

Modelo de cuatro cuerpos para la ionización simple de átomos de He por impacto de protones.

A four-body model for single ionization of He targets by proton impact.

J. M. Monti, O. A. Fojón, J. Hanssen[†], R. D. Rivarola

Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR) and Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura,
Universidad Nacional de Rosario, Avenida Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina
e-mail: monti@ifir-conicet.gov.ar

[†]Institut de Physique, Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions, Université Paul Verlaine
Metz, 1 Bv. Arago, 57078 Metz Cedex 3, France

El proceso de ionización electrónica simple de átomos de helio por impacto de protones se estudia en el marco de un modelo de onda distorsionada de cuatro cuerpos donde ambos electrones son considerados como activos, siendo uno de ellos ionizado mientras el otro queda ligado al blanco residual. Se presentan aquí detalles del modelo teórico, resultados, y se discute el rol de la correlación electrónica.

Palabras Claves: colisión, ionización, correlación electrónica.

The process of single electron ionization of atomic helium targets by proton impact is studied in the frame of a four-body distorted wave model where both electrons are considered as active ones, being one of them ionized while the other remains bound to the residual target. We present details of the theoretical model, results, and the rôle of the electronic correlation is discussed.

Key Words: collision, ionization, electronic correlation.

I. INTRODUCCION

El proceso de ionización electrónica simple de blancos atómicos y moleculares por impacto de proyectiles pesados desnudos ha sido investigado activamente durante las últimas décadas, siendo objeto de gran importancia en diversas disciplinas científicas como Astrofísica y Física del Plasma, como también en áreas aplicadas. Este trabajo se dedica en general al estudio del caso de ionización simple de átomos dielectrónicos interactuando con iones desnudos y, en particular, a la colisión de haces de protones sobre átomos de helio. Se investiga también la influencia de la correlación entre electrones, presente tanto en la preparación del estado inicial como en la evolución temporal de la reacción, llamadas correlación estática y correlación dinámica, respectivamente⁽¹⁾.

Desde el punto de vista teórico estos procesos son usualmente estudiados utilizando aproximaciones de onda distorsionada de tres cuerpos. Los tres cuerpos considerados son el proyectil incidente, el blanco residual y el electrón activo (el electrón a ser ionizado como consecuencia de la colisión). La reducción del proceso de ionización simple a un problema de un electrón fue introducido formalmente por Fainstein *et al.*⁽²⁾ suponiendo que la evolución temporal del electrón activo se produce de forma independiente de los demás electrones (electrones pasivos), los cuales se considera que permanecen congelados durante la colisión. De esta forma el proceso de cuatro cuerpos es descrito mediante una aproximación de tres cuerpos⁽³⁾. Con el objeto de incorporar la influencia de la correlación dinámica en el modelo de electrones independientes (Independent Electron Model, IEM) de tres cuerpos se han utilizado potenciales coulombianos efectivos^(2,4) o de tipo Hartree-Fock⁽⁵⁾ para calcular el estado del continuo del electrón ionizado en

el canal de salida. Utilizando la aproximación Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State (CDW-EIS) para describir la evolución de la reacción se han obtenido buenas representaciones para los espectros de secciones eficaces diferenciales y totales para una gran variedad de sistemas de colisión^(2,4-6). Por otro lado diversos autores trabajando con el modelo de electrones independientes han mejorado la representación de las funciones de onda del continuo de tres cuerpos incluyendo correlación entre el electrón emitido y el proyectil y el núcleo del blanco^(7,8). Siendo la correlación entre estas tres partículas en el canal de entrada de gran importancia en el cálculo de secciones eficaces para el caso de proyectiles múltiplemente cargados⁽⁹⁾.

Aquí introducimos una nueva aproximación de onda distorsionada de cuatro cuerpos, donde ambos electrones se consideran como activos. Esto implica lidiar con mayores dificultades computacionales que aquellas correspondientes a los modelos IEM más simples. Investigaciones previas involucrando una aproximación eikonal simétrica (symmetric eikonal, SE) de cuatro cuerpos fueron publicadas en estudios de ionización simple y doble de átomos de helio en colisiones relativistas con iones altamente cargados^(10,11). Una revisión completa sobre este tipo de aproximaciones para colisiones no relativistas se encuentra en un trabajo reciente por Belkić y colaboradores⁽¹²⁾. Una aproximación de onda distorsionada fue utilizada en un formalismo de cuatro cuerpos para analizar la ionización simple del ion negativo H⁻ por impacto de protones⁽¹³⁾, mostrando la gran influencia de la correlación estática en el cálculo de las secciones eficaces totales en dicho sistema. Se preservaron correctas condiciones de contorno en ambos canales de entrada y salida. El electrón remanente en el átomo de hidrógeno residual

se consideró ocupando su estado fundamental. Sin embargo, la distorsión de las funciones de onda de dos electrones de los canales de entrada y salida, producida por el potencial del proyectil, se consideró sólo afectando al electrón a ser ionizado, resultando un tratamiento desigual para con los electrones del blanco. En la descripción presente, ambos electrones se distorsionan de la misma forma en el canal de entrada por fases eikoniales multiplicativas asociadas con sus interacciones con el proyectil. En el canal de salida, la función de onda de dos electrones se representa por un producto simetrizado de dos funciones, una de ellas describe un electrón ligado al blanco residual y la otra describe un continuo de dos centros, representado como el doble producto de una onda plana y dos factores de continuo coulombiano. Cada uno de estos factores es asociado con la interacción del electrón ionizado con el proyectil desnudo y el blanco residual. El factor del continuo correspondiente a la interacción del electrón ionizado con el blanco residual se escogió como el correspondiente a la carga neta del blanco residual, preservando así las correctas condiciones asintóticas. En este sentido el electrón ionizado se trata como en el modelo CDW-EIS. Por otro lado el estado ligado residual se considera como una función hidrogénica la cual es distorsionada por una fase eikonal asociada a la interacción del proyectil con el electrón residual, al igual que en la aproximación Symmetric Eikonal (SE) para la excitación electrónica simple, de manera que, en principio, el electrón no ionizado puede ser promovido a cualquier estado excitado del blanco residual. Cálculos preliminares usando este modelo de cuatro cuerpos fueron publicados previamente⁽¹⁴⁾. En el trabajo presente mostramos en profundidad detalles del modelo teórico.

El modelo teórico se describe en la sección II, mientras que en la sección III se muestran resultados correspondientes a secciones eficaces doble diferenciales calculadas para distintas energías de colisión en función de la energía del electrón emitido para distintos ángulos fijos de emisión. Las conclusiones finales se presentan en la sección IV.

Se utilizan unidades atómicas a menos que se exprese lo contrario.

II. TEORIA

El modelo 4B-DW-EIS

En general consideramos el impacto de un proyectil iónico de carga Z_P contra un blanco atómico de dos electrones con carga nuclear Z_T . Para la descripción del proceso de ionización simple utilizamos la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto. Como se ha dicho anteriormente ambos electrones serán considerados como activos durante la colisión.

La reacción se describe desde un sistema de referencia fijo al núcleo del blanco. La ecuación de Schrödinger que describe el problema está dada por

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

donde \vec{x}_j y \vec{s}_j indican el vector posición del electrón j -ésimo ($j = 1, 2$) respecto del núcleo del blanco y del proyectil, respectivamente, t 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 las correctas condiciones asintóticas.

Siguiendo con el formalismo de onda distorsionada, las funciones de onda distorsionadas inicial y final se eligen, respectivamente, como

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

y

$$\begin{aligned} \chi_{\beta}^{-}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathcal{P}_{12}) \left[\varphi_{\beta}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{L}_{\beta}^{-}(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \right] \times \\ & \times \exp \left[-i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln (vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \times \\ & \times \exp (-iE_{\beta} t) \end{aligned} \quad (3)$$

donde \vec{v} es la velocidad de impacto, φ_{α} la función de onda inicial de dos electrones ligados con energía atómica E_{α} y φ_{β} es una función de onda 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 permutación de partículas idénticas. Como trabajamos con la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto, el vector internuclear \vec{R} está dado por $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$ donde $\vec{\rho}$ es 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.

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

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\alpha}^{+}(\vec{s}_1, \vec{s}_2) &= \prod_{j=1,2} \mathcal{E}_{\alpha}^{+}(\vec{s}_j) = \\ & = \prod_{j=1,2} \exp [-i\nu \ln (vs_j + \vec{v} \cdot \vec{s}_j)] \end{aligned} \quad (4)$$

y

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\beta}^{-}(\vec{s}_1, \vec{s}_2) &= \mathcal{F}_{\beta}^{-}(\vec{s}_1) \mathcal{E}_{\beta}^{-}(\vec{s}_2) = \\ & = N^*(\xi) {}_1F_1 [-i\xi, 1, -i(ps_1 + \vec{p} \cdot \vec{s}_1)] \times \\ & \times \exp [i\nu \ln (vs_2 - \vec{v} \cdot \vec{s}_2)] \end{aligned} \quad (5)$$

donde $\nu = Z_P/v$, $\xi = Z_P/p$ y \vec{p} representa el momento lineal del electrón ionizado con respecto al proyectil, $N(a) = \exp(\pi a/2) \Gamma(1 - ia)$ (siendo Γ la función Gamma) el factor de normalización de la función hipergeométrica ${}_1F_1$.

Siguiendo con el formalismo de onda distorsionada, y utilizando las funciones χ_{α}^{+} y χ_{β}^{-} podemos escribir un primer orden de la versión *prior* de la amplitud de dispersión

en función del parámetro de impacto de la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) &= i(\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp[i(E_\beta - E_\alpha)t] \\ &\int d^3x_1 d^3x_2 \left\{ \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathcal{P}_{12}) \times \right. \right. \\ &\quad \times \left. \left. \left[\varphi_\beta(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{L}_\beta^-(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \right]^* \right] \right\} \times \\ &\quad \times \sum_{\substack{j,k=1,2 \\ j \neq k}} \left[\varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_k) \frac{\nabla_{s_j}^2}{2} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_j) + \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_k) \nabla_{x_j} \varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \nabla_{s_j} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_j) \right] \} \quad (6) \end{aligned}$$

Llamamos a este modelo 4B-DW-EIS (Four-Body Distorted Wave-Eikonal Initial State).

La función de onda del estado ligado inicial del blanco se obtuvo dentro de la aproximación de Roothaan-Hartree-Fock, la cual aparece como el doble producto de funciones de onda de un electrón $\phi_\alpha(\vec{x})$

$$\varphi_\alpha(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \phi_\alpha(\vec{x}_1) \phi_\alpha(\vec{x}_2) \quad (7)$$

donde, en particular, al considerar el caso de átomos de helio en su estado fundamental

$$\phi_\alpha(\vec{x}) = \sum_{j=1}^5 \frac{Z_j^{3/2}}{\pi^{1/2}} b_j \exp(-Z_j x) \quad (8)$$

Los coeficientes b_j y parámetros Z_j han sido tabulados por Clementi y Roetti⁽¹⁵⁾. Vale comentar que esta función de onda contiene aproximadamente el 98,7% de la correlación estática radial.

La función de onda final de dos electrones φ_β se elige como

$$\begin{aligned} \varphi_\beta(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \phi_\beta^c(\vec{x}_1) \phi_\beta(\vec{x}_2) = \\ &= \phi_\beta(\vec{x}_2) \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}_1)}{(2\pi)^{3/2}} \times \\ &\quad \times N^*(\lambda) {}_1F_1 \left[-i\lambda, 1, -i(kx_1 + \vec{k} \cdot \vec{x}_1) \right] \quad (9) \end{aligned}$$

donde $\lambda = (Z_T - 1)/k$ y \vec{k} es el momento lineal del electrón ionizado en el sistema de referencia del núcleo del blanco, ϕ_β representa un estado hidrogénico de carga nuclear Z_T correspondiente al blanco residual. De esta forma, en el canal de salida, la función de onda φ_β describe uno de los electrones ligado al blanco y el otro en un estado del continuo del blanco a gran distancia.

Luego para calcular los espectros de secciones eficaces introducimos la transformada de Fourier bidimensional

$$\mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta}) = (2\pi)^{-1} \int d^2\rho \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}) \mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) \quad (10)$$

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

$$\frac{d^2\sigma}{dE_k d\Omega_k} = k \int d^2\rho \left| \mathcal{A}_{\alpha\beta}^-(\vec{\rho}) \right|^2 = k \int d^2\eta \left| \mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta}) \right|^2. \quad (11)$$

donde $\mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta})$ es la amplitud de dispersión como función del momento total transversal transferido.

Utilizando el conocido método de transformada de Fourier, obtenemos

$$\mathcal{R}_{\alpha\beta}^-(\vec{\eta}) = \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^5 b_i b_j \mathcal{R}_{\alpha\beta,ij}^-(\vec{\eta}) \quad (12)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\alpha\beta,ij}^-(\vec{\eta}) &= i \frac{4\pi^2}{v} (\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \frac{(1 + \mathcal{P}_{12})}{\sqrt{2}} \\ &\int d^3k_2 \mathcal{F}_{ij}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) \Big|_{\vec{q}_{1,2} = -\vec{k}_{1,2}} \quad (13) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{ij}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) &= A_{1i}(\vec{k}_2) A_2(\vec{q}_2) \times \\ &\quad \times \left[B_{11j}(\vec{k}_1) B_{12}(\vec{q}_1) + \vec{B}_{21j}(\vec{k}_1) \cdot \vec{B}_{22}(\vec{q}_1) \right] \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{1i}(\vec{k}_2) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x_2 \exp(-i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2) \times \\ &\quad \times \phi_\beta^*(\vec{x}_2) \phi_\alpha(\vec{x}_2) \\ &= \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} (Z_i Z_T)^{3/2} \frac{Z_i + Z_T}{[(Z_i + Z_T)^2 + k_2^2]^2} \quad (15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_2(\vec{q}_2 = -\vec{k}_2) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3s_2 \exp(-i\vec{q}_2 \cdot \vec{s}_2) \times \\ &\quad \times \mathcal{E}_\beta^*(\vec{s}_2) \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_2) \\ &= 2\sqrt{2\pi} (2v)^{-2iv} \frac{\Gamma(1 - i\nu)}{\Gamma(i\nu)} \times \\ &\quad \times \eta_2^{-2(1+i\nu)} \delta(k_{2z}) \quad (16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_{11j}(\vec{k}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x_1 \exp(-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1) \times \\ &\quad \times \frac{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}_1)}{(2\pi)^{3/2}} \phi_{cont}^*(\vec{x}_1) \phi_\alpha(\vec{x}_1) \\ &= \frac{Z_j^{3/2}}{2\pi^{5/2}} N(\lambda) \frac{A_{kj}^{-(1+i\lambda)}}{\alpha_j^2} [Z_j A_{kj} - i\lambda B_{kj}] \quad (17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_{12}(\vec{q}_1 = -\vec{k}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3s_1 \exp(-i\vec{q}_1 \cdot \vec{s}_1) \times \\ &\quad \times \mathcal{F}_\beta^*(\vec{s}_1) \frac{\nabla_{s_1}^2}{2} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_1) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} (-v\nu^2) N(\xi) \frac{N(\nu - 1)}{\alpha} \times \\ &\quad \times A_p^{-i\xi} U_v^{-(1+i\nu)} \quad (18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{B}_{21j}(\vec{k}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x_1 \exp(-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1) \times \\ &\quad \times \frac{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}_1)}{(2\pi)^{3/2}} \phi_{cont}^*(\vec{x}_1) \vec{\nabla}_{x_1} \phi_\alpha(\vec{x}_1) \\ &= \frac{-iZ_j^{5/2}}{\pi^{5/2}} N(\lambda) \frac{A_{kj}^{1+i\lambda}}{\alpha_j^2} \times \\ &\quad \times \left[i\lambda \vec{k} - (A_{kj} - i\lambda A_{kj} + i\lambda) \right] \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{B}_{22}(\vec{q}_1 = -\vec{k}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3s_1 \exp(-i\vec{q}_1 \cdot \vec{s}_1) \times \\ &\quad \times \mathcal{F}_\beta^{-*}(\vec{s}_1) \vec{\nabla}_{s_1} \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_1) \\ &= 2i\sqrt{\frac{2}{\pi}} \nu N(\xi) \frac{N(\nu)}{\alpha^2} \times \\ &\quad \times A_p^{-i\xi} U_v^{-(1+i\nu)} \left[J_1 \vec{v} + J_2 \vec{p} + J_3 \vec{k}_1 \right] \quad (20)\end{aligned}$$

$$J_1 = \frac{i\xi p}{A_p} F^+(x) \quad (21)$$

$$J_2 = \frac{-i\xi v}{A_p} F^+(x) \quad (22)$$

$$J_3 = \frac{-i\xi v U_{pv}}{U_v A_p} F^+(x) - v F(x) \quad (23)$$

donde

$$\alpha_j = |\vec{k}_1 + \vec{k}|^2 + Z_j \quad (24)$$

$$A_{kj} = 1 - U_{kj} \quad (25)$$

$$B_{kj} = 2[ik + Z_j U_{kj}] \quad (26)$$

$$U_{kj} = \frac{-2}{\alpha_j} \left[\vec{k} \cdot (\vec{k}_1 + \vec{k}) + iZ_j k \right] \quad (27)$$

$$\alpha = k_1^2 \quad (28)$$

$$A_p = 1 + U_p \quad (29)$$

$$U_p = \frac{2}{\alpha} \vec{p} \cdot \vec{k}_1 \quad (30)$$

$$U_v = \frac{2}{\alpha} \vec{v} \cdot \vec{k}_1 \quad (31)$$

$$U_{pv} = \frac{2}{\alpha} (pv - \vec{p} \cdot \vec{v}) \quad (32)$$

$$x = 1 - \frac{U_v - U_{pv}}{U_v A_p} \quad (33)$$

$$F(x) = {}_2F_1(i\nu, i\xi, 1, x) \quad (34)$$

$$F(x)^+ = {}_2F_1(1+i\nu, 1+i\xi, 2, x) \quad (35)$$

El modelo CB-CDW-EIS

Puede realizarse ahora una aproximación más fuerte al modelo 4B-DW-EIS y consiste en considerar $\vec{s}_2 = -\vec{R}$, tanto en el canal inicial como final. De esta forma las distorsiones de los canales inicial y final resultan:

$$\mathcal{L}_\alpha^+(\vec{s}_1, \vec{R}) = \mathcal{E}_\alpha^+(\vec{s}_1) \exp \left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(vR - \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \quad (36)$$

y

$$\mathcal{L}_\beta^-(\vec{s}_1, \vec{R}) = \mathcal{F}_\beta^-(\vec{s}_1) \exp \left[i \frac{Z_P}{v} \ln(vR + \vec{v} \cdot \vec{R}) \right] \quad (37)$$

en lugar de las dadas en (4) y (5). De esta forma el término $A_2(\vec{s}_2)$ resulta

$$\begin{aligned}A_2(\vec{q}_2 = -\vec{k}_2) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \mathcal{E}_\beta^{-*}(-\vec{R}) \mathcal{E}_\alpha^+(-\vec{R}) \times \\ &\quad \times \int d^3s_2 \exp(-i\vec{q}_2 \cdot \vec{s}_2) \\ &= (2\pi)^{3/2} (\rho v)^{-i2\nu} \delta(\vec{k}_2) \quad (38)\end{aligned}$$

mientras que los demás términos permanecen sin modificaciones. De esta manera la ecuación (13) en esta aproximación resulta

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_{\alpha\beta,ij}^-(\vec{\eta}) &= i \frac{4\pi^2}{v} (\rho v)^{2iZ_P Z_T/v} \frac{(1 + \mathcal{P}_{12})}{\sqrt{2}} \times \\ &\quad \times \mathcal{F}_{ij}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) \Big|_{\vec{k}_2=0; \vec{q}_1=-\vec{k}_1} \quad (39)\end{aligned}$$

con $\vec{K} = \vec{k}_1$, es decir, en esta aproximación todo el momento es transferido al electrón a ser ionizado. Este modelo corresponde a describir la excitación en una primera aproximación de Born (aproximación Coulomb Born; CB) y el proceso de ionización mediante la aproximación CDW-EIS. Se llamó a este modelo CB-CDW-EIS. En esta aproximación los electrones evolucionan de forma independiente el uno del otro y por lo tanto la correlación electrónica no está incluida.

III. RESULTADOS Y DISCUSIONES

Se obtuvieron secciones eficaces doble diferenciales (DDCS) utilizando los modelos 4B-DW-EIS y CB-CDW-EIS. Se muestran resultados en Fig. 1 y 2 para el impacto de protones sobre átomos de helio para energías de colisión de 1 MeV y 1,5 MeV, respectivamente.

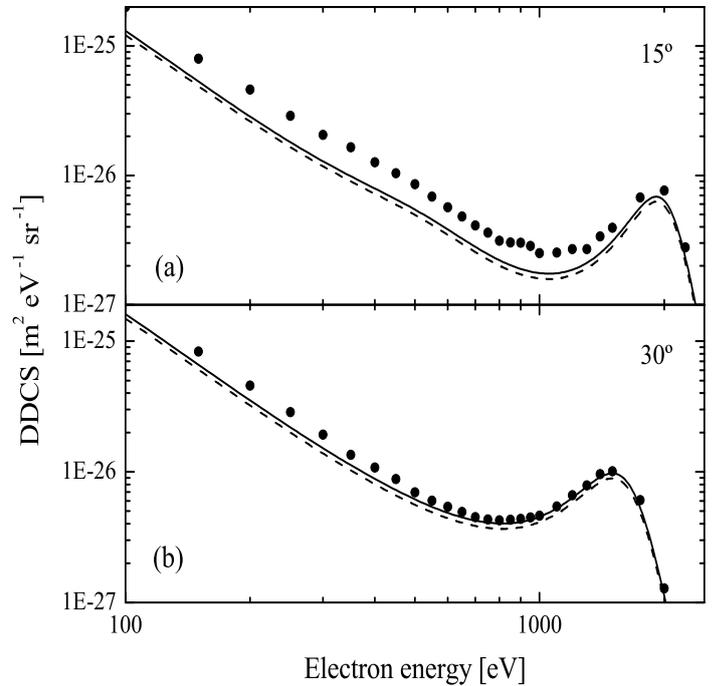


Figura 1. Sección eficaz doble diferencial para la ionización simple de átomos de helio por impacto de protones a 1 MeV en función de la energía del electrón emitido para ángulos fijos de emisión de 15° (a) y 30° (b). Teoría: línea continua, actual modelo 4B-DW-EIS; línea de trazos, actual modelo CB-CDW-EIS. Experimentos: círculos sólidos, Toburen *et al.*⁽¹⁶⁾

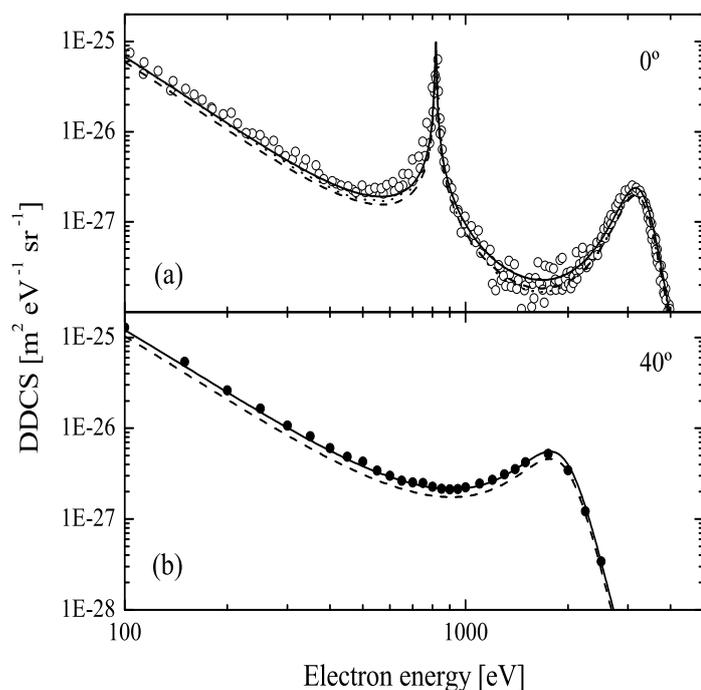


Figura 2. Sección eficaz doble diferencial para la ionización simple de átomos de helio por impacto de protones a 1,5 MeV en función de la energía del electrón emitido para ángulos fijos de emisión de 0° (a) y 40° (b). Teoría: línea continua, actual modelo 4B-DW-EIS; línea de trazos, actual modelo CB-CDW-EIS; línea de puntos, cálculos CDW-EIS *post*⁽⁵⁾. Experimentos: círculos abiertos, Lee *et al.*⁽¹⁷⁾; círculos sólidos, Toburen *et al.*⁽¹⁶⁾.

Comparando los resultados del modelo 4B-DW-EIS con aquellos correspondientes al modelo CB-CDW-EIS puede obtenerse una medida del efecto de la correlación electrónica. Se encuentra para la reacción de ionización simple de átomos de helio por impacto de protones que la corrección a los perfiles de DDCS debida a la inclusión de la correlación electrónica oscila entre el 23 % y el 50 % dependiendo de la velocidad de la colisión y del ángulo de emisión. Se encuentra, en general, que estas correcciones resultan mayores en la emisión hacia adelante, mientras que decrecen a medida que aumenta el ángulo de emisión.

IV. CONCLUSIONES

Se ha introducido un modelo de cuatro cuerpos para el estudio de la ionización de blancos dielectrónicos por impacto de iones desnudos. Los resultados muestran buen acuerdo con los datos experimentales para las secciones eficaces doble diferenciales para distintas velocidades de colisión. Mediante la comparación de los resultados que se obtienen con los

modelos 4B-DW-EIS y CB-CDW-EIS se puede tener una medida de la influencia de la correlación electrónica.

El futuro interés de nuestro trabajo reside en considerar la excitación del electrón residual a un estado $He^+(nlm)$ (con $n > 1$) y la adaptación del modelo actual para el cálculo de ionización de átomos dielectrónicos por proyectiles altamente cargados.

Referencias

- [1] McGuire J.H., "Electron Correlation in Atomic Collisions", Cambridge University Press (1997)
- [2] Fainstein P.D., V.H. Ponce and R.D. Rivarola, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*, **21**, 287 (1988)
- [3] Stolterfoht N., R.D. DuBois and R.D. Rivarola, "Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions", Berlin: Springer (1997)
- [4] Fainstein P.D., V.H. Ponce and R.D. Rivarola, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*, **24**, 3091 (1991)
- [5] Gulyás L., P.D. Fainstein and A. Salin, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*, **28**, 245 (1995)
- [6] Crothers D.S.F and J.F. McCann, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **16**, 3229 (1983).
- [7] Colavecchia F.D., G. Gasaneo and C.R. Garibotti, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*, **33**, L467 (2000)
- [8] Ciappina M.F. and W.R. Cravero, *Nucl. Inst. Methods B*, **266**, 555 (2008)
- [9] Ciappina M.F., S. Otranto and C.R. Garibotti, *Phys. Rev. A*, **66**, 052711 (2002)
- [10] Voitkiv A.B. and B. Najjari, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*, **37**, 4831 (2004)
- [11] Voitkiv A.B., B. Najjari and J. Ullrich, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*, **38**, L107 (2005)
- [12] Belkić Dž., I. Mancev and J. Hanssen, *Rev. Mod. Phys.*, **80**, 249 (2008).
- [13] Belkić Dž., *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*, **80**, 249 (2008)
- [14] Monti J.M., O.A. Fojón, J. Hanssen and R.D. Rivarola, *J. Phys.: Conference Series*, **163**, 012068 (2009).
- [15] Clementi E. and C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables*, **14**, 177 (1974)
- [16] Rudd M.E., L.H. Toburen and N. Stolterfoht, *At. Data Nucl. Data Tables*, **18**, 413 (1976)
- [17] Lee D.H., P. Richard, T.J.M. Zouros, J.M. Sanders, J.M. Shinpaugh and H. Hidmi, *Phys. Rev. A*, **24**, 97 (1990)