $\mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta})$ en el modelo CB-CDW-EIS

En el modelo CB-CDW-EIS el término $A_2(\vec{q}_2)$ (ver ecuación (3.29)) resulta

$$\begin{aligned} A_2(\vec{q}_2 = -\vec{k}_2) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \mathcal{E}_\beta^{-*}(-\vec{R}) \mathcal{E}_\alpha^+(-\vec{R}) \int d^3 s_2 \exp(-i \vec{q}_2 \cdot \vec{s}_2) \\ &= (2\pi)^{3/2} (\rho v)^{-i2\nu} \delta(\vec{k}_2) \end{aligned} \quad (3.49)$$

mientras que los demás términos permanecen sin modificaciones. De esta manera la ecuación 3.26 en esta aproximación resulta

$$\mathcal{R}_{\alpha\beta,ij}^-(\vec{\eta}) = i \frac{4\pi^2}{v} (\rho v)^{2i Z_P Z_T / v} \sqrt{2} \mathcal{F}_{ij}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) \Big|_{\vec{k}_2=0; \vec{q}_1=-\vec{k}_1} \quad (3.50)$$

con $\vec{K} = \vec{k}_1$, es decir, en esta aproximación todo el momento es transferido al electrón a ser ionizado. En esta aproximación los electrones evolucionan de forma independiente el uno del otro y por lo tanto la correlación electrónica no está incluida.

3.3. Resultados

A continuación se presentan los resultados para secciones eficaces doble diferenciales en función de la energía y ángulo del electrón emitido.

3.3.1. Secciones eficaces doble diferenciales en función de la energía del electrón

Secciones eficaces doble diferenciales (double differential cross sections, DDCS) obtenidas utilizando los modelos 4B-DW-EIS y CB-CDW-EIS se muestran en las figuras 3.1 a 3.3 para impacto de protones sobre átomos de helio para energías de colisión de 1 MeV, 1.5 MeV y 4.2 MeV, respectivamente. Existe cierta incerteza en la determinación de los valores absolutos de las DDCS en el modelo 4B-DW-EIS producida por una singularidad en el integrando la cual no afecta el perfil de las integrales (de las DDCS). Como hemos verificado numéricamente que los valores para las DDCS obtenidos con el modelo 4B-DW-EIS sobrestiman a aquellos correspondientes al modelo CB-CDW-EIS dentro de esta incerteza (para emisión hacia adelante a bajas energías de emisión) hemos normalizado los resultados del modelo 4B-DW-EIS a los del modelo CB-CDW-EIS a 1 eV de energía del electrón eyectado. Así, la comparación entre ambos modelos otorga una cota inferior para

la contribución de la correlación electrónica dinámica. Los resultados son presentados en función de la energía del electrón eyectado para ángulos de emisión fijos. Hemos también notado que la elección de diferentes aproximaciones para la función de onda inicial no afecta esencialmente las DDCS calculadas tanto con el modelo 4B-DW-EIS como con el CB-CDW-EIS. Este hecho modifica nuestras conclusiones preliminares en [102], ya que ahora hemos mejorado el método de integración numérica. Se encuentra un buen acuerdo de ambos modelos con los datos experimentales [89, 90, 104]. Debemos remarcar que en los cálculos solo se considera como posible estado final el $\text{He}^+(1s)$, el cual resulta el canal dominante para la reacción de ionización estudiada. Además, el acuerdo entre las DDCS del modelo 4B-DW-EIS y las correspondientes mediciones para emisión hacia adelante es muy buena, excepto para el caso de energía de impacto de 4.2 MeV para energía del electrón menores que 10 eV para las cuales pueden contribuir procesos de autoionización Auger. Para ángulos de emisión hacia atrás se encuentran algunas discrepancias para altas energías del electrón. Se muestran también resultados de tres cuerpos obtenidos con la versión *post* de la aproximación CDW-EIS (considerando una carga efectiva en el continuo del blanco residual, sin considerar la influencia del apantallamiento dinámico). Estos son calculados eligiendo un continuo asintótico para la interacción del electrón ionizado con el blanco residual, *i.e.* correspondiente al caso que el electrón emitido evoluciona en un campo coulombiano de carga neta igual a 1, como es necesario para satisfacer correctas condiciones asintóticas y como ha sido elegido en los cálculos con los modelos 4B-DW-EIS y CB-CDW-EIS. Hemos verificado numéricamente que nuestros resultados con el modelo CB-CDW-EIS son muy próximos a aquellos que se encuentran con la versión *prior* del modelo CDW-EIS de tres cuerpos. Esto sucede ya que, como ha sido indicado previamente, el segundo término en (3.18) otorga contribuciones despreciables a las DDCS y ambos modelos difieren sólo en la variación de la energía ($\Delta E = E_\beta - E_\alpha$) y en el valor de la integral de solapamiento entre el estado inicial y final del electrón ligado. En el modelo CB-CDW-EIS se considera la variación total de energía del sistema atómico mientras que en el modelo CDW-EIS se considera la diferencia entre las energías orbitales de un electrón activo. Ambas variaciones de energía son bastante próximas cuando el electrón no ionizado puebla un estado $\text{He}^+(1s)$, el cual es el dominante en las DDCS.

También para este caso, el factor de shake-off postcolisional $S_{\alpha\beta}^{bound}$ es muy próximo a la unidad ($S_{\alpha\beta}^{bound} \simeq 0.99$). Así, la diferencia entre los resultados obtenidos con la versión *post* del modelo CDW-EIS y con el modelo CB-CDW-EIS puede ser atribuida a las discrepan-

cias post-prior analizadas en el capítulo 2, como fue previamente observado por Ciappina y colaboradores [105] (ver también [84, 85]).

A fin de estudiar el rol jugado por la correlación electrónica dinámica, las DDCS se presentan en las figuras 3.4 y 3.5 para colisiones de protones sobre He a distintas energías de impacto. La separación entre las DDCS de los modelos 4B-DW-EIS y CB-CDW-EIS (esencialmente la separación entre los perfiles de las curvas) parece ser más importante en la emisión hacia adelante y algunos casos correspondientes a esta situación son considerados para las tres energías de colisión.

En las figuras 3.4.a y 3.4.b, los resultados 4B-DW-EIS y CB-CDW-EIS son comparados con datos experimentales para una energía de impacto de 1.5 MeV para ángulos fijos de emisión de 0° y 40° , respectivamente. El modelo 4B-DW-EIS parece dar una mejor representación de los perfiles de las mediciones difiriendo de los del modelo CB-CDW-EIS a lo sumo en un 23 %, considerando que 4B-DW-EIS está normalizado a CB-CDW-EIS a energía del electrón emitido de 1 eV. En las figuras 3.5.a y 3.5.b, resultados 4B-DW-EIS y CB-CDW-EIS son comparados con datos experimentales correspondientes a energías de colisión de 1 MeV y 4.2 MeV para ángulos de emisión de 20° y 22.5° , respectivamente. Ambos modelos subestiman las mediciones para el caso de 20° . El origen de este comportamiento no es del todo bien comprendido considerando el buen acuerdo teórico-experimental para los otros casos considerados. Cálculos de tres cuerpos utilizando una aproximación Hartree-Fock-Slater numérica para describir el estado del electrón activo en el continuo del blanco residual [83] son también incluidos en las figuras 3.4.a y 3.5.a. Para el caso de 4.2 MeV, los experimentos presentan gran dispersión y escasas mediciones en la región del pico de encuentro binario y por lo tanto no pueden extraerse conclusiones de la comparación teórico-experimental. Sin embargo, es importante notar que las predicciones utilizando ambas aproximaciones teóricas difieren entre si en un porcentaje que varía entre 23 % and 55 %. Así, de acuerdo con los resultados aquí obtenidos podemos concluir que la correlación electrónica dinámica para algunas condiciones cinemáticas puede contribuir porcentaje importante.

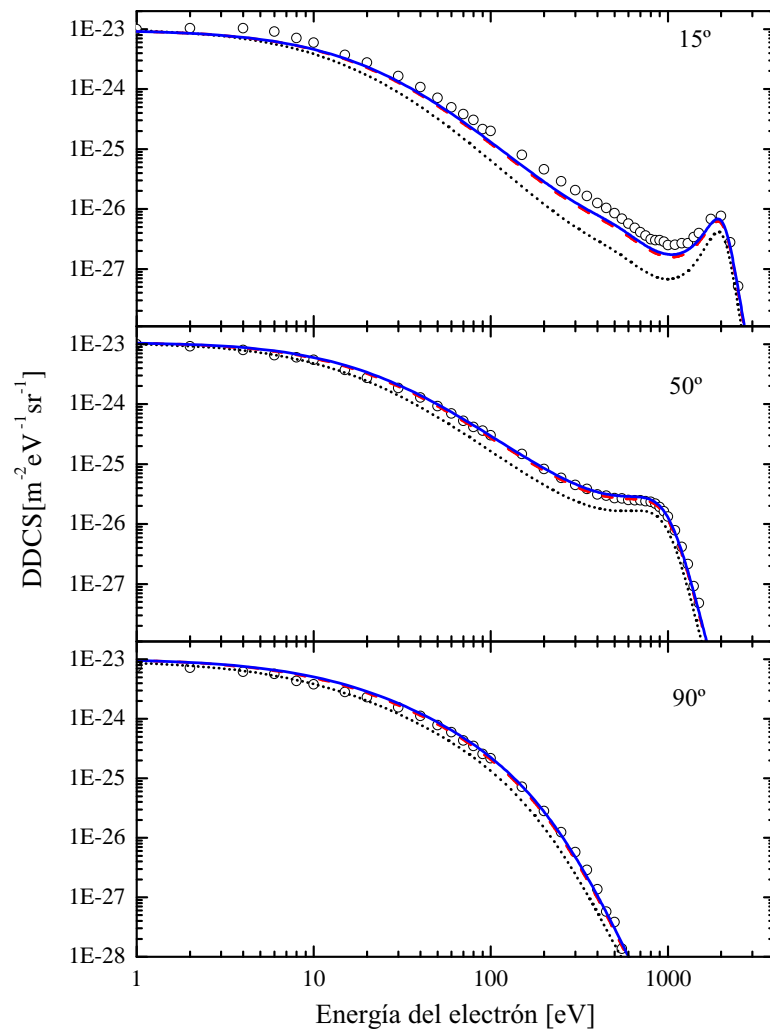


Figura 3.1: Secciones eficaces doble diferenciales para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1 MeV como función de la energía del electrón ionizado para ángulos fijos de emisión de 15° , 50° y 90° . Teoría: —, actual modelo 4B-DW-EIS; - - -, cálculos CB-CDW-EIS actuales; ·····, cálculos *post* CDW-EIS actuales [63]. Experimentos: \circ , Toburen *et al.* extraídos de referencia [89].

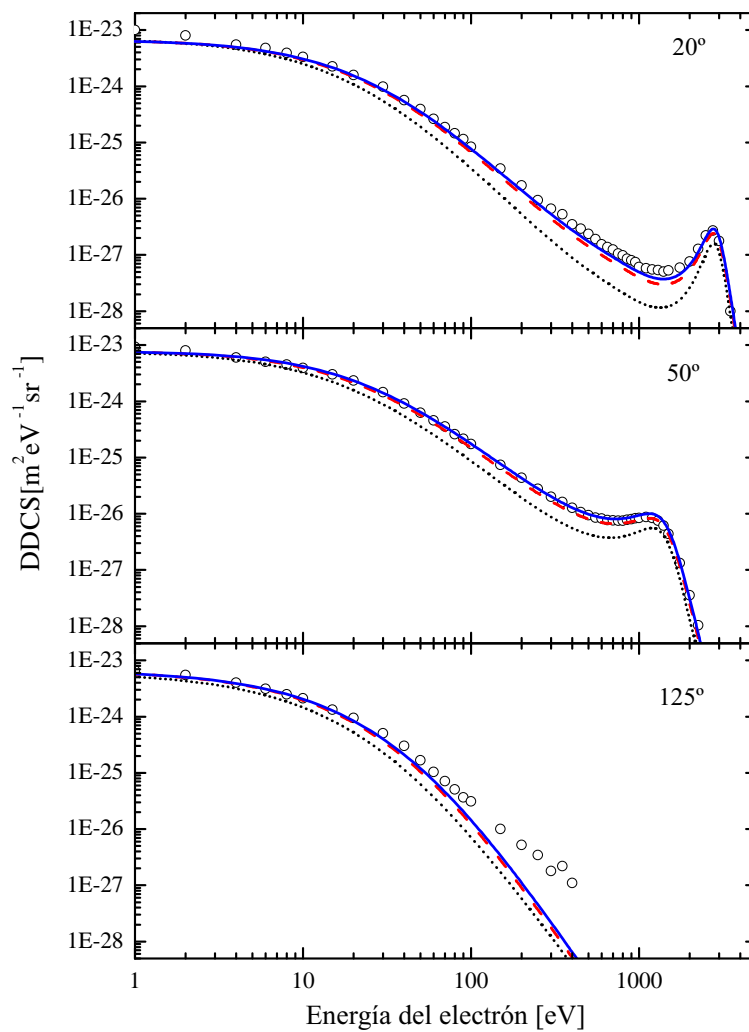


Figura 3.2: Secciones eficaces doble diferenciales para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1.5 MeV como función de la energía del electrón ionizado para ángulos fijos de emisión de 20° , 50° y 125° . Teoría: —, actual modelo 4B-DW-EIS; - - -, cálculos actuales CB-CDW-EIS; ·····, cálculos actuales *post* CDW-EIS [63]. Experimentos: \circ , Toburen *et al.* extraídos de referencia [89].

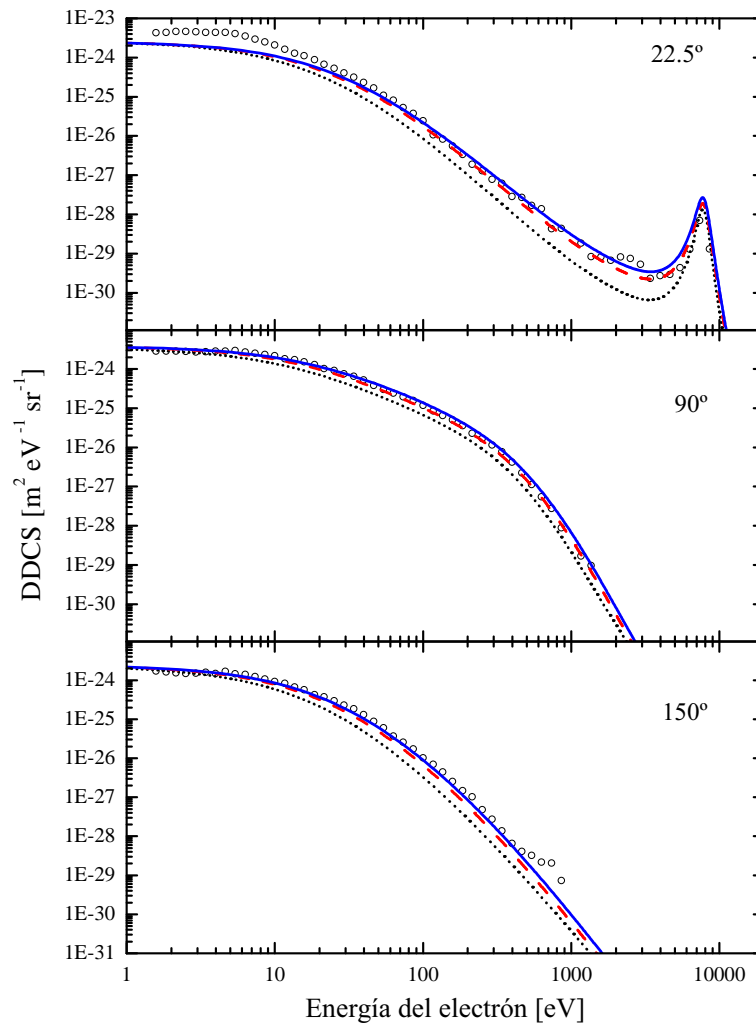


Figura 3.3: Secciones eficaces doble diferenciales para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 4.2 MeV como función de la energía del electrón ionizado para ángulos fijos de emisión de 22.5° , 90° y 150° . Teoría: —, actual modelo 4B-DW-EIS; - - -, cálculos actuales CB-CDW-EIS; ·····, cálculos actuales *post* CDW-EIS [63]. Experimentos: \circ , Stolterfoht *et al.* extraídos de [89].

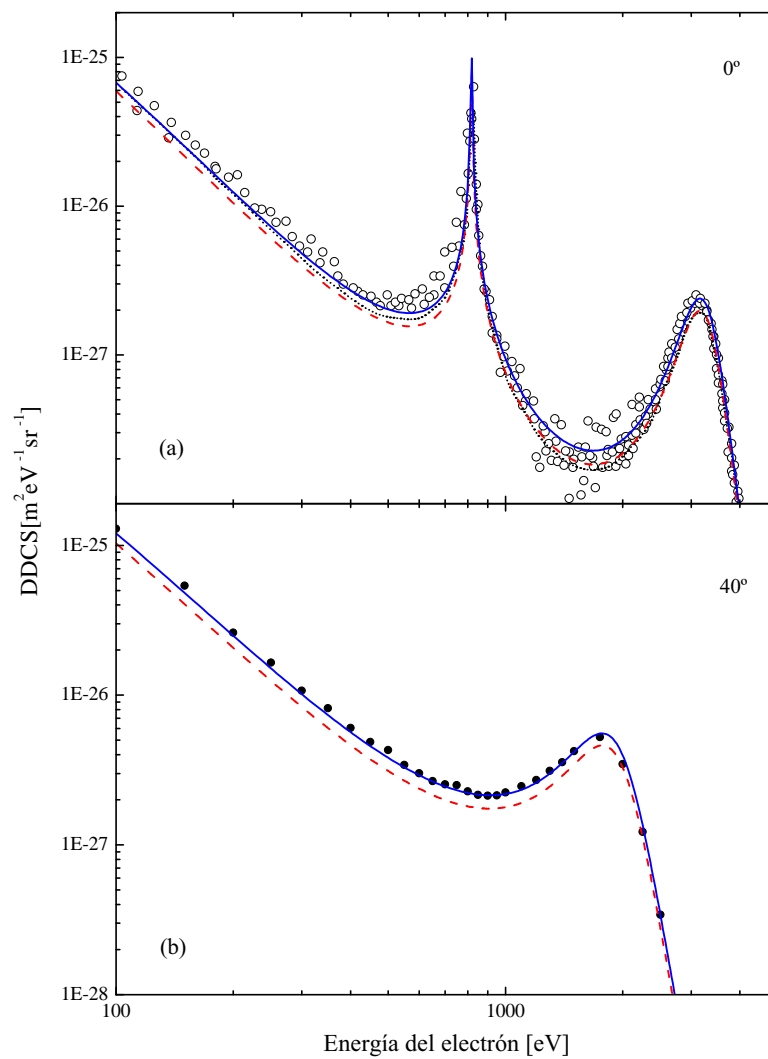


Figura 3.4: Secciones eficaces doble diferenciales para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1.5 MeV como función de la energía del electrón ionizado para ángulos fijos de emisión de 0° (a) y 40° (b). Teoría: —, actual modelo 4B-DW-EIS; - - -, cálculos actuales CB-CDW-EIS; ·····, cálculos post CDW-EIS [83]. Experimentos: \circ , Lee *et al.* [90]; \bullet , Toburen *et al.* extraídos de [89].

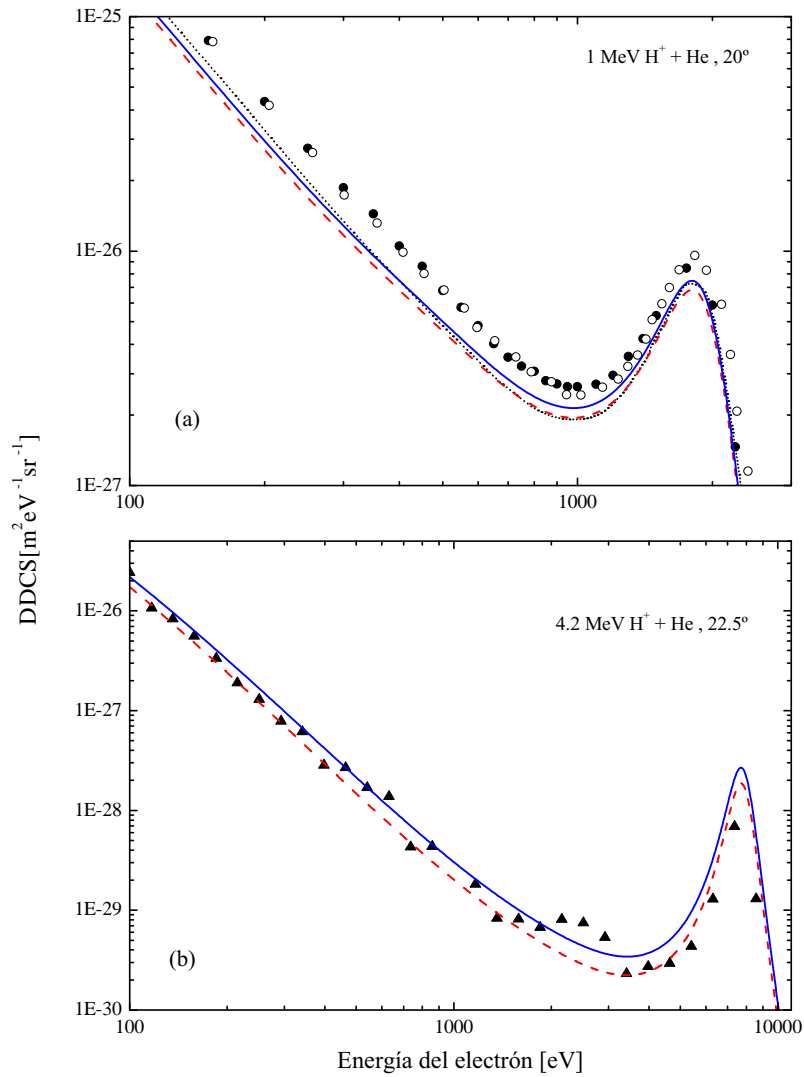


Figura 3.5: Secciones eficaces doble diferenciales para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1 MeV (a) y 4.2 MeV (b) como función de la energía del electrón ionizado para ángulos fijos de emisión de 20° y 22.5° , respectivamente. Teoría: —, actual modelo 4B-DW-EIS; - - -, cálculos actuales CB-CDW-EIS; ·····, cálculos post CDW-EIS [83]. Experimentos: \circ , Pedersen *et al.* [104]; \bullet , Toburen *et al.* extraídos de [89]; \blacktriangle , Stolterfoht *et al.* extraídos de [89].

3.3.2. Secciones eficaces doble diferenciales en función del ángulo de emisión

En las figuras 3.6 a 3.8 se muestran secciones eficaces doble diferenciales para impacto de protones sobre átomos de helio para energías de colisión de 1 MeV, 1.5 MeV y 4.2 MeV, respectivamente, en función del ángulo de emisión para energía fija del electrón ionizado. Se obtienen conclusiones similares a aquellas correspondientes al caso de secciones eficaces

en función de la energía del electrón ionizado. Puede observarse que la contribución de la correlación dinámica parece más importante en la emisión hacia adelante y hacia atrás.

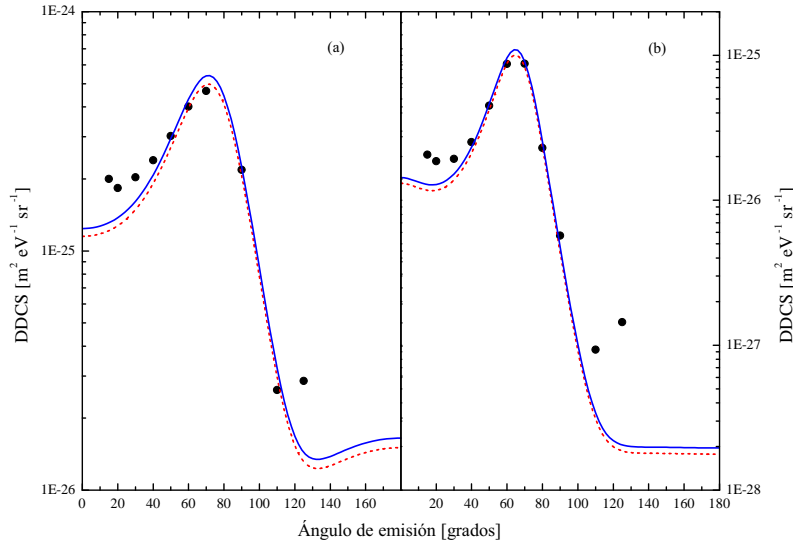


Figura 3.6: Secciones eficaces doble diferenciales para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1 MeV como función de ángulo de emisión para una energía fija del electrón ionizado de 100 eV (figura (a)) y 300 eV (figura (b)). Teoría: —, actual modelo 4B-DW-EIS; - - - - -, cálculos actuales CB-CDW-EIS. Experimentos: ●, Toburen *et al.* extraídos de [89].

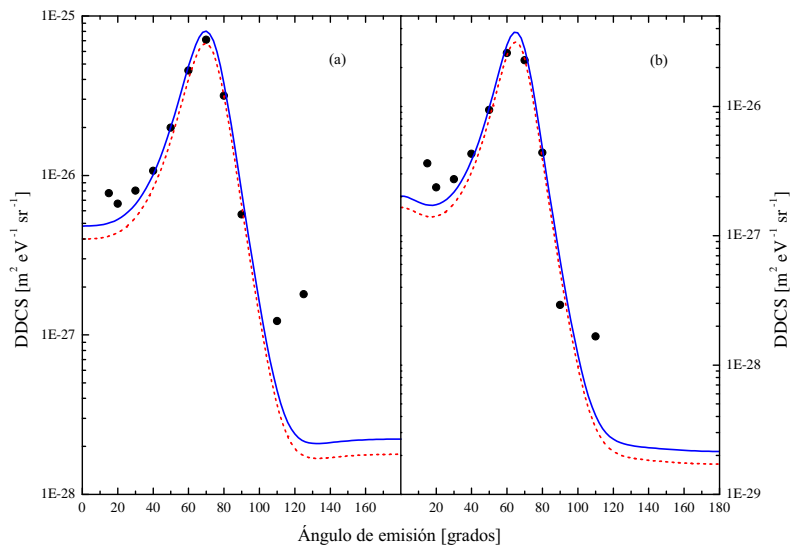


Figura 3.7: Secciones eficaces doble diferenciales para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 1.5 MeV como función de ángulo de emisión para una energía fija del electrón ionizado de 300 eV (figura (a)) y 500 eV (figura (b)). Teoría: —, actual modelo 4B-DW-EIS; - - - - -, cálculos actuales CB-CDW-EIS. Experimentos: ●, Toburen *et al.* extraídos de [89].

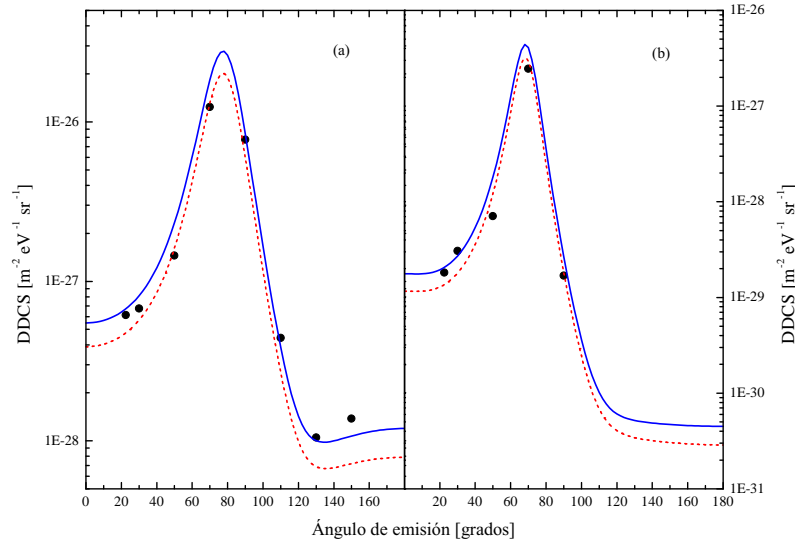


Figura 3.8: Secciones eficaces doble diferenciales para emisión electrónica en colisiones de H^+ sobre He a una energía de colisión de 4.2 MeV como función de ángulo de emisión para una energía fija del electrón ionizado de 341 eV (figura (a)) y 1166 eV (figura (b)). Teoría: —, actual modelo 4B-DW-EIS; ·····, cálculos actuales CB-CDW-EIS. Experimentos: ●, Toburen *et al.* extraídos de [89].

3.4. Conclusiones

Un modelo de onda distorsionada de cuatro cuerpos ha sido introducido para describir la ionización de blancos diatómicos por impacto de iones. Ambos electrones son considerados como activos y distorsionados por el campo del proyectil en el canal de entrada y de salida mediante el uso de funciones de onda de dos centros (proyectil y blanco). Se utilizan funciones de onda inicial y final asintóticas de dos electrones las cuales verifican correctas condiciones asintóticas. Los cálculos muestran una representación apropiada de las secciones eficaces experimentales para colisiones protón-helio correspondientes a diferentes orientaciones y energías del electrón emitido.

El rol de la correlación dinámica en las DDCS es investigado por comparación con resultados obtenidos con un modelo de cuatro cuerpos que no incluye la correlación dinámica. La correlación electrónica dinámica es incluida en el modelo a través dos diferentes mecanismos: uno de los electrones es ionizado o excitado por la interacción con el proyectil mientras el otro es instantáneamente excitado o ionizado de acuerdo con un mecanismo de *shake-off dinámico*, respectivamente. Así, la evolución de cada electrón resulta interdependiente a cada instante de la evolución del otro durante toda el proceso de colisión.

Como posible investigación a futuro se propone el estudio de procesos donde se produzca

la excitación del electrón no ionizado a estados $\text{He}^+(nlm)$ (con número cuántico principal $n > 1$), tal proceso puede ser crucial para explicar secciones eficaces diferenciales como función de la transferencia de momento transversal. Tal es el caso del impacto de Au^{53+} sobre He a una energía de colisión de 3.6 MeV (ver Moshhammer *et al.* de 2001 [106]), donde una adecuada descripción de la interferencia entre los dos mecanismos descritos más arriba parece ser esencial. Claro es que este efecto no puede ser descrito por aproximaciones de tres cuerpos. Más aún, nuestro modelo podría ser adaptado para considerar el impacto de iones múltiplemente cargados mediante la adecuada modificación de las funciones de distorsión en el canal de entrada, como ha sido realizado en aproximaciones de onda distorsionada de tres cuerpos (ver Gulyàs y Fainstein [52] y Ciappina *et al.* [98]).

Parte III

Proyectiles parcialmente vestidos

Capítulo 4

Ionización simple de átomos de He por proyectiles vestidos e interferencias cuánticas

4.1. Introducción

Desde la década del 90 gran progreso se ha realizado en la comprensión de la emisión electrónica en colisiones rápidas ión-átomo (ver Stolterfoht *et al.* [82], Rivarola y Fainstein [107]). Muchos experimentos fueron realizados utilizando espectroscopía convencional de emisión electrónica y la más reciente *Cold Target Momentum Spectroscopy* (ver Dorner *et al.* [108]). A fin de estudiar en detalle la dinámica del proceso el He es el blanco favorecido mientras que la carga del proyectil ha variado desde antiprotones hasta iones desnudos de U. Secciones eficaces diferenciales como función del ángulo de emisión, energía del electrón y/o transferencia de momento transversal han sido medidas. Explicar esta abundancia de resultados experimentales ha sido un gran reto para las teorías existentes. Durante muchos años la aproximación Continuum Distorted Wave - Eikonal Initial State (CDW-EIS) (ver Fainstein *et al.* [81]) ha sido un método confiable para calcular secciones eficaces totales y diferenciales para cualquier combinación proyectil/blanco desde energías de impacto intermedias hasta altas (no relativistas).

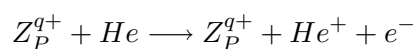
Existen, sin embargo, algunos resultados experimentales para los cuales no existe actualmente teoría alguna que pueda describirlos completamente. En una serie de experimentos el grupo de P. Richard [109] ha estudiado en gran detalle el comportamiento del pico de encuentro binario en ionización electrónica de He producida por impacto de iones rápidos F^{q+} ($q = 3, \dots, 9$). Estos experimentos mostraron que, contrariamente a las expectativas, la magnitud del pico crecía a medida que el estado del carga del proyectil decrecía. Si-

guiendo este descubrimiento el grupo de H. Schmidt-Böcking [110] midió el espectro de emisión electrónica como función de la energía y ángulo del electrón en la zona del encuentro binario para colisiones de iones U^{21+} sobre He a una energía de colisión de 1 MeV/u. Ellos encontraron estructuras de interferencia superpuestas en el pico y, en mediciones con otros iones vestidos, también un comportamiento anormal en la altura del pico a medida que la carga del proyectil crecía [112]. Más recientemente R. Moshhammer y colaboradores en Heidelberg [106] midieron el espectro como función de la energía del electrón y de la transferencia de momento transversal en colisiones de Au^{53+} sobre He a una energía de colisión de 3.6 MeV/u. Estos datos muestran dos picos, a pequeña y gran transferencia de momento respectivamente, siendo el segundo el pico de encuentro binario. Cálculos con los modelos CDW-EIS más desarrollados no han sido capaces de explicar estos resultados en todo el rango de transferencia de momento. Sin embargo, ha emergido de diferentes estudios que el potencial internuclear juega un rol importante y que las secciones eficaces son altamente dependientes del potencial del proyectil (ver Rodríguez [113], Fainstein y Gulyàs [114]).

El rasgo común de estos experimentos es el uso de iones vestidos. A pesar de que todos los estudios teóricos muestran efectos debidos a la forma no coulombiana del potencial del proyectil no existe en el presente una teoría completa que incluya este tipo de potenciales. Sólo simulaciones utilizando el método de trayectoria clásica de Monte Carlo (Classical Trajectory Monte Carlo, CTMC) pueden hacerlo, pero este modelo clásico no puede explicar efectos cuánticos como interferencias. Por esta razón hemos extendido los modelos CDW-EIS (ver Monti *et al.* [115]) y CDW (Monti *et al.* [116]) para una representación particular del potencial V_P del proyectil como fuera dada por Green y colaboradores [117, 118, 119], el cual es usualmente llamado potencial GSZ.

4.2. Teoría

Consideremos el proceso de ionización simple de un átomo de helio por impacto de un ion rápido parcialmente vestido de carga nuclear Z_P y grado de ionización q (es decir con carga neta q) cuyos electrones se consideran pasivos (congelados durante la reacción):



En el problema reducido a un electrón activo la evolución del mismo está dada por el Hamiltoniano

$$H_a = H_T + V_P(\vec{s}) \quad (4.1)$$

con

$$H_T = -\frac{\nabla_x^2}{2} + V_T(\vec{x}) \quad (4.2)$$

$$V_T = -\frac{Z_T}{x} + \left\langle \varphi_i \left| \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (4.3)$$

donde \vec{x} (\vec{x}_j) representa el vector posición del electrón activo (j -ésimo electrón pasivo del blanco) desde un sistema de referencia fijo al núcleo del blanco, $\vec{s} = \vec{x} - \vec{R}$ el vector posición del electrón activo desde un sistema de referencia fijo al núcleo del proyectil, Z_T es la carga nuclear del blanco ($Z_T = 2$ en el caso del helio), V_T y V_P son los potenciales del blanco y del proyectil que siente el electrón activo y \vec{R} es el vector internuclear. Como es usual, se emplea la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto donde $\vec{R} = \vec{\rho} + t\vec{v}$, siendo $\vec{\rho}$ el parámetro de impacto, \vec{v} la velocidad relativa entre los núcleos, y t el tiempo de colisión, tomando $t = 0$ en el instante de mayor proximidad entre los núcleos. En (4.3) φ_i representa la distribución de electrones pasivos del blanco.

Como se mencionó, hemos elegido una representación particular para el potencial del proyectil V_P tal como fuera dada por Green y colaboradores [117], usualmente llamado potencial GSZ. Éste puede ser escrito como un término de corto rango más un término de largo rango dado por la carga apantallada asintótica q del proyectil:

$$V_P(s) = V_P^{sr}(s) + V_P^{lr}(s) \quad (4.4)$$

donde

$$V_P^{sr}(s) = -\frac{1}{s}(Z_P - q) \left[H(e^{s/d} - 1) + 1 \right]^{-1} \quad (4.5)$$

$$V_P^{lr}(s) = -\frac{q}{s} \quad (4.6)$$

y H y d son parámetros ajustables (ver Szydlik y Green [118], Garvey *et al.* [119]). Tales parámetros pueden encontrarse tabulados para iones y átomos neutros con carga nuclear $Z \leq 18$ en referencia [118] y para átomos e iones con $36 < Z \leq 54$ en [119]. Para los casos

en que el proyectil de interés no se encuentre en estas tablas recurrimos a un procedimiento de extrapolación tal como se detalla en el apéndice B.1.

Dentro del formalismo de onda distorsionada, las amplitudes de transición *post* y *prior* están dadas por (ver sección 1.3.2, ecuaciones (1.162) y (1.163))

$$a_{if}^+(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| \left(H_a - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \chi_i^+ \right\rangle \quad (4.7)$$

$$a_{if}^-(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| \left(H_a - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \chi_i^+ \right\rangle, \quad (4.8)$$

respectivamente. Escribiendo V_P según (4.4) las amplitudes de transición pueden separarse en dos términos

$$a_{if}^\pm(\vec{\rho}) = a_{if}^{lr,\pm}(\vec{\rho}) + a_{if}^{sr}(\vec{\rho}), \quad (4.9)$$

donde

$$a_{if}^{lr,+}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| \left(-\frac{\nabla_x^2}{2} + V_T(\vec{x}) - \frac{q}{s} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^\dagger \right| \chi_i^+ \right\rangle \quad (4.10)$$

$$a_{if}^{lr,-}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| \left(-\frac{\nabla_x^2}{2} + V_T(\vec{x}) - \frac{q}{s} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \right| \chi_i^+ \right\rangle, \quad (4.11)$$

y

$$a_{if}^{sr}(\vec{\rho}) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| \left(-\frac{1}{s}(Z_P - q) \left[H(e^{s/d} - 1) + 1 \right]^{-1} \right) \right| \chi_i^+ \right\rangle. \quad (4.12)$$

donde $a_{if}^{lr,\pm}$ son las amplitudes de transición correspondientes a la ionización por impacto de un proyectil desnudo de carga q , y a_{if}^{sr} es un nuevo término que tiene que ver con la parte de corto rango del potencial V_P . La separación de las amplitudes de transición tal como está escrita en (4.9) es completamente general siempre que el potencial del proyectil pueda ser separado en dos términos, uno de corto y otro de largo rango. Aquí particularmente hemos calculado la parte de corto rango para el caso de potenciales GSZ.

4.2.1. Aproximación CDW-EIS

En la aproximación CDW-EIS las funciones de onda distorsionada de los canales inicial y final se eligen como

$$\chi_i^+(\vec{x}, t) = \psi_i(\vec{x}, t) \mathcal{L}_i^{EIS,+}(\vec{s}) \quad (4.13)$$

$$\chi_f^-(\vec{x}, t) = \psi_f(\vec{x}, t) \mathcal{L}_f^{CDW,-}(\vec{s}), \quad (4.14)$$

respectivamente; y las correspondientes distorsiones de los canales inicial y final son

$$\mathcal{L}_i^{EIS+}(\vec{s}) = \exp[-i\nu \ln(vs + \vec{v} \cdot \vec{s})] \quad (4.15)$$

$$\mathcal{L}_f^{CDW-}(\vec{s}) = N^*(\xi) {}_1F_1(-i\xi; 1; -ips - i\vec{p} \cdot \vec{s}) \quad (4.16)$$

donde $\nu = q/v$, $\xi = q/p$, \vec{p} es el momento del electrón ionizado en el sistema de referencia del proyectil, ${}_1F_1$ la función hipergeométrica confluyente, y $N(a) = \exp(\pi a/2)\Gamma(1+ia)$ (con Γ la función Gamma de Euler). En (4.13) y (4.14), ψ_i y ψ_f son las funciones de onda del blanco inicial y final del electrón activo dependientes del tiempo, respectivamente, dadas por

$$\psi_i(\vec{x}, t) = \phi_i(\vec{x}) \exp(-i\varepsilon_i t) \quad (4.17)$$

$$\psi_f(\vec{x}, t) = \phi_f(\vec{x}) \exp(-i\varepsilon_f t). \quad (4.18)$$

Las funciones ϕ_i y ϕ_f son autofunciones de H_T con energía $\varepsilon_i < 0$ y $\varepsilon_f = k^2/2$, respectivamente, siendo \vec{k} el momento del electrón eyectado respecto del núcleo del blanco.

Para la representación del estado inicial del blanco se eligió una representación Roothaan-Hartree-Fock (RHF) *five-zeta* (ver ecuación (2.53))

$$\phi_i(\vec{x}) = \sum_{l=1}^5 N_l \exp(-Z_l x) \quad (4.19)$$

donde $N_l = b_l Z_l^{3/2} / \sqrt{\pi}$ y los parámetros Z_l y b_l se encuentran tabulados en la referencia [88] (ver tabla A.1). El estado final del electrón activo en el continuo del blanco residual se consideró como una función de onda coulombiana que verifique correctas condiciones asintóticas

$$\phi_f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) N^*(\lambda) {}_1F_1[-i\lambda, 1, -i(kx + \vec{k} \cdot \vec{x})] \quad (4.20)$$

donde $\lambda = \tilde{Z}_T/k$ con \tilde{Z}_T la carga asintótica del blanco residual ($\tilde{Z}_T = 1$ en el caso del He). En la aproximación CDW-EIS la versión *prior* de la amplitud de transición correspondiente

a la parte de largo rango del proyectil resulta (ver ecuación (2.37))

$$a_{if}^{lr,-}(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\Delta\varepsilon t) \int d\vec{x} \left\{ \left(\phi_f(\vec{x}) \mathcal{L}_f^{CDW,-}(\vec{s}) \right)^* \left[\phi_i(\vec{x}) \frac{1}{2} \nabla_{\vec{s}}^2 \mathcal{L}_i^{EIS,+}(\vec{s}) + \vec{\nabla}_{\vec{x}} \phi_i(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{s}} \mathcal{L}_i^{EIS,+}(\vec{s}) \right] \right\}; \quad (4.21)$$

mientras que para la correspondiente a la parte de corto rango se obtiene

$$a_{if}^{sr}(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\Delta\varepsilon t) \int d\vec{x} \left(\phi_f(\vec{x}) \mathcal{L}_f^{CDW,-}(\vec{s}) \right)^* V_{\vec{P}}^{sr}(s) \phi_i(\vec{x}) \mathcal{L}_i^{EIS,+}(\vec{s}), \quad (4.22)$$

con $\Delta\varepsilon = \varepsilon_f - \varepsilon_i$. Luego, la amplitud de transición en función del parámetro de impacto se relaciona con aquella en función del momento transferido transversal según la transformada de Fourier bidimensional

$$\mathcal{R}_{if}^-(\vec{\eta}) = \frac{1}{2\pi} \int d\vec{\rho} \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}) a_{if}^-(\vec{\rho}) \quad (4.23)$$

$$= \mathcal{R}_{if}^{lr,-}(\vec{\eta}) + \mathcal{R}_{if}^{sr}(\vec{\eta}). \quad (4.24)$$

Las amplitudes de transición $\mathcal{R}_{if}^{lr,-}$ y \mathcal{R}_{if}^{sr} resultan:

$$\mathcal{R}_{if}^{lr,-}(\vec{\eta}) = \mathcal{R}_{if(1)}^{lr,-}(\vec{\eta}) + \mathcal{R}_{if(2)}^{lr,-}(\vec{\eta}) \quad (4.25)$$

donde

$$\mathcal{R}_{if(1)}^{lr,-}(\vec{\eta}) = \frac{i\nu N(\lambda) N(\xi) \Gamma(1-\nu)}{\sqrt{2\pi\alpha\beta}} \left(\frac{i\beta}{\alpha} \right)^{-i\nu} \left(\frac{\gamma}{\alpha} \right)^{-i\xi} \times [A_{11} {}_2F_1(i\xi, i\nu; 1; z) - i\xi(1-z) A_{12} {}_2F_1(1+i\xi, 1+i\nu; 2; z)] \quad (4.26)$$

$$\mathcal{R}_{if(2)}^{lr,-}(\vec{\eta}) = \frac{-i\nu N(\lambda) N(\xi) \Gamma(1-\nu)}{\sqrt{2\pi\beta}} \left(\frac{i\beta}{\alpha} \right)^{-i\nu} \left(\frac{\gamma}{\alpha} \right)^{-i\xi} \times A_2 {}_2F_1(i\xi, 1+i\nu; 1; z) \quad (4.27)$$

$$\mathcal{R}_{if}^{sr}(\vec{\eta}) = \frac{-i(Z_P - q)(\tau - 1) N(\lambda) N(\xi) \Gamma(1-\nu)}{v\sqrt{2\pi}} \times A_{sr} \sum_{n=0}^{+\infty} \tau^n \tilde{\alpha}_n^{-1} \left(\frac{\tilde{\gamma}_n}{\tilde{\alpha}_n} \right)^{-i\xi} \left(\frac{\tilde{\beta}_n}{\tilde{\alpha}_n} \right)^{-i\nu} {}_2F_1(i\xi, i\nu; 1; z_n) \quad (4.28)$$

con

$$A_{11} = \sum_{l=1}^5 N_l Z_l (1 - G_l)^{-(1+i\lambda)} \alpha_l^{-2} B_l \quad (4.29)$$

$$A_{12} = \sum_{l=1}^5 N_l Z_l (1 - G_l)^{-(1+i\lambda)} \alpha_l^{-2} (B_l + C_l) \quad (4.30)$$

$$A_{12} = A_{gr} = \sum_{l=1}^5 N_l (1 - G_l)^{-(1+i\lambda)} \alpha_l^{-2} D_l \quad (4.31)$$

$$B_l = \vec{q} \cdot \left[-i\lambda \vec{k} + (1 - G_l + i\lambda G_l) (\vec{q} + \vec{k}) \right] \quad (4.32)$$

$$C_l = \frac{-\beta}{\delta} (\vec{q} + \vec{p} - p\hat{v}) \cdot \left[-i\lambda \vec{k} + (1 - G_l + i\lambda G_l) (\vec{q} + \vec{k}) \right] \quad (4.33)$$

$$D_l = \lambda k + Z_l (1 - G_l + i\lambda G_l) \quad (4.34)$$

$$\vec{q} = -\vec{\eta} - (\Delta\varepsilon/v)\hat{v} \quad (4.35)$$

$$\alpha_l = \frac{1}{2} \left[|\vec{k} + \vec{q}|^2 + Z_l^2 \right] \quad (4.36)$$

$$\lambda_l = Z_l/k \quad (4.37)$$

$$G_l = \vec{k} \cdot \left[\vec{q} + \vec{k}(1 + i\lambda_l) \right] / \alpha_l \quad (4.38)$$

$$\alpha = q^2/2 \quad (4.39)$$

$$\beta = -\Delta\varepsilon \quad (4.40)$$

$$\delta = \vec{p} \cdot \vec{v} - pv + \beta \quad (4.41)$$

$$\gamma = \alpha + \vec{p} \cdot \vec{q} \quad (4.42)$$

$$z = 1 - \frac{\alpha\delta}{\beta\gamma} \quad (4.43)$$

$$\tilde{\alpha}_n = \frac{1}{2} [q^2 + (n+1)^2/d^2] \quad (4.44)$$

$$\tilde{\beta}_n = (n+1)v/d + i\vec{q} \cdot \vec{v} \quad (4.45)$$

$$\tilde{\delta}_n = i\vec{p} \cdot \vec{v} - ipv + i\vec{q} \cdot \vec{v} + (n+1)v/d \quad (4.46)$$

$$\tilde{\gamma}_n = \frac{1}{2} [q^2 + 2\vec{q} \cdot \vec{p} + (n+1)^2/d^2 - 2i(n+1)p/d] \quad (4.47)$$

$$z_n = 1 - \frac{\tilde{\alpha}_n \tilde{\delta}_n}{\tilde{\beta}_n \tilde{\gamma}_n} \quad (4.48)$$

4.2.2. Aproximación CDW

En la aproximación CDW las funciones de onda distorsionada de los canales inicial y final se eligen como

$$\chi_i^+(\vec{x}, t) = \psi_i(\vec{x}, t) \mathcal{L}_i^{CDW,+}(\vec{s}) \quad (4.49)$$

$$\chi_f^-(\vec{x}, t) = \psi_f(\vec{x}, t) \mathcal{L}_f^{CDW,-}(\vec{s}), \quad (4.50)$$

respectivamente; con $\mathcal{L}_f^{CDW,-}$, ψ_i y ψ_f como las definidas en (4.16), (4.17) y (4.18), respectivamente. Los estados inicial ϕ_i y final ϕ_f del electrón activo se toman como los definidos en (4.19) y (4.20). Lo único que cambia respecto de la aproximación CDW-EIS de la sección anterior es la función de distorsión $\mathcal{L}_i^{CDW,+}$, que se elige como

$$\mathcal{L}_i^{CDW,+}(\vec{s}) = N(\nu) {}_1F_1(i\nu; 1; i\nu s + i\vec{v} \cdot \vec{s}). \quad (4.51)$$

En esta aproximación usaremos la versión *post* de la amplitud de transición debido a que la versión *prior* posee una divergencia logarítmica en el pico binario que dificulta su cálculo numérico (ver Brauner y Macek [27]). Consideraremos además una carga efectiva en la función del continuo del electrón ionizado en el blanco residual de manera de tener en cuenta en cierta forma el apantallamiento electrónico dinámico (ver sección 2.2.2). De esta forma, la amplitud correspondiente la parte de largo rango del proyectil resulta

$$a_{if}^{lr,+}(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\Delta\varepsilon t) \int d\vec{x} \left[-\vec{\nabla}_x \phi_f(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_s \mathcal{L}_f^{CDW,-}(\vec{s}) \right]^* \phi_i(\vec{x}) \mathcal{L}_i^{CDW,+}(\vec{s}); \quad (4.52)$$

y para la correspondiente a la parte de corto rango se obtiene

$$a_{if}^{sr}(\vec{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\Delta\varepsilon t) \int d\vec{x} \left(\phi_f(\vec{x}) \mathcal{L}_f^{CDW,-}(\vec{s}) \right)^* V_P^{sr}(s) \phi_i(\vec{x}) \mathcal{L}_i^{CDW,+}(\vec{s}). \quad (4.53)$$

Análogamente a lo realizado en la sección anterior, podemos introducir las amplitudes de transición en función del momento transferido transversal, las cuales en la aproximación CDW resultan:

$$\mathcal{R}_{if}^+(\vec{\eta}) = \mathcal{R}_{if}^{lr,+}(\vec{\eta}) + \mathcal{R}_{if}^{sr}(\vec{\eta}) \quad (4.54)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{if}^{lr,+}(\vec{\eta}) &= \frac{\lambda\nu N(\lambda)N(\xi)N(\nu)}{\sqrt{2\pi\alpha\gamma}} \left(\frac{\gamma+\delta}{\gamma} \right)^{-i\nu} \left(\frac{\gamma}{\alpha} \right)^{-i\xi} \\ &\times \left[A_1 {}_2F_1(i\nu, 1-i\xi; 1; z) + i\nu \frac{\gamma}{\gamma+\delta} A_2 {}_2F_1(1+i\nu, 1-i\xi; 2; z) \right] \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{if}^{sr}(\vec{\eta}) &= \frac{(Z_P - q)(\tau - 1)N(\lambda)N(\xi)N(\nu)}{v\sqrt{2\pi}} \\ &\times A_{sr} \sum_{n=0}^{+\infty} \tau^n \tilde{\alpha}_n^{-1} \left(1 + \frac{\tilde{\gamma}_n}{\tilde{\alpha}_n} \right)^{-i\xi} \left(1 + \frac{\tilde{\beta}_n}{\tilde{\alpha}_n} \right)^{-i\nu} {}_2F_1(i\nu, i\xi; 1; z_n) \end{aligned} \quad (4.56)$$

con

$$A_1 = \sum_{l=1}^5 -N_l (1 - G_l)^{-(1+i\lambda)} \alpha_l^{-2} \vec{q} \cdot \left[iZ_l \vec{k} + k(\vec{k} + \vec{q}) \right] \quad (4.57)$$

$$A_2 = \sum_{l=1}^5 N_l (1 - G_l)^{-(1+i\lambda)} \alpha_l^{-2} \left(v\hat{p} - \vec{v} + \frac{\delta}{\gamma} \vec{q} \right) \cdot \left[iZ_l \vec{k} + k(\vec{k} + \vec{q}) \right] \quad (4.58)$$

$$A_{sr} = \sum_{l=1}^5 N_l (1 - G_l)^{-(1+i\lambda)} \alpha_l^{-2} [k\lambda + Z_l(1 - G_l + i\lambda G_l)] \quad (4.59)$$

$$\vec{q} = -\vec{\eta} - (\Delta\varepsilon/v)\hat{v} \quad (4.60)$$

$$\alpha_l = \frac{1}{2} \left[|\vec{k} + \vec{q}|^2 + Z_l^2 \right] \quad (4.61)$$

$$\lambda_l = Z_l/k \quad (4.62)$$

$$G_l = \vec{k} \cdot \left[\vec{q} + \vec{k}(1 + i\lambda_l) \right] / \alpha_l \quad (4.63)$$

$$\alpha = q^2/2 \quad (4.64)$$

$$\beta = -\Delta\varepsilon \quad (4.65)$$

$$\delta = \vec{p} \cdot \vec{v} - pv + \beta \quad (4.66)$$

$$\gamma = \alpha + \vec{p} \cdot \vec{q} \quad (4.67)$$

$$z = 1 - \frac{\gamma(\alpha + \beta)}{\alpha(\gamma + \delta)} \quad (4.68)$$

$$\tilde{\alpha}_n = \frac{1}{2} [q^2 + (n+1)^2/d^2] \quad (4.69)$$

$$\tilde{\beta}_n = \vec{q} \cdot \vec{v} - i(n+1)v/d \quad (4.70)$$

$$\tilde{\delta} = \vec{p} \cdot \vec{v} - pv \quad (4.71)$$

$$\tilde{\gamma}_n = \vec{q} \cdot \vec{p} - ip(n+1)/d \quad (4.72)$$

$$z_n = 1 - \frac{\tilde{\alpha}_n(\tilde{\alpha}_n + \tilde{\beta}_n) + \tilde{\delta}\tilde{\gamma}_n}{(\tilde{\alpha}_n + \tilde{\beta}_n)(\tilde{\alpha}_n + \tilde{\gamma}_n)} \quad (4.73)$$

4.3. Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos para secciones eficaces doble diferenciales de ionización simple de átomos de helio por impacto de iones U^{21+} , Au^{11+} y F^{q+} ($q = 0, \dots, 9$).

4.3.1. Resultados $U^{21+} + He$

Para poner la extensión del modelo CDW-EIS a prueba, hemos considerado el caso de iones U^{21+} colisionando sobre He a una energía de colisión de 1 MeV/u. Para este sistema, Reinhold *et al.* ([110]; ver también Schultz y Olson [111]) han mostrado que las interferencias que aparecen superimpuestas en el pico de encuentro binario eran el resultado de efectos cuánticos en la sección eficaz diferencial elástica para la dispersión del electrón del blanco con el proyectil parcialmente vestido. Para comparar con los datos experimentales estos autores emplean una aproximación impulsiva de dos cuerpos (*two-body impulsive approximation*, IA) en la cual la sección eficaz de dispersión elástica es convolucionada con el perfil de Compton del estado inicial. Dado que esta teoría sólo tiene en cuenta colisiones binarias no puede describir el espectro completo y para este fin fueron sumados, a los cálculos de IA, resultados provenientes de una simulación CTMC. Como las interferencias

surgen de colisiones elásticas aparecen sólo en el pico de encuentro binario. Los cálculos utilizando CTMC-IA corresponden entonces a la suma de secciones eficaces, pero como es bien sabido los efectos cuánticos aparecen en la suma de amplitudes. Por lo tanto en nuestro modelo no sólo obtenemos interferencias en la sección eficaz elástica, las cuales deberían aparecer sólo en el término de corto rango, sino también interferencias entre las amplitudes de corto y largo rango las cuales no aparecen en el modelo CTMC-IA.

En la figura 4.1 presentamos las secciones eficaces doble diferenciales (*doubly differential cross sections*, DDCS) como función de la energía del electrón ionizado para un ángulo fijo de emisión de 30° . En la figura incluimos los datos experimentales de Reinhold *et al.* [110] en comparación con los cálculos utilizando CTMC-IA y el actual modelo CDW-EIS. También discriminamos en la figura las DDCS obtenidas tomando ya sea la amplitud de transición de largo rango como la de corto rango. En acuerdo con los resultados obtenidos con CTMC-IA el modelo actual CDW-EIS no muestra estructura en el pico de encuentro binario. La posición del pico se encuentra desplazado de las posiciones del pico de las DDCS de corto y largo rango. Además alrededor de 500 eV hay una desviación de la DDCS del comportamiento del término de largo rango que emerge de la interferencia con el término de corto rango. Estas interferencias no están incluidas en el modelo CTMC-IA ya que las DDCS son obtenidas como una suma incoherente de secciones eficaces doble diferenciales. Por el contrario en el modelo CDW-EIS la amplitud de transición son correctamente sumadas y entonces ambos términos interfieren. Notamos que el modelo CDW-EIS se encuentra en buen acuerdo con los experimentos en lo que refiere a posición del pico mientras que el pico calculado con CTMC-IA se encuentra desviado hacia energía más altas.

En la figura 4.2 presentamos los mismos resultados pero para un ángulo fijo de emisión de 35° . En este caso el modelo CTMC-IA predice interferencias debido a efectos cuánticos en la sección eficaz de dispersión elástica. Nuestro cálculo actual CDW-EIS también muestra este efecto como una estructura de doble pico superimpuesta en el pico de encuentro binario. Comparando las contribuciones de corto y largo rango vemos signos de interferencia coherente entre las dos amplitudes ya que, por ejemplo, el pico de la contribución de corto rango es más grande que el de la DDCS total. Los datos experimentales muestran claramente la estructura de doble pico debida a interferencias cuánticas pero la posición de ambos picos se encuentra desviada a valores más bajos que los teóricos.

Finalmente presentamos en la figura 4.3 los resultados para un ángulo de emisión de 40° .

En este caso los resultados CTMC-IA no muestran estructura de doble pico mientras que los CDW-EIS, en acuerdo cualitativo con los experimentos, muestran efectos de interferencia. Como en la figura 4.1 para un ángulo de emisión de 30° los resultados teóricos parecen estar en mejor acuerdo con los datos experimentales con respecto a la posición de los picos, aunque existe cierta discrepancia en la magnitud especialmente en la zona de alta energía de la DDCS. La importancia de tener en cuenta la coherencia entre las contribuciones de corto y largo rango es mostrada nuevamente y de forma clara en la comparación entre la DDCS total y la contribución de corto rango, la cual es más grande.

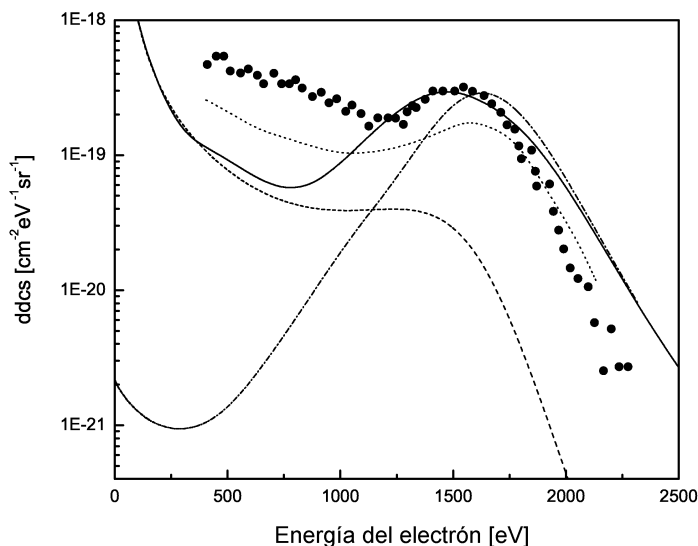


Figura 4.1: Sección eficaz doble diferencial para emisión electrónica en colisiones de iones U^{21+} con He a una energía de colisión de 1 MeV/u como función de la energía del electrón para ángulo fijo de emisión de 30° . Teoría: —, modelo actual CDW-EIS; - - -, cálculos CDW-EIS mostrando sólo la contribución de largo rango del potencial; — · —, cálculos CDW-EIS mostrando sólo la contribución de corto rango del potencial; ·····, cálculos CTMC-IA extraídos de Reinhold *et al.* [110]. Experimentos: ● datos experimentales extraídos de Reinhold *et al.* [110].

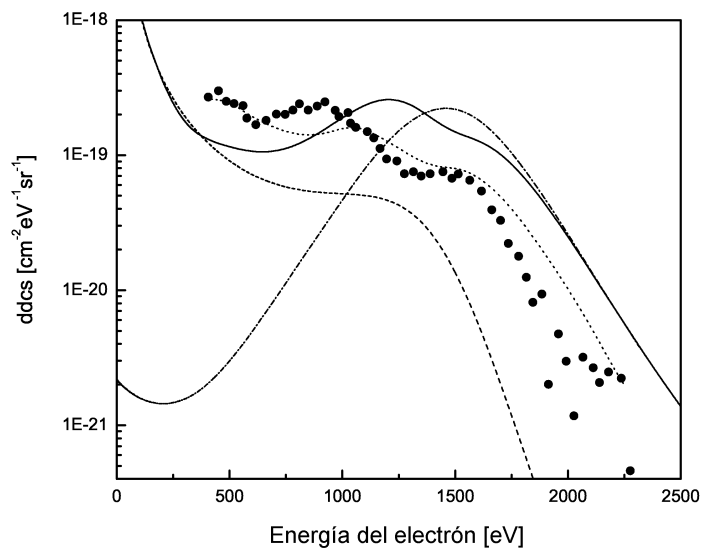


Figura 4.2: Igual a figura 4.1 pero para un ángulo de emisión de 35° .

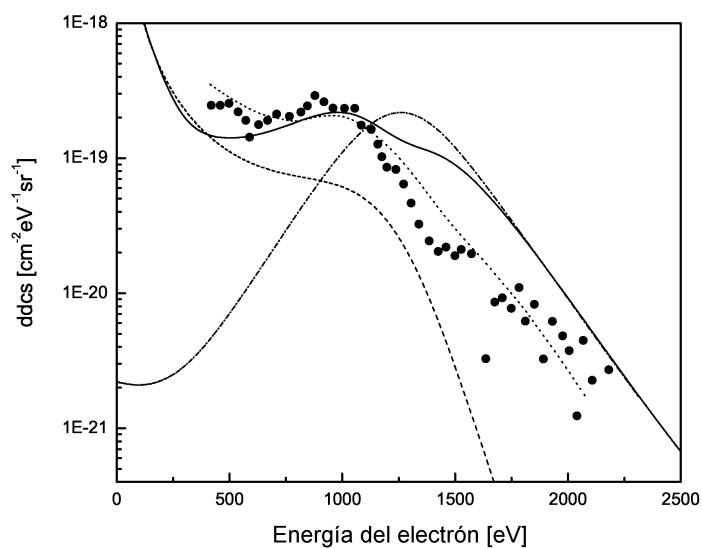


Figura 4.3: Igual a figura 4.1 pero para un ángulo de emisión de 40° .

4.3.2. Resultados $\text{Au}^{11+} + \text{He}$

Además de los resultados experimentales para U^{21+} también se encuentran aquellos de Wolff *et al.* [120] para la ionización simple de átomos de He por impacto de iones Au^{11+} a una energía de colisión de 0.6 MeV. En las figuras 4.4 a 4.6 se presentan los resultados

obtenidos al aplicar la extensión del modelo CDW-EIS al caso mencionado; se muestran secciones eficaces doble diferenciales en función de la energía del electrón ionizado para ángulos fijos de emisión de 25° , $27,5^\circ$ y 30° , respectivamente. Se observan estructuras sobre el pico binario similares a aquellas presentes en el caso de U^{21+} . Estas estructuras son cualitativamente bien representadas por el modelo teórico. Además, puede verse claramente que la zona de electrones de baja energía (grandes parámetros de impacto) es dominada por la colaboración correspondiente a la amplitud de transición de largo rango, mientras que la producción de electrones de alta energía (pequeños parámetros de impacto) resulta casi totalmente producto de la amplitud de corto rango. Esto es así porque para pequeños parámetros de impacto el proyectil pasa muy cerca del blanco y los electrones de este último penetran la nube electrónica del primero; a esas distancias se hacen evidentes los efectos del potencial de corto rango. Por el contrario para parámetros de impacto grandes resulta obvio esperar que la amplitud de corto rango tenga un efecto despreciable sobre las secciones eficaces. Los resultados experimentales (ver Wolff *et al.* [120]) no son absolutos, aquí se encuentran normalizados al los cálculos teóricos para un ángulo de emisión de 25° y una energía del electrón de 100 eV.

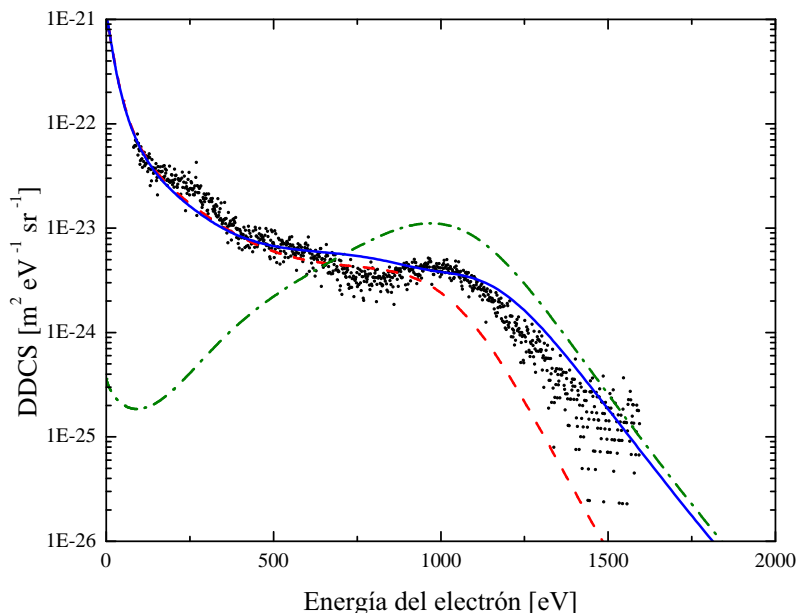


Figura 4.4: Sección eficaz doble diferencial para emisión electrónica en colisiones de iones Au^{11+} con He a una energía de colisión de 0.6 MeV/u como función de la energía del electrón para ángulo fijo de emisión de 25° . Teoría: —, modelo actual CDW-EIS; - - -, cálculos CDW-EIS mostrando sólo la contribución de largo rango del potencial; — · —, cálculos CDW-EIS mostrando sólo la contribución de corto rango del potencial. Experimentos: ●, ver Wolff *et al.* [120].

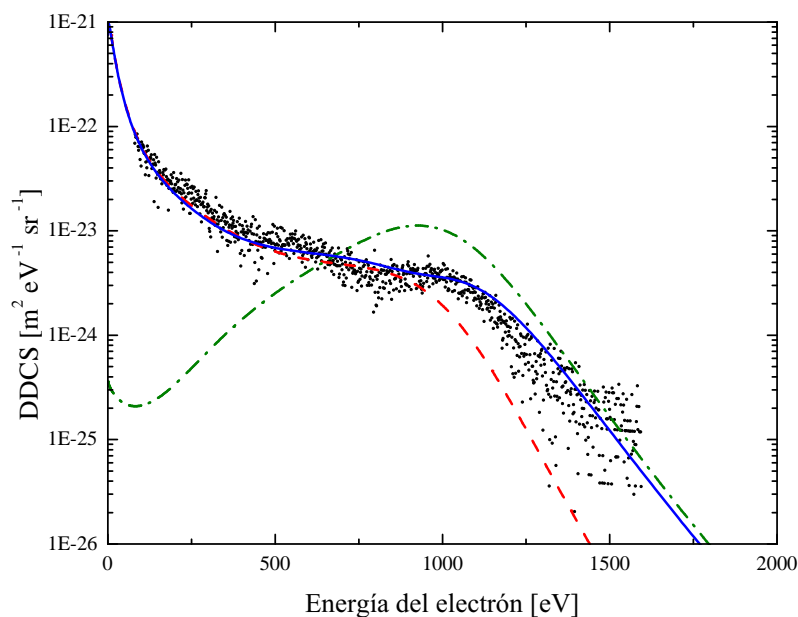


Figura 4.5: Igual a figura 4.4 pero para un ángulo fijo de emisión de 27.5° .

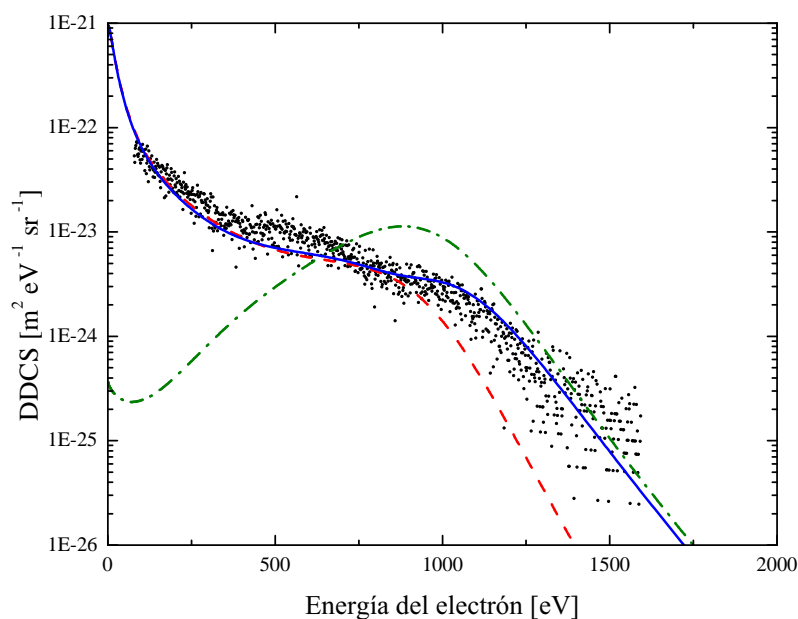


Figura 4.6: Igual a figura 4.4 pero para un ángulo fijo de emisión de 30° .

4.3.3. Resultados $F^{q+} + He$

En 1990 Richard *et al.* [109] publicaron resultados experimentales en los que encontraron una dependencia anómala de la producción de electrones binarios con el estado de carga q del proyectil en colisiones de F^{q+} ($q = 3, \dots, 9$) con blancos de He y H_2 . Por otro lado Satoka *et al.* en 1994 [121] midieron el mismo efecto para el caso de impacto de iones Au^{q+} sobre He. Contrariamente a lo esperado la altura del pico binario aumenta a medida

que el estado de carga del proyectil disminuye. Hasta el momento este efecto no ha podido ser correctamente reproducido por ninguna teoría (ver [121]).

En la figura 4.7 presentamos los resultados obtenidos para el caso de iones F^{q+} ($q = 0, \dots, 9$) sobre átomos de He a energías de colisión de 1 MeV y 1.5 MeV. En la figura se muestra la altura del pico binario a un ángulo de emisión de 0° producida por un ion F^{q+} dividida por la correspondiente a un ion desnudo de carga nuclear $Z_P = 9$ a la misma energía de colisión.

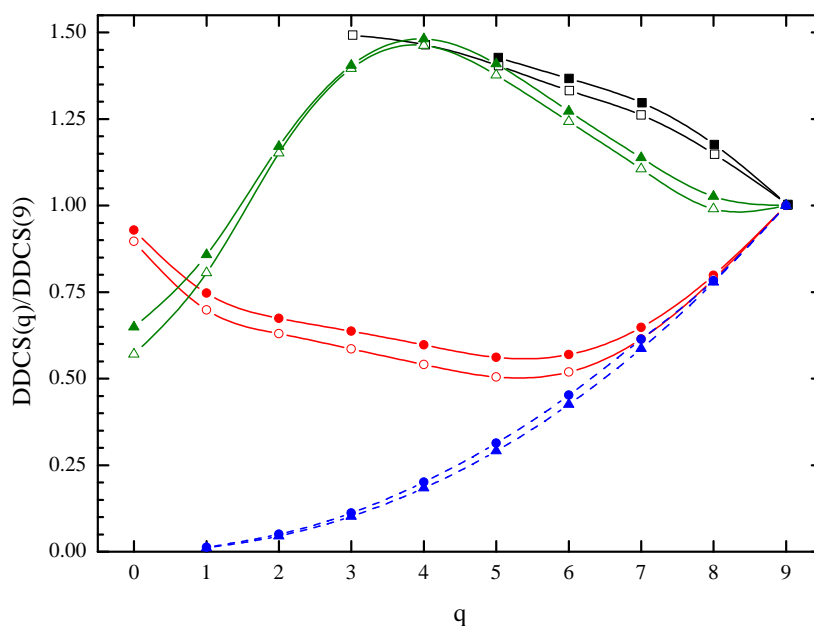


Figura 4.7: Altura del pico binario a un ángulo de emisión de 0° , relativa a iones desnudos en colisiones de F^{q+} con He a una energía de colisión de 1 MeV/u (símbolos abiertos: \triangle , \circ , \square) y 1.5 MeV/u (símbolos sólidos: \blacktriangle , \bullet , \blacksquare). Teoría: \circ , \bullet , modelo actual CDW-EIS; \triangle , \blacktriangle , modelo actual CDW; Símbolos unidos con línea de puntos: \bullet - - - \bullet , modelo CDW-EIS para iones desnudos; \blacktriangle - - - \blacktriangle , modelo CDW para iones desnudos. Experimentos: \square , \blacksquare , ver Richard *et al.* [109].

Inicialmente aplicamos a este caso la extensión a iones vestidos realizada para el modelo CDW-EIS (ver 4.7, \circ y \bullet) observando que este modelo no es suficiente para describir este fenómeno. Acto seguido realizamos lo propio utilizando la extensión realizada para iones vestidos del modelo CDW (ver 4.7, \triangle y \blacktriangle). Puede verse que el actual modelo CDW logra reproducir de buena manera los resultados experimentales. En la figura se muestra también (para el caso de 1.5 MeV de energía de colisión) los resultados obtenidos utilizando el modelo CDW-EIS y CDW para el caso de iones desnudos de carga nuclear $Z_P = 1, \dots, 9$.

Resulta claro que la inclusión del potencial de corto rango es fundamental para describir correctamente la producción de electrones binarios. Conclusiones similares encontramos en la sección 2.3 en la que observamos que es fundamental introducir el apantallamiento electrónico dinámico para la correcta descripción del pico binario en colisiones entre iones desnudos y átomos multielectrónicos.

4.4. Conclusiones

En conclusión hemos extendido los modelos CDW-EIS y CDW al caso de iones vestidos empleando la forma de Green [117, 119] para el potencial del proyectil. Por primera vez somos capaces de tomar en cuenta la interacción coulombiana de largo rango y el potencial de corto rango debido a los electrones del proyectil dentro de un marco teórico unificado. La superposición coherente de estas contribuciones conduce a interferencias cuánticas en la región del pico de encuentro binario. Un buen acuerdo cualitativo se encuentra con los datos experimentales disponibles. En el caso de U^{21+} se encuentran discrepancias con respecto al modelo CTMC-IA el cual sólo considera una suma coherente de las contribuciones de corto y largo rango al pico de encuentro binario dada por la aproximación IA pero una suma no coherente de los resultados de IA con aquellos del cálculo de fondo con CTMC. Estas estructuras claramente surgen debido al comportamiento de corto rango del potencial del proyectil. En lo que corresponde a considerar como proyectiles iones Au^{11+} se puede ver claramente que las amplitudes correspondientes a las partes de largo y corto rango del potencial del proyectil dominan la producción de electrones de baja y alta energía, respectivamente. Finalmente se aplican los actuales modelos CDW-EIS y CDW al caso de impacto de iones F^{q+} ($q = 0, \dots, 9$) sobre He. En tal caso se estudia la altura del pico binario producida a un ángulo de emisión de 0° por los iones vestidos en relación a aquella producida por un ion desnudo de carga q . Por cuestiones de tiempo no se ha aplicado el modelo CDW para el caso de $Au^{11+} + He$, esto será estudiado a la brevedad.

Parte IV

Conclusiones generales - Apéndices - Bibliografía

Capítulo 5

Conclusiones generales

A lo largo de esta tesis hemos estudiado los efectos de la interacción electrónica en el proceso de ionización simple de átomos multielectrónicos por impacto de proyectiles desnudos y parcialmente vestidos a energías intermedias y altas.

Para el caso de iones desnudos se analizó la interacción entre los electrones del blanco a través de la inclusión, dentro de la versión *post* del modelo CDW-EIS, de un potencial perturbativo residual omitido en todos los cálculos anteriores al considerar un potencial coulombiano efectivo para describir la interacción entre el electrón ionizado y el blanco residual en el canal de salida, violando además con esto las correctas condiciones asintóticas del problema. El mencionado potencial residual proviene de la interacción entre el electrón ionizado con el núcleo del blanco y los electrones que permanecen ligados a él en el canal de salida. El estudio de esta interacción se realizó mediante la reducción al problema de un electrón activo en la cual los electrones no ionizados (los pasivos) permanecen congelados en sus orbitales iniciales durante todo el proceso de colisión. De esta manera, el mencionado potencial residual depende de la distribución de electrones pasivos y afecta la dinámica del electrón activo; por lo tanto es interpretado como un apantallamiento dinámico del núcleo del blanco residual que el electrón ionizado siente en el canal final. Se evaluó la contribución de este efecto a las secciones eficaces doble diferenciales, a primer orden y órdenes superiores, para el caso particular de átomos de He como blancos, utilizando la aproximación de Roothaan-Hartree-Fock y considerando funciones de tipo *single-zeta* y *five-zeta* para representar los orbitales electrónicos del blanco. Hemos mostrado que su inclusión resulta de gran importancia en las secciones eficaces doble diferenciales, inclusive para la correcta descripción del pico binario, tanto en los casos que se considere una carga asintótica o efectiva para la función del continuo del blanco en el canal final. También mostramos que la inclusión del apantallamiento dinámico tiene como consecuencia la

desaparición de las llamadas discrepancias *post-prior* que hasta ahora se observaban en el modelo CDW-EIS. Analizamos también el caso de secciones eficaces simple diferenciales en función de la energía del electrón ionizado encontrado que en ellas también resulta apreciable el efecto del apantallamiento dinámico. Resta para trabajos futuros considerar el proceso de ionización con excitación de átomos de He en el cual se modifica la distribución electrónica final, y evaluar el efecto del apantallamiento dinámico para el caso de átomos más pesados que el He. En este último caso el cálculo del potencial puede simplificarse utilizando potenciales paramétricos de tipo Green-Selin-Zachor o Klapisch en lugar de la aproximación Roothaan-Hartree-Fock.

También para el caso de proyectiles desnudos hemos introducido un modelo de onda distorsionada de cuatro cuerpos para la descripción del proceso de ionización simple de átomos dielectrónicos, mediante el cual ambos electrones se consideran como activos y distorsionados por el campo del proyectil en el canal de entrada y de salida mediante el uso de funciones de onda de dos centros (proyectil y blanco). De esta manera, la evolución de cada electrón resulta interdependiente a cada instante de la evolución del otro durante toda el proceso de colisión. Aquí estudiamos la influencia de la correlación electrónica dinámica en las secciones eficaces doble diferenciales por comparación con un modelo de cuatro cuerpos que no incluye la correlación dinámica. En principio, el estado ligado final puede considerarse como un estado hidrogénico arbitrario; particularmente hemos elegido como estado final un estado hidrogénico $1s$ ya que resulta el canal dominante para la reacción de ionización estudiada. Hemos encontrado, para el caso de átomos de He como blancos, que la correlación electrónica no juega un papel fundamental en la determinación de las secciones eficaces diferenciales aunque puede contribuir en un porcentaje importante. Como posible investigación a futuro se propone el estudio de procesos donde se produzca la excitación del electrón no ionizado a estados $\text{He}^+(nlm)$ (con número cuántico principal $n > 1$), tal proceso puede ser crucial para explicar secciones eficaces diferenciales como función de la transferencia de momento transversal.

Finalmente al considerar proyectiles parcialmente vestidos estudiamos la interacción entre el electrón activo del blanco y los electrones ligados al proyectil. Para esto hemos extendido los modelos CDW-EIS y CDW al caso de iones vestidos describiendo el potencial del proyectil con un potencial paramétrico de tipo Green-Selin-Zachor. Tales potenciales pueden ser separados en dos términos: uno de corto rango y uno de largo rango que está dado por la carga neta apantallada q del proyectil. Como producto de esta separación

la amplitud de dispersión también puede ser escrita como una suma de dos amplitudes: una correspondiente a la ya conocida amplitud para el caso de un ion desnudo de carga q más un nuevo término que representa la amplitud producida por la parte de corto rango del potencial del proyectil. La suma coherente de estas amplitudes conduce a la aparición de las interferencias cuánticas en la región del pico de encuentro binario. Hemos aplicado la extensión del modelo CDW-ESI al caso de impacto iones U^{21+} y Au^{11+} sobre átomos de He, logrando describir las estructuras que aparecen superimpuestas al pico de encuentro binario en los espectros de secciones eficaces doble diferenciales en función de la energía del electrón para ángulos de emisión fijos. Además para el caso de iones Au^{11+} hemos podido observar que la producción de electrones de baja energía (grandes parámetros de impacto) se encuentra determinada por la amplitud correspondiente a la parte de largo rango del potencial del proyectil, aquellos producidos a energías altas (pequeños parámetros de impacto) resultan dominados por la amplitud correspondiente a la parte de corto rango del potencial del proyectil. Finalmente hemos aplicado la extensión de ambos modelos para al estudio de la altura del pico binario a un ángulo de emisión de 0° en colisiones de iones F^{9+} sobre átomos de He donde se ha podido reproducir de buena manera los resultados experimentales con el modelo CDW. Por cuestiones de tiempo no se ha aplicado el modelo CDW para el caso de $Au^{11+} + He$, esto será estudiado a la brevedad.

Apéndice A

Apéndices del Capítulo 2

A.1. Cálculo del potencial V_{ap}

Ha sido mencionado que el potencial V_{ap} es un potencial de tipo Hartree-Fock que tiene en cuenta la influencia de los electrones pasivos sobre la evolución dinámica del electrón activo, la cual puede ser escrita como

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

donde \vec{x}_j da la posición dle electrón j -ésimo electrón pasivo con respecto al núcleo del blanco, y φ representa la función de onda ligada de los electrones pasivos.

En el caso particual de trabajar con átomos dielectrónicos solamente tenemos un electrón pasivo, siendo $N = 1$, y entonces V_{ap} se lee,

$$V_{ap}(\vec{x}) = \left\langle \varphi(\vec{x}_1) \left| \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_1|} \right| \varphi(\vec{x}_1) \right\rangle. \quad (\text{A.2})$$

A.1.1. Potencial V_{ap} para una representación *five-zeta* Roothaan-Hartree-Fock de un átomo tipo He

En este caso el orbital de cada electrón está representado por una suma de cinco funciones de Slater de tipo 1s

$$\varphi(\vec{x}) = \sum_{\alpha=1}^5 N_{\alpha} \exp(-Z_{\alpha}x) \quad (\text{A.3})$$

donde $N_\alpha = Z_\alpha^{3/2} b_\alpha / \sqrt{\pi}$ y los parámetros Z_α and b_α se encuentran tabulados en la referencia [88]. Entonces, obtenemos

$$\begin{aligned}
 V_{ap}(\vec{x}) &= \int d\vec{x}_1 \phi_i^*(\vec{x}_1) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_1|} \phi_i(\vec{x}_1) \\
 &= \sum_{\alpha=1}^5 \sum_{\alpha'=1}^5 N_\alpha N_{\alpha'} \int d\vec{x}_1 \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_1|} \exp[-(Z_\alpha + Z_{\alpha'})x_1] \\
 &= \sum_{\alpha=1}^5 \sum_{\alpha'=1}^5 8b_\alpha b_{\alpha'} \frac{Z_\alpha^{3/2} Z_{\alpha'}^{3/2}}{(Z_\alpha + Z_{\alpha'})^3} \frac{1}{x} + \\
 &\quad + (-1) \sum_{\alpha=1}^5 \sum_{\alpha'=1}^5 4b_\alpha b_{\alpha'} \frac{Z_\alpha^{3/2} Z_{\alpha'}^{3/2}}{(Z_\alpha + Z_{\alpha'})^3} \times \\
 &\quad \times \frac{[2 + (Z_\alpha + Z_{\alpha'})x]}{x} \exp[-(Z_\alpha + Z_{\alpha'})x]. \tag{A.4}
 \end{aligned}$$

Luego, es sencillo calcular el coeficiente que afecta a $(1/x)$ en la expresión (A.4); el cual utilizando los parámetros Z_α y d_α que se encuentran en la referencia [88] (ver tabla A.1) para el caso del He resulta:

$$\sum_{\alpha=1}^5 \sum_{\alpha'=1}^5 8b_\alpha b_{\alpha'} \frac{Z_\alpha^{3/2} Z_{\alpha'}^{3/2}}{(Z_\alpha + Z_{\alpha'})^3} = 1.000015 \simeq 1. \tag{A.5}$$

Entonces podemos simplificar la forma dada en la ecuación (A.4), con lo que finalmente se obtiene:

$$\begin{aligned}
 V_{ap}(\vec{x}) &= \frac{1}{x} - \sum_{\alpha=1}^5 \sum_{\alpha'=1}^5 4b_\alpha b_{\alpha'} \frac{Z_\alpha^{3/2} Z_{\alpha'}^{3/2}}{(Z_\alpha + Z_{\alpha'})^3} \times \\
 &\quad \times \frac{[2 + (Z_\alpha + Z_{\alpha'})x]}{x} \exp[-(Z_\alpha + Z_{\alpha'})x]. \tag{A.6}
 \end{aligned}$$

l	b_l	Z_l
1	0.76838d0	1.41714d0
2	0.22346d0	2.37682d0
3	0.04082d0	4.39628d0
4	-0.00994d0	6.52699d0
5	0.00230d0	7.94252d0

Cuadro A.1: Parámetros b_l y Z_l para la función *five-zeta* RHF del He [88].

A.1.2. Potencial V_{ap} para una representación *single-zeta* Roothaan-Hartree-Fock de un átomo tipo He

El potencial V_{ap} para una representación Roothaan-Hartree-Fock *single-zeta* puede ser fácilmente calculado a partir de (A.4) para el caso de funciones *five-zeta* haciendo $b_1 = 1$ y $b_\alpha = Z_\alpha = 0$ para $\alpha = 2, \dots, 5$. Como resultado se obtiene

$$V_{ap}(x) = \frac{1}{x} - \frac{(1 - Z_1 x)}{x} \exp(-2Z_1 x) \quad (\text{A.7})$$

donde el valor de Z_1 puede ser encontrado en la referencia [88], para He resulta $Z_1 = 1.6875$.

Apéndice B

Apéndices del Capítulo 4

B.1. Cálculo de los parámetros H y d del potencial de corto rango

Según lo publicado por Garvey *et al.* [119] los parámetros del potencial de corto rango H y d para un ion de carga nuclear Z y N electrones están dados por

$$d = 1/\xi \tag{B.1}$$

$$H = \eta/\xi \tag{B.2}$$

y los parámetro η y ξ obedecen las relaciones lineales

$$\xi = \xi_0 + \xi_1(Z - N) \tag{B.3}$$

$$\eta = \eta_0 + \eta_1(Z - N) \tag{B.4}$$

donde los parámetros ξ_0 , ξ_1 , η_0 y η_1 son calculados mediante un procedimiento variacional que minimice la energía del átomo o ion (ver [119]). En la publicación mencionada se muestran tabulados los parámetros para iones o átomos con menos de 50 electrones $N < 50$.

En las figuras B.1 y B.2 pueden verse los resultados de este principio variacional (símbolos) y los resultados que se obtienen utilizando el modelo estadístico modificado de Thomas-Fermi (Modified Thomas-Fermi, MTF) (ver [119]) (línea de puntos), los cuales fueron extrapolados (línea continua) para calcular los parámetros ξ_0 , ξ_1 , η_0 y η_1 para iones y átomos con carga nuclear $Z > 54$.

Los resultados de la extrapolación de ξ_0 , ξ_1 , η_0 y η_1 resultan

$$\eta_0 = a_{\eta_0} + b_{\eta_0} N^{c_{\eta_0}} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} \eta_1 = & y_{0,\eta_1} + a_{1,\eta_1} \exp [-(N - x_{0,\eta_1})/t_{1,\eta_1}] + \\ & + a_{2,\eta_1} \exp [-(N - x_{0,\eta_1})/t_{2,\eta_1}] + \\ & + a_{3,\eta_1} \exp [-(N - x_{0,\eta_1})/t_{3,\eta_1}] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} \xi_0 = & y_{0,\xi_0} + a_{1,\xi_0} \exp [-(N - x_{0,\xi_0})/t_{1,\xi_0}] + \\ & + a_{2,\xi_0} \exp [-(N - x_{0,\xi_0})/t_{2,\xi_0}] + \\ & + a_{3,\xi_0} \exp [-(N - x_{0,\xi_0})/t_{3,\xi_0}] \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} \xi_1 = & y_{0,\xi_1} + a_{1,\xi_1} \exp [-(N - x_{0,\xi_1})/t_{1,\xi_1}] + \\ & + a_{2,\xi_1} \exp [-(N - x_{0,\xi_1})/t_{2,\xi_1}] + \\ & + a_{3,\xi_1} \exp [-(N - x_{0,\xi_1})/t_{3,\xi_1}] \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$a_{\eta_0} = -1.48 \quad (\text{B.9})$$

$$b_{\eta_0} = 2.3 \quad (\text{B.10})$$

$$c_{\eta_0} = 0.27 \quad (\text{B.11})$$

$$y_{0,\eta_1} = 0.11 \quad (\text{B.12})$$

$$x_{0,\eta_1} = 1.788 \quad (\text{B.13})$$

$$a_{1,\eta_1} = 0.385 \quad (\text{B.14})$$

$$t_{1,\eta_1} = 3.183 \quad (\text{B.15})$$

$$a_{2,\eta_1} = 0.207 \quad (\text{B.16})$$

$$t_{2,\eta_1} = 0.307 \quad (\text{B.17})$$

$$a_{3,\eta_1} = 0.330 \quad (\text{B.18})$$

$$t_{3,\eta_1} = 20.17 \quad (\text{B.19})$$

$$y_{0,\xi_0} = 0.879d_0 \quad (\text{B.20})$$

$$x_{0,\xi_0} = 2.079d_0 \quad (\text{B.21})$$

$$a_{1,\xi_0} = 0.342d_0 \quad (\text{B.22})$$

$$t_{1,\xi_0} = 17.892d_0 \quad (\text{B.23})$$

$$a_{2,\xi_0} = 0.342d_0 \quad (\text{B.24})$$

$$t_{2,\xi_0} = 17.901d_0 \quad (\text{B.25})$$

$$a_{3,\xi_0} = 0.336d_0 \quad (\text{B.26})$$

$$t_{3,\xi_0} = 4.715d_0 \quad (\text{B.27})$$

$$y_{0,\xi_1} = 0.092129d_0 \quad (\text{B.28})$$

$$x_{0,\xi_1} = 1.766898d_0 \quad (\text{B.29})$$

$$a_{1,\xi_1} = 0.240869d_0 \quad (\text{B.30})$$

$$t_{1,\xi_1} = 0.023878d_0 \quad (\text{B.31})$$

$$a_{2,\xi_1} = 0.812287d_0 \quad (\text{B.32})$$

$$t_{2,\xi_1} = 3.099366d_0 \quad (\text{B.33})$$

$$a_{3,\xi_1} = 0.385783d_0 \quad (\text{B.34})$$

$$t_{3,\xi_1} = 20.339709d_0 \quad (\text{B.35})$$

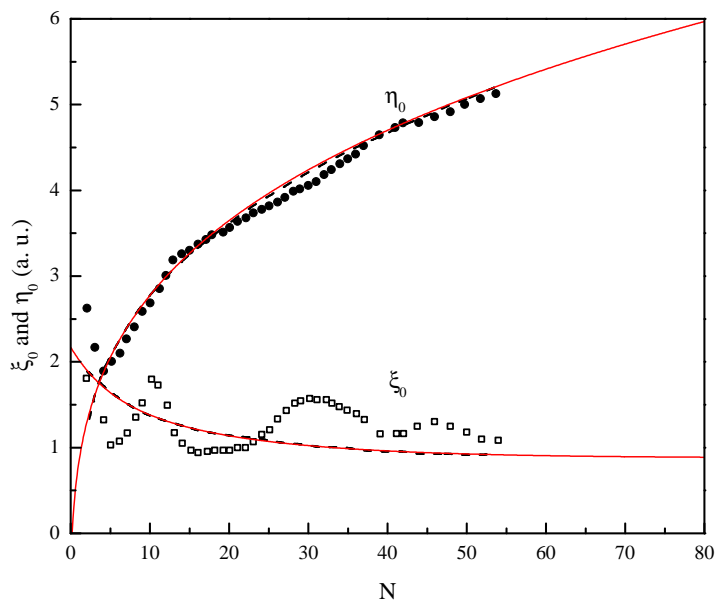


Figura B.1: Parámetros η_0 y ξ_0 en función del número N de electrones. Símbolos: principio variacional (ver [119]). Línea punteada: valores obtenido con el método MTF (ver [119]). Línea continua: extrapolación de los resultados MTF.

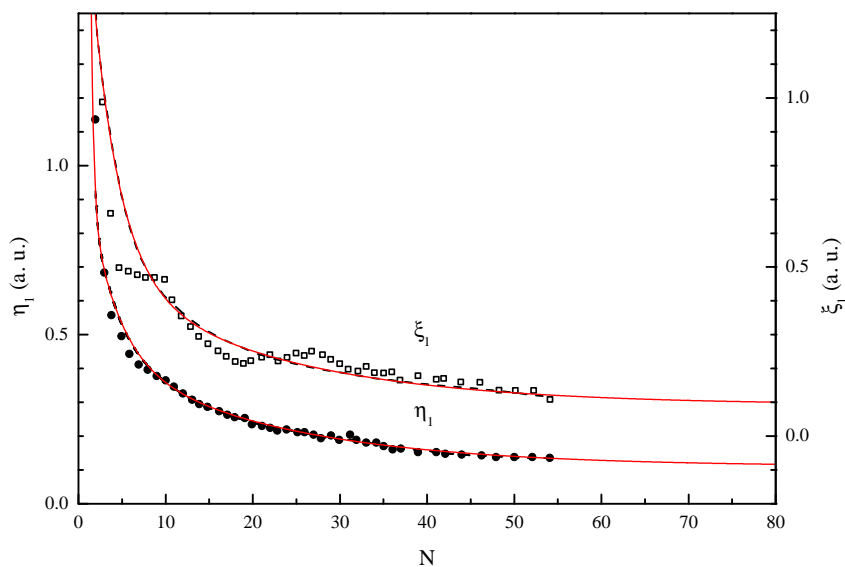


Figura B.2: Parámetros η_1 y ξ_1 en función del número N de electrones. Símbolos: principio variacional (ver [119]). Línea punteada: valores obtenido con el método MTF (ver [119]). Línea continua: extrapolación de los resultados MTF.

Bibliografía

- [1] McDowell M R C and Colemann J P 1970 *Introduction to the Theory of Ion- Atom Collisions*, North Holland Publishing Co.
- [2] Gell-Mann M and Goldberger M L 1953 *Phys. Rev.* **91** 398.
- [3] Lippmann B A 1956 *Phys. Rev.* **102** 264.
- [4] Lippmann B A and Schwinger J 1950 *Phys. Rev.* **79** 469.
- [5] Belkić Dž, Gayet R and Salin A 1979 *Phys. Rep.* **56** 279.
- [6] Aaron R, Amado R D and Lee W 1961 *Phys. Rev.* **121** 319.
- [7] Dettmann K and Leibfried G 1966 *Phys. Rev.* **148** 1271.
- [8] Joachain Ch J. 1975 *Quantum Collision Theory*. North Holland Publishing Co.
- [9] Faddeev L D 1960 *Ah. Eksperim. i Teor. Fiz.* **39** 145.
- [10] Amado R D 1963 *Phys. Rev.* **132** 485.
- [11] Weinberg S 1964 *Phys. Rev.* **133** B232.
- [12] Rosenberg L 1964 *Phys. Rev.* **135** B715.
- [13] Lovelace C 1964 *Phys. Rev.* **135** B1225.
- [14] Macek J 1970 *Phys. Rev. A* **1** 235.
- [15] Francis N C and Watson K M 1954 *Phys. Rev.* **93** 313.
- [16] Igarashi A, Gulyàs L and Fainstein P D 2007 *European Physical Journal D* **42** 73.
- [17] Greider K R and Dodd L R 1966 *Phys. Rev.* **146** 671.
- [18] Dodd L R and Greider K R 1966 *Phys. Rev.* **146** 675.
- [19] Belkić Dž 1978 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11** 3529.
- [20] Macek J and Shakeshaft R 1980 *Phys. Rev. A* **22** 1441.
- [21] Macek J and Taulbjerg K 1981 *Phys. Rev. Lett.* **46** 170.
- [22] Macek J and Alston S 1982 *Phys. Rev. A* **26** 250.
- [23] Dewangan D P and Eichler J 1985 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** L65.

- [24] Dewangan D P and Eichler J 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 2939.
 - [25] Rivarola R D, Maidagan J M and Hanssen J 1987 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **27** 565.
 - [26] Taulbjerg K, Barrachina R O and Macek J 1990 *Phys. Rev. A* **41** 207.
 - [27] Brauner M and Macek J H 1992 *Phys. Rev. A* **46** 2519.
 - [28] Madsen J N and Taulbjerg K 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **28** 1251.
 - [29] Cheshire I M 1964 *Proc. Phys. Soc.* **84** 89.
 - [30] McCarroll R and Salin A 1968 *J. Phys. B (Proc. Phys. Soc.)* **1** 163.
 - [31] Bates D R and Holt A R 1966 *Proc. R. Soc. A* **292** 168.
 - [32] Martir M H, Ford A L, Reading J F and Becker R L 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 1729.
 - [33] Schiwietz G 1990 *Phys. Rev. A* **42** 296.
 - [34] Ponce V H 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12** 3731.
 - [35] Corchs S E, Dubé L J, Maidagan J M, Rivarola R D and Salin A 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **25** 2027.
 - [36] Rivarola R D 1981 *Thèse de Docteur en Physique*, Université de Bordeaux I, Francia.
 - [37] Salin A 1969 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **2** 631.
 - [38] Busnengo H F, Martínez A E and Rivarola R D 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** 4193.
 - [39] Deco G R and Rivarola R D 1985 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 2283.
 - [40] Gayet R 1972 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5** 483.
 - [41] Briggs J S, Greenland P T and Kocbach L 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 3085.
 - [42] Dubé L J 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** 641.
 - [43] Dewangan D P and Eichler J 1987 *Comments At. Mol. Phys.* **21** 1.
 - [44] Janev R K and Winter H P 1985 *Physics Reports* **117** 265.
 - [45] McGuire J H, Stockli M, Cocke C L, Horsdal-Pedersen E and Sil N C 1984 *Phys. Rev. A* **30** 89.
 - [46] Crothers D S F 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 2061.
 - [47] Rivarola R D and Miraglia J E 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 2221.
 - [48] Rivarola R D and Salin A 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** 659.
 - [49] Salin A 1970 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **3** 937.
 - [50] Belkić Dž and Janev R K 1973 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **6** 1020.
-

-
- [51] Abufager P N, Busnengo H F, Martínez A E and Rivarola R D 2002 *Physica Scripta* **66** 38.
- [52] Gulyás L and Fainstein P D 1998 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** 3297.
- [53] Ciappina M and Cravero W R 2005 *Brazilian Journal of Physics* **36** 524.
- [54] Maidagan J M and Rivarola R D 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** 2477.
- [55] Deco G R, Fainstein P D and Rivarola R D 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 213.
- [56] Reinhold C O and Miraglia J E 1987 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 1069.
- [57] Fainstein P D and Rivarola R D 1987 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 1285.
- [58] Deco G R, Maidagan J M and Rivarola R D 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** L707.
- [59] Deco G R, Piacentini R D and Rivarola R D 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 3727.
- [60] Ramírez C A, Rodríguez V D and Rivarola R D 199 *Physica Scripta* **T80** 344.
- [61] Crothers D S F and McCann J F 1983 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16** 3229.
- [62] Rivarola R D and Fainstein P D 1987 *Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B* **24/25** 240.
- [63] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D 1988 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21** 287.
- [64] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D 1988 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21** 2989.
- [65] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 1207.
- [66] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** L559.
- [67] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D 1990 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** 1481.
- [68] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D 1987 *Phys. Rev. A* **36** 3639.
- [69] Fainstein P D, Gulyás L and Dubois A 1998 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** L171.
- [70] Martínez A E, Deco G R, Rivarola R D and Fainstein P D 1988 *Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B* **34** 32.
- [71] Martínez A E and Rivarola R D 1990 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** 4165.
- [72] Martínez A E, Bullrich J A, Maidagan J M and Rivarola R D 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 1883.
- [73] Busnengo H F, Martínez A E and Rivarola R D 1995 *Physica Scripta* **51** 190.
-

- [74] Busnengo H F, Corchs S E, Martínez A E and Rivarola R D 1997 *Physica Scripta* **T73** 242.
 - [75] Abufager P N, Martínez A E, Rivarola R D and Busnengo H F 2001 *Physica Scripta* **T92** 259.
 - [76] Abufager P N, Martínez A E, Rivarola R D and Fainstein P D 2004 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** 817.
 - [77] Abufager P N, Fainstein P D, Martínez A E and Rivarola R D 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 11.
 - [78] Martínez A E, Gayet R, Hanssen J and Rivarola R D 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** L375.
 - [79] Martínez A E, Rivarola R D, Gayet R and Hanssen J 1999 *Physica Scripta* **T80** 124.
 - [80] Rivarola R D, Piacentini R D, Salin A and Belkić Dž 1980 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13** 2601.
 - [81] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 3091.
 - [82] Stolterfoht N, DuBois R D and Rivarola R D 1997 *Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions* ed. Springer.
 - [83] Gulyás L, Fainstein P D and Salin A 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 245.
 - [84] Monti J M, Fojón O A, Hanssen J and Rivarola R D 2010 *J. At. Mol. Opt. Phys.* **2010** 128473.
 - [85] Monti J M, Fojón O A, Hanssen J and Rivarola R D 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 205203.
 - [86] Wilets L and Wallace S J 1968 *Phys. Rev.* **169** 84.
 - [87] Galassi M E, Abufager P N, Martinez A E, Rivarola R D and Fainstein P D 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 1727.
 - [88] Clementi E and Roetti C 1974 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **14** 177.
 - [89] Rudd M E, Toburen L H and Stolterfoht N 1976 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **18** 413.
 - [90] Lee D H, Richard P, Zouros T J M, Sanders J M, Shinpaugh J M and Hidmi H 1990 *Phys. Rev. A* **24** 97.
 - [91] Abufager P A 2006 *Tesis de Doctor en Física*, Universidad Nacional de Rosario, Argentina, no publicado.
 - [92] Madison D H 1973 *Phys. Rev. A* **8** 2449.
 - [93] Salin A 1969 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **2** 1255.
 - [94] Salin A 1972 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5** 979.
-

-
- [95] McGuire J H 1997 *Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions* ed. Cambridge University Press.
- [96] Colavecchia F D, Gasaneo G and Garibotti C R 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** L467.
- [97] Ciappina M F and Cravero W R 2008 *Nucl. Instrum. Methods B* **266** 555.
- [98] Ciappina M F, Otranto S and Garibotti C R 2002 *Phys. Rev. A* **66** 052711.
- [99] Voitkiv A B and Najjari B 2004 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** 4831.
- [100] Voitkiv A B, Najjari B and Ullrich J 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** L107.
- [101] Belkić Dž, Mancev I and Hanssen J 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 249.
- [102] Monti J M, Fojón O A, Hanssen J and Rivarola R D 2009 *J. Phys.: Conference Series* **163** 012068.
- [103] Belkić Dž 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 1731.
- [104] Pedersen J O P, Hvelplund P, Petersen A G and Fainstein P D 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 4001.
- [105] Ciappina M F, Cravero W R and Garibotti C R 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 3775.
- [106] Moshhammer R, Perumal A, Schulz M, Rodríguez V D, Kollmus H, Mann R, Haggmann S and Ullrich J 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 223201.
- [107] Rivarola R D, Fainstein P D 2003 *Nucl. Instrum. Methods B* **205** 448.
- [108] Dörner R, Mergel V, Jagutzki O, Spielberger L, Ullrich J, Moshhammer R, Schmidt-Böcking H 2000 *Phys. Rep.* **330** 95.
- [109] Richard P, Lee D H, Zouros T J M, Sanders J M and Shinpaugh J L 1990 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** L213.
- [110] Reinhold C O, Schultz D R, Olson R E, Kelbch C, Koch R and Schmidt-Böcking H 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1842.
- [111] Schultz D R and Olson R E 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 3409.
- [112] Jagutzki O, Haggmann S, Schmidt-Böcking H, Olson R E, Schultz D R, Döner R, Koch R, Skutlartz A, González A, Quinteros T B, Kelbch C and Richard P 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 2579.
- [113] Rodríguez V D 2003 *Nucl. Instrum. Methods B* **205** 498.
- [114] Fainstein P D and Gulyás L 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 317.
- [115] Monti J M, Fainstein P D and Rivarola R D 2009 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42** 195201.
- [116] Monti J M, Fainstein P D and Rivarola R D, *a ser publicado*.
- [117] Green A E S, Sellin D L and Zachor A S 1969 *Phys. Rev.* **184** 1.
-

- [118] Szydlik P P and Green A E S 1973 *Phys. Rev. A* **9** 1885.
- [119] Garvey R H, Jackman C H and Green A E S 1975 *Phys. Rev.* **12** 1144.
- [120] Wolff W, Shinspaugh J L, Wolff H E, Olson R E, Wang J, Lencinas S, Piscevic D, Herrmann R and Schmidt-Böcking H 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 3683.
- [121] Sataka M, Imai M, Yamazaki Y, Komaki K, Kawatsura K, Kanai Y, Tawara H, Schultz D R and Reinhold C O 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** L171.

Abstract

In this thesis the effects of the electronic interactions in the single ionization process of atoms by multiply charged ions impact are studied. The projectiles considered are either fully stripped or partially dressed ions.

In the case of fully stripped ions we study the interaction between the target active electron and the passive electrons distribution, the post version of the CDW-EIS (Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State) approximation is revisited and a residual potential neglected in all previous calculations is considered. Also a four-body distorted wave model is developed to investigate the single ionization of dielectronic atoms where both electrons are considered as active ones and evolving in the same time-frame.

When considering partially dressed ions as projectiles we investigate the interaction between the target active electron and those bound to the projectile by means of the extension of the CDW-EIS and CDW (Continuum Distorted Wave) models to the case where the projectile is a dressed ion. The projectile potential is described by a analytic parametric GSZ (Green-Sellin-Zachor) one that can be separated in two terms : a long range term determined by the net charge of the totally screened projectile and a short range term due to the electrons bound to the projectile.