

01.80.28

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
NO 2	AÑO 1980

DESCRIPCION OPTIMIZADA DE LOS ESTADOS ELECTRONICOS EN COLISIONES

ATOMICAS ASIMETRICAS

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Centro Atómico Bariloche
Comisión Nacional de Energía Atómica

Tesis presentada ante el Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, República Argentina, para optar al título de Doctor en Física.

Dr. Víctor H. Ponce
Asesor Científico

Lic. Edith C. Goldberg
Doctorando

San Carlos de Bariloche

1980

A mis padres, a Julio y
Alejandro

Agradecimientos:

Agradezco especialmente a Víctor H. Ponce por sus valiosas cualidades como profesor y compañero de trabajo que me permitieron lograr este objetivo.

También deseo agradecer a Raúl A. Baragiola por las provechosas discusiones y por los estímulos que me brindó, y a toda la división Colisiones Atómicas por hacer tan agradables estos 4 años de estadía en la misma.

INDICE

CAPITULO I

Efectos adiabáticos en los procesos de ionización de capas internas por proyectiles pesados.

I-1	Introducción	1
I-2	Ecuación de Schrodinger	5
I-3	Valores característicos de los parámetros de colisión	7
I-4	Optimización del radio de la capa K	8
I-5	Amplitud de transición	9
I-6	Contribuciones monopolar y dipolar a la amplitud de transición	11
I-7	Cálculo de la probabilidad de ionización	13
I-8	Resultados	15
I-9	Conclusiones	17

CAPITULO II

Energía media transferida a electrones internos por proyectiles canalizados, y su fluctuacion.

II-1	Introducción	19
II-2	Límites de validez de la aproximación semiclásica. Amplitud de transición	22
II-3	Descripción de los estados electrónicos	23
II-4	Desarrollo del cálculo para las capas K y L como estados iniciales	24
II-5	Análisis de la expresión del término T _{lm} para colisiones distantes	38
II-6	Proyectiles rápidos y distantes. Cálculo explícito de las amplitudes de transición	44
II-7	Estudio de la dependencia con la energía transferida de la sección eficaz doble diferencial, en el caso de velocidades y parámetros de impacto grandes	47

II-8	Fuerza uniforme sobre el átomo	49
II-9	Integración analítica en parámetro de impacto Fórmulas aproximadas para la pérdida de energía media y su fluctuación	53
II-10	Discusión y Resultados	60
II-11	Conclusiones	64
	Referencias	66
	Descripción de las figuras	68

Apéndice II-A

Coeficientes B_1^i	A-1
----------------------------	-----

Apéndice II-B

Deducción de la expresión general del término T_{lm}	B-1
--	-----

Apéndice II-C

Expresiones asintóticas de los factores de forma	C-1
--	-----

RESUMEN

En el primer capítulo estudiamos la ionización de la capa K de un átomo pesado por un proyectil liviano y lento, permitiéndole al estado inicial relajarse frente al potencial del proyectil. Se obtienen estimaciones generales de las transiciones monopolares y dipolares a estados del continuo, y del rango de parámetros de impacto que contribuyen primordialmente al proceso de ionización. La corrección a la energía de ligadura electrónica es ahora variable en el tiempo, y se muestra que produce una reducción en la probabilidad de ionización para pequeñas velocidades de colisión, mientras que a velocidades mayores la dependencia temporal de esa energía de unión puede aumentar la ionización de la capa K.

En el capítulo II estudiamos la dependencia con el parámetro de impacto de la pérdida de energía media y su fluctuación, de un proyectil que excita las capas internas del blanco, siendo el objetivo aplicarlo al caso en el cual éste viaja canalizado a través de un sólido cristalino. Encontramos que la sección eficaz diferencial de ionización admite una aproximación sencilla cuando la velocidad y el parámetro de impacto del proyectil son grandes comparados con la velocidad característica y el radio del orbital interno respectivamente, y que la transición dipolar es la predominante en tales casos. Efectuamos el cálculo para el sistema protón - Si, logrando un buen acuerdo con los datos experimentales al incluir la contribución de los electrones internos al frenamiento total.

ABSTRACT

In the first chapter we study the K-shell ionization of a heavy atom by a slow light ion by allowing the initial electron state to relax under the potential of the projectile. General estimates are given for monopole and dipole transitions to continuum states, and for the range of impact parameters that contribute most to the process. The correction to the electron binding is now time dependent, and we show that it produces a reduction of the ionization probability for small collision velocities, while at larger velocities the time dependence of the binding may enhance K-shell ionization.

In chapter II we study the dependence with impact parameter of the effect of inner shells excitation on the energy loss and straggling. Our aim is to apply this to the case of channelling. We find that the ionization probability may be approximated by a simple expression when the velocity and impact parameter of the projectile are large compared with the characteristic velocity and shell radius of the inner orbital respectively. We also find that the dipolar transition is predominant in these cases. We made the calculation for the system proton - Si, and the inclusion of the contribution of inner electrons to the total stopping allows a good agreement with observations.

CAPITULO I

EFFECTOS ADIABATICOS EN LOS PROCESOS DE IONIZACION DE CAPAS

INTERNAS POR PROYECTILES PESADOS

I-1 INTRODUCCION

La descripción de la ionización de la capa K de un átomo pesado por el impacto de un proyectil iónico puede hacerse a través de diversos modelos, dependiendo de la relación entre las cargas nucleares, y entre las velocidades del proyectil y del electrón.

En este trabajo consideramos colisiones muy asimétricas: $Z_1 \ll Z_2$, (índices 1 y 2 se refieren a proyectil y blanco respectivamente), lo cual nos permite tratar al proyectil como una carga desnuda en su interacción con el electrón. Este tipo de proceso se conoce como ionización coulombiana. Además nos interesan las colisiones lentas, determinadas por la relación:

$$V_1 \ll V_{2K} \quad (1-1)$$

donde usamos el sufijo K para identificar los parámetros relacionados con los electrones K. O sea, V_{2K} es la velocidad característica de éstos.

En la formulación semiclásica se encuentra¹ que los parámetros de impacto p que más contribuyen a la excitación de la capa K están dados por:

$$p \sim V_1 / \omega_{2K} \quad (1-2)$$

siendo:

$$\omega_{2K} = \Theta_K Z_2^2 / 2 \quad (1-3)$$

la energía de ligadura de dicha capa, Θ_K representa el carácter no hidrogénico del orbital. (Usamos unidades atómicas).

De (1-1) y (1-2) vemos que el proyectil debe penetrar mucho en el interior de la capa K para poder ionizarla:

$$\frac{p}{a_{2K}} = \frac{2 V_1}{\Theta_K Z_2} = \frac{2 V_1}{\Theta_K V_{2K}} \ll 1 \quad (1-4)$$

donde $a_{2K} = Z_2^{-1}$ es el radio de la capa. Consecuentemente la carga Z_1 permanece dentro de la misma un tiempo τ grande comparado con el período característico del electrón en su órbita:

$$\tau = \frac{a_{2K}}{V_1} \gg \omega_{2K}^{-1} \quad (1-5)$$

El estudio de la ionización de las capas internas ha sido realizado originalmente utilizando la primera aproximación de Born². La misma supone que los estados electrónicos inicial y final no son distorsionados por la presencia del proyectil, al cual considera como una partícula libre, despreciando la influencia del campo coulombiano del núcleo blanco. Cuando se utilizan funciones hidrogénicas para describir los estados electrónicos, la PWBA predice una forma universal para la sección eficaz total de ionización³ :

$$\frac{\sigma_K^{PWBA}}{\sigma_{0K}/\Theta_K} = F(\eta_K/\Theta_K^2) \quad (1-6)$$

donde

$$\sigma_{0K} = 8\pi \alpha_{2K}^2 (Z_1/Z_{2K})^2 \quad (1-7)$$

$$\eta_K = V_1^2/V_{2K}^2 \quad (1-8)$$

De la comparación con los resultados experimentales se concluye que las predicciones, tanto de universalidad como de las magnitudes de la sección eficaz, son erróneas. La teoría y el experimento difieren hasta un orden de magnitud cuando η_K disminuye por debajo de la unidad, sobreestimando siempre la teoría a la experiencia.

Existen dos efectos físicos que pueden explicar, al menos cualitativamente, estas discrepancias:

1º) La deflexión que sufre el proyectil en el campo del núcleo blanco, la cual impide una mayor penetración del mismo dentro de la capa K, disminuyendo así su capacidad de ionizarla. La acción del potencial internuclear en el movimiento de la carga Z_1 fué considerada primeramente por Bang y Hansteen¹, quienes introdujeron trayectorias hiperbólicas en la formulación semiclassical (SCA) de la colisión. En un tratamiento cuántico puede también tenerse en cuenta el campo del núcleo blanco a través de la aproximación de Born de la onda distorsionada, como ya lo hicieron Pauli y Trautmann⁴.

2º) La distorsión de los estados electrónicos puede ser importante. Si bien $Z_1 \ll Z_2$, y por lo tanto la perturbación producida por el proyectil es pequeña, el tiempo de colisión es mucho mayor que el tiempo de respuesta del electrón, pudiendo éste adaptarse adiabáticamente al potencial producido por ambas cargas,

Z_1 y Z_2 . Brandt, Laubert y Sellin⁵, y Basbas et al.³ introdujeron en la PWBA en una forma aproximada la corrección a la energía de ligadura del electrón por la presencia del proyectil. Evaluaron la misma en un primer orden de perturbaciones estacionarias, considerándola independiente de la coordenada internuclear R e igual al valor adoptado en la distancia de máximo acercamiento.

Andersen et al.⁶, usando un modelo hidrogénico para describir el átomo blanco, optimizaron el radio de la capa K minimizando la energía de ligadura; refiriéndose también al punto de máximo acercamiento.

Si deseamos tener en cuenta más correctamente la distorsión del orbital electrónico, debemos optimizar el radio de la capa K en cada punto de la trayectoria descrita por el proyectil. Andersen et al.⁶ sugieren que en tal caso la amplitud de transición resultará más grande respecto del caso de optimización en el punto de máximo acercamiento. Contrariamente, Basbas, Brandt y Ritchie⁷ concluyen que en la región de bajas velocidades la variación de la energía de ligadura a lo largo de la trayectoria puede disminuir la probabilidad de ionización.

Existe un tratamiento alternativo de la ionización de capas internas, propuesto por Kleber⁸. El mismo consiste en optimizar variacionalmente una función de onda que contiene parámetros complejos, pudiendo así describir aproximadamente procesos no adiabáticos. La probabilidad de excitación se obtiene directamente de su forma asintótica. En un procedimiento de este tipo no es fácil conocer la precisión de los resultados, y además se requiere un estudio previo para determinar la forma funcional apropiada de la función de prueba.

En este trabajo nosotros optimizamos el radio de la capa K en función de la distancia internuclear R . Esto es equivalente a aproximar los estados moleculares adiabáticos del electrón en el campo de Z_1 y Z_2 por un orbital atómico $1S$ con un radio óptimo. Esto constituye una buena representación debido a la relación existente entre las cargas, $Z_1 \ll Z_2$; y a la importancia de las distancias internucleares pequeñas para una excitación efectiva, como se vé de (1-4).

Dado que este tipo de corrección depende de R pero no de la trayectoria particular que se elija, consideramos por simplicidad una trayectoria rectilínea. Determinamos la amplitud de transición en un primer orden del cálculo de perturbaciones dependientes del tiempo. Rihan, Muller y Greiner⁹ mostraron que para el caso de colisiones lentas entre átomos pesados los términos de segundo orden pueden ser importantes. Nosotros encontramos que el tener en cuenta la energía de ligadura variable produce un cambio en los resultados de magnitud si-

milar, por lo cual este efecto debe ser considerado junto con las contribuciones de segundo orden en las colisiones de átomos muy pesados.

Encontramos finalmente que el uso de un radio variable disminuye la probabilidad de ionización respecto de considerarlo estático, en la región de velocidades muy pequeñas del proyectil.

En la sección I-2 presentamos el formalismo de la teoría de perturbaciones cuando se utiliza una base dependiente del tiempo, en I-3 obtenemos la condición (1-2) necesaria para que la probabilidad de transición sea apreciable, basándonos en la relación de incerteza energía - tiempo de interacción. En I-4 detallamos la optimización estática del radio de la capa K, y en I-5 obtenemos la amplitud de transición a los estados del continuo, los cuales están representados por ondas coulombianas en el campo de la carga nuclear optimizada. Mostramos que la contribución originada por la dependencia temporal del estado inicial es del mismo orden que la producida por el potencial del proyectil. En I-6 estimamos las amplitudes de transición a los estados s y p del continuo, encontrando que para velocidades y parámetros de impacto pequeños, la transición monopolar es la predominante.

Los detalles del cálculo de la probabilidad de ionización al estado $l = 0$ del continuo están contenidos en la sección I-7. En I-8 discutimos los resultados, y efectuamos una estimación analítica del rango de velocidades para las cuales la variación del radio de la capa K a lo largo de la trayectoria, produce una disminución en la probabilidad de ionización.

I-2 ECUACION DE SCHRODINGER

Consideramos cada electrón K como una partícula independiente que se mueve en el potencial coulombiano del núcleo blanco de carga Z_2 modificada para tener en cuenta el apantallamiento producido por el otro electrón. Esto es una buena descripción ya que para los electrones internos su interacción con el núcleo es la predominante. El efecto de los electrones externos se manifiesta solamente a través de la disminución en la energía de ligadura de la capa K, como se muestra en la relación (1-3). Los núcleos se consideran como partículas clásicas que describen una trayectoria rectilínea con velocidad constante. La evolución del sistema está dada por la ecuación de Schrodinger:

$$\left[H(\vec{r}, t) - i \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (2-1)$$

siendo:

$$H(\vec{r}, t) = - \frac{1}{2} \nabla_r^2 - \frac{Z_2}{r} - \frac{Z_1}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} \quad (2-2)$$

donde \vec{r} es la coordenada electrónica medida respecto del núcleo blanco.

A velocidades pequeñas la base natural para desarrollar $\Psi(\vec{r}, t)$ es el conjunto de estados moleculares adiabáticos, ya que en el límite $V_1 \rightarrow 0$ son soluciones exactas del sistema. Las transiciones entre los estados son entonces originadas por la dependencia temporal de la base, resultando, en primer orden en la velocidad, la siguiente amplitud de transición:

$$a_n = - \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \varphi_n(\vec{r}, t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_0(\vec{r}, t) \rangle e^{-i \int^t (\epsilon_n - \epsilon_0) dt'} \quad (2-3)$$

donde $\varphi_i(\vec{r}, t)$, $\epsilon_i(t)$ son los orbitales moleculares y sus energías.

Para colisiones muy asimétricas, el conjunto de orbitales atómicos independientes del tiempo constituye una base conveniente para desarrollar $\Psi(\vec{r}, t)$. En este caso el potencial coulombiano de interacción proyectil - electrón es el causante de las transiciones. En el formalismo usual de perturbaciones dependientes del tiempo puede obtenerse la amplitud de transición en primer orden ^{1,6}, pero con el uso de esta base se deja de lado la respuesta adiabática del e-

lectrón a la presencia del proyectil.

Nuestro objetivo es mejorar la descripción del proceso utilizando un conjunto de estados atómicos que contengan algunas características fundamentales de los orbitales moleculares. Para lograrlo introducimos una carga efectiva óptima dependiente del tiempo, con la cual las transiciones son producidas por la dependencia temporal de la base, y por el potencial perturbador actuante sobre los estados atómicos de la misma. Separamos por lo tanto, el Hamiltoniano total en dos partes:

$$H(\vec{r}, t) = H_0(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \quad (2-4)$$

siendo:

$$H_0(\vec{r}, t) = -\frac{1}{2} \nabla_r^2 - \frac{Z_1(t)}{r} \quad (2-5)$$

$$V(\vec{r}, t) = \frac{Z_2(t) - Z_1}{r} - \frac{Z_1}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} \quad (2-6)$$

y desarrollamos $\Psi(\vec{r}, t)$ en el conjunto de autoestados de (2-5):

$$[H_0(\vec{r}, t) - E_n(t)] \chi_n(\vec{r}, t) = 0 \quad (2-7)$$

donde $\chi_n(\vec{r}, t)$ son orbitales hidrogénicos correspondientes a una carga nuclear $Z(t)$. Reemplazando:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n(t) \chi_n(\vec{r}, t) e^{-i \int^t E_n(t') dt'} \quad (2-8)$$

en (2-1), obtenemos:

$$i \frac{da_n}{dt} = \sum_n a_n \langle \chi_n | V(\vec{r}, t) - i \frac{\partial}{\partial t} | \chi_n \rangle e^{i \int^t (E_n - E_n) dt'} \quad (2-9)$$

Empleando el desarrollo multipolar del potencial perturbador $V(\vec{r}, t)$:

$$V(\vec{r}, t) = \frac{Z_2(t) - Z_1}{r} - Z_1 \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_2^l}{r_2^{l+1}} Y_{lm}^*(\vec{R}) Y_{lm}(\vec{r}) \quad (2-10)$$

y utilizando la siguiente relación para reescribir el acoplamiento debido a la no adiabaticidad del proceso:

$$(E_k - E_n) \langle \chi_k | \frac{\partial}{\partial t} | \chi_n \rangle = \dot{Z} \langle \chi_k | \frac{1}{r} | \chi_n \rangle \quad (2-11)$$

con $\dot{Z}(t) = dZ / dt$

podemos escribir la amplitud de transición en primer orden, que resulta de reemplazar en (2-9) a_n por δ_{no} :

$$a_k(p, \infty) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt V_{ko}(p, t) e^{i \mathcal{E}_{ko}(p, t)} \quad (2-12)$$

donde

$$\mathcal{E}_{ko}(p, t) = \int^t dt' (E_k - E_o) \quad (2-13)$$

$$V_{ko}(p, t) = \langle \chi_k | V(\vec{r}, t) - i \frac{\dot{Z}}{r} (E_k - E_o) | \chi_o \rangle =$$

$$\langle \chi_k | \frac{Z(t) - Z_o - i \dot{Z} / (E_k - E_o)}{r} - Z_o \sum_{\ell m} \frac{4\pi}{2\ell+1} \frac{r_o^\ell}{r^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\vec{R}) Y_{\ell m}(\vec{r}) | \chi_o \rangle \quad (2-14)$$

Vemos de (2-14) que el uso de una carga variable con el tiempo se manifiesta solamente en la contribución monopolar de la excitación.

I-3 VALORES CARACTERISTICOS DE LOS PARAMETROS DE COLISION

Vamos a analizar la expresión integral (2-12) para averiguar bajo que condiciones la amplitud de transición es apreciable. Una importante contribución a la integral proviene de los valores de t para los cuales \mathcal{E}_{ko} es prácticamente constante, pero eso implica un pseudo cruce de los potenciales moleculares adiabáticos, lo cual no es posible en nuestro caso ya que la diferencia de energía entre los estados inicial y final nunca es pequeña. La otra posibilidad es que en el desarrollo de Fourier del elemento de matriz existan frecuencias tales que:

$$\omega \sim \frac{d\mathcal{E}_{ko}}{dt} = E_k - E_o \quad (3-1)$$

con lo cual es posible una cancelación aproximada de las dos fases en (2-12), dando así una contribución importante a $a_k(p, \infty)$. El orden de magnitud de las

frecuencias que originan una interferencia constructiva para reproducir la dependencia temporal del acoplamiento en la región de $t \sim t_m$ de máxima variación de $V_{k0}(t)$ es:

$$\omega \sim \frac{dV_{k0}/dt}{V_{k0}(t_m)} \quad (3-2)$$

Del comportamiento de $Z(t)$, y de (2-14) podemos inferir que V_{k0} se anula para $R = 0$; para $R \gg a_{2k}$ tiende a 0 al menos como R^{-1} , y adopta su máximo valor para R del orden de a_{2k} . Luego podemos suponer que para valores de R menores que a_{2k} , el acoplamiento de (2-12) puede representarse por un desarrollo en potencias positivas de R . De esta forma el orden de magnitud de (3-2) resulta, considerando una trayectoria rectilínea:

$$\omega \sim \frac{dR/dt}{R} \sim \frac{v(R^2 - p^2)^{1/2}}{R^2} \quad (3-3)$$

Con lo cual los parámetros de impacto que contribuyen apreciablemente a la excitación resultan del orden de

$$p \sim \frac{v}{\omega} \sim \frac{v}{E_0 - E_k} \quad (3-4)$$

Hemos obtenido así la condición propuesta por Bang y Hansteen¹ para la ionización de la capa K, basándonos en la relación de incerteza entre el tiempo de interacción y la energía del electrón. La variación en el tiempo de la perturbación está relacionada con el ancho del nivel energético del electrón, el cual a su vez debe ser del orden del salto en energía entre el estado inicial y el final para que la transición ocurra con probabilidad apreciable.

I-4 OPTIMIZACION DEL RADIO DE LA CAPA K

El electrón K está descripto por una función de onda hidrogénica 1s con una carga efectiva $Z(t)$:

$$\chi_0(\vec{r}, t) = \frac{Z(t)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-Z(t)r} \quad (4-1)$$

La energía de ligadura de este orbital considerando el potencial provisto por las

cargas Z_1 y Z_2 resulta:

$$E_0(t) = \langle \chi_0 | H(\vec{r}, t) | \chi_0 \rangle \quad (4-2)$$

donde $H(\vec{r}, t)$ está dado por (2-2).

Si además tenemos en cuenta el efecto de los electrones externos, $E_0(t)$ responde a la siguiente expresión:

$$E_0(t) = \frac{Z(t)^2}{2} - Z_2 Z(t) - \frac{Z_1}{R} + Z_1 (1 + Z(t) R) \frac{e^{-2Z(t)R}}{R} + (1 - \Theta_k) \frac{(Z_1 + Z_2)^2}{2} \quad (4-3)$$

Los primeros dos términos representan las energías cinética y potencial en el campo del núcleo blanco, los dos siguientes corresponden a la corrección debido a la presencia de la carga Z_1 , y el último es el apantallamiento debido a los electrones externos, evaluado en el límite de átomo unido dado que los valores de R que interesan son pequeños respecto de a_{2k} .

Minimizando $E_0(t)$ respecto de $Z(t)$, obtenemos:

$$Z(t) (1 - 2Z_1 R e^{-2Z(t)R}) - Z_2 - Z_1 e^{-2Z(t)R} = 0 \quad (4-4)$$

De (4-4) vemos que $Z(t)$ tiende a Z_2 para R grandes, y a $Z_1 + Z_2$ en el límite de átomos unidos ($R \rightarrow 0$).

I-5 AMPLITUD DE TRANSICION

Para evaluar la amplitud de ionización, dada por (2-12), debemos considerar como estado final del electrón, el estado del continuo hidrogénico correspondiente a una carga nuclear $Z(t)$. Esto es lo correcto, ya que se requiere una buena descripción del estado final en la zona donde la superposición con el inicial es apreciable, y esto es posible cuando se utilizan los elementos de la misma base. De esta forma consideramos el mismo potencial distorsionante en el canal final y en el inicial.

Cada onda parcial del estado del continuo responde a la siguiente expresión:

$$\chi_{k\ell m}(\vec{r}, t) = (-i)^\ell \frac{4\pi}{kr} F_\ell(\eta, kr) Y_{\ell m}(\hat{k}) Y_{\ell m}(\hat{r}) \quad (5-1)$$

donde:

$$F_{\ell}(\eta, kr) = N_{k\ell} e^{-ikr} (2kr)^{\ell+1} {}_1F_1[\ell+1+i\eta, 2\ell+2, 2ikr] \quad (5-2)$$

con

$$N_{k\ell} = e^{\eta\pi/2} \frac{\Gamma(\ell+1-i\eta)}{2(2\ell+1)!} \quad (5-3)$$

Utilizando el desarrollo en potencias de r de la función hipergeométrica confluente¹⁰:

$${}_1F_1[\ell+1+i\eta, 2\ell+2, 2ikr] = \frac{\Gamma(2\ell+2)}{\Gamma(\ell+1-i\eta)} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\ell+1-i\eta+s)}{\Gamma(2\ell+2+s)} \frac{(2ikr)^s}{s!} \quad (5-4)$$

podemos reescribir (5-2):

$$F_{\ell}(\eta, kr) = N_{k\ell} e^{-ikr} \sum_{s=\ell+1}^{\infty} A_{s-\ell-1}(\eta) i^{s-\ell-1} (2kr)^s \quad (5-5)$$

Mostraremos en la siguiente sección que para velocidades más pequeñas que la característica del electrón K, y para parámetros de impacto menores que a_{2k} , la transición monopolar es la predominante. Las transiciones al estado s del continuo son originadas por el acoplamiento:

$$M_{k00}(p,t) = \langle \chi_{k00} | \frac{Z(t) - Z_2 - iZ/(E_k - E_0)}{r} - \frac{Z_1 \Theta(r-R)}{r} - \frac{Z_1 \Theta(R-r)}{R} | \chi_0 \rangle \quad (5-6)$$

donde Θ es la función escalón.

Para valores de R mucho menores que a_{2k} , obtenemos de (4-4) el siguiente desarrollo en potencias de R para Z(t):

$$Z(t) \sim Z_1 + Z_2 - 2Z_1(Z_1 + Z_2)^2 R^2 + \mathcal{O}(R^3) \quad (5-7)$$

que reemplazado en (5-6) dá lugar al siguiente desarrollo para el acoplamiento:

$$M_{k00}(p,t) = A_2(ZR)^2 + A_3(ZR)^3 + \mathcal{O}[(ZR)^4] \quad (5-8)$$

los coeficientes A_i son independientes de Z en el límite $k \ll Z$, que son los valores de k que contribuyen principalmente al proceso de ionización. La expresión (5-8) confirma lo ya supuesto en la sección (I-3).

Si reemplazamos en (5-6) Z(t) por su límite de átomo unido, obtenemos:

$$M_{k00}(p, t) = \langle \chi_{k00} | Z, \Theta(R-n) \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right] | \chi_0 \rangle \quad (5-9)$$

Vemos así que los términos adicionales que aparecen en (5-6) son del mismo orden que los de (5-9), con lo cual concluimos que el uso de una base dependiente del tiempo puede introducir correcciones apreciables al cálculo ya existente.

I-6 CONTRIBUCIONES MONOPOLAR Y DIPOLAR A LA AMPLITUD DE TRANSICION

Dado que nos interesa solamente estimar el orden de magnitud de ambas contribuciones, consideramos el caso de parámetro de impacto nulo para facilitar la integración en el tiempo. Reemplazando el desarrollo (5-8) en (2-12) y dado que el cambio relativo en la energía de ligadura a lo largo de la trayectoria es del orden de Z_1 / Z_2 , consideramos ξ_{k0} como una función lineal del tiempo, lo cual es una buena aproximación para $z_1 \ll Z_2$, resultando así la amplitud de transición monopolar:

$$a_{k00}(p \sim 0) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{v} [A_2(z|x|)^2 + A_3(z|x|)^3] e^{-i\beta x} \quad (6-1)$$

siendo $x = vt$ y $\beta \sim Z^2 / v$

Para resolver (6-1) introducimos un factor de convergencia $e^{-\delta|x|}$. Es interesante notar que el desarrollo (5-8) es equivalente a una serie del mismo tipo multiplicada por $e^{-z|x|}$, por lo cual con $\delta \sim Z$ respetamos el desarrollo de M_{k00} . Considerando en la siguiente expresión general $n = 2p+q$, donde q adopta los valores 0 ó 1 según n sea par o impar respectivamente:

$$\begin{aligned} -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{v} A_n(z|x|)^n \cos(\beta x) e^{-\delta|x|} &= -i \frac{A_n}{v} \frac{n! z^n}{(\beta^2 + \delta^2)^{\frac{n+1}{2}}} \cos[(n+1) \tan^{-1}(\beta/\delta)] \\ &\sim A_n Z^{-2} (v/Z)^{2p+1} (\delta/Z)^{1-q} \end{aligned} \quad (6-2)$$

Utilizando (6-2), para $\delta \ll Z$, obtenemos el orden de a_{k00} , dado por:

$$a_{k00}(p \sim 0) \sim A_3 Z^{-2} (v/Z)^3 \quad (6-3)$$

Analicemos ahora las transiciones a los estados p del continuo, las cuales están determinadas por la siguiente matriz de acoplamiento:

$$M_{k1m} = -Y_{1m}(\ddot{R}) \frac{4\pi Z}{3} \langle \chi_{k1m} | \left[\frac{r \cdot \mathcal{O}(R-r)}{R^2} + \frac{R \cdot \mathcal{O}(r-R)}{r^2} \right] Y_{1m}(\ddot{r}) | \chi_0 \rangle \quad (6-4)$$

Utilizando el desarrollo (5-2) para χ_{k1m} , (6-4) puede escribirse como una serie de potencias positivas de R :

$$M_{k1m} = Y_{1m}(\ddot{R}) \left[B_1(ZR) + B_3(ZR)^3 + B_4(ZR)^4 + \mathcal{O}[(ZR)^5] \right] \quad (6-5)$$

donde los coeficientes B_i son también independientes de Z en el límite $k \ll Z$.

El cálculo de la amplitud de transición involucra una integración similar a la (6-1), en el límite $p \rightarrow 0$, pero en este caso, debido a la ausencia del término cuadrático en (6-5), el factor de convergencia $e^{-\gamma|x|}$ es válido sólo considerando $\gamma \ll Z$. Para $m = 1$ el resultado de la integral en el tiempo corresponde al dado en (6-2), pero con un factor Zp introducido a través del armónico esférico $Y_{11}(R) \sim p/R$, siendo por lo tanto el orden de esta transición:

$$a_{k11}(p \sim 0) \sim B_4(Zp) Z^{-2} (v/Z)^3 \quad (6-6)$$

Para $m = 0$ el armónico $Y_{10}(R) \sim x/R$ introduce un factor asimétrico en el integrando de (2-12), luego la contribución proviene de la función seno de la fase $e^{i\epsilon_{R0}}$

$$-i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{v} B_n(Z|x|)^n \sin(\beta x) e^{-\gamma|x|} = -i \frac{B_n Z^n}{v} \frac{n!}{(\beta^2 + \gamma^2)^{\frac{n+1}{2}}} \sin[(n+1) \tan^{-1}(\beta/\gamma)]$$

$$\sim B_n Z^{-2} (v/Z)^{n+1} (\gamma/Z)^1 \quad (6-7)$$

Utilizando el resultado (6-7) obtenemos para a_{k10} :

$$a_{k10}(p \sim 0) \sim B_4 Z^{-2} (v/Z)^4 \quad (6-8)$$

De (6-3), (6-6) y (6-8) vemos que la transición dipolar es un factor v/Z pZ más pequeña que la monopolar en la región de $v < Z$ y $p < Z^{-1}$, y para pequeñas transferencias de impulso k al electrón eyectado. Un proyectil

lento debe penetrar mucho dentro de la capa K del blanco para producir una perturbación apreciable, y la misma originará una población importante en aquellos estados finales con una densidad electrónica grande en la región próxima al estado inicial, que son los estados s del continuo.

Las expresiones (6-2) y (6-7) nos muestran otra condición para que la amplitud de transición sea apreciable: la dependencia en la coordenada R del acoplamiento debe producir interferencias constructivas de las contribuciones sumadas a lo largo de la trayectoria. Si hubiésemos considerado Z_2 en lugar de $Z(t)$, el acoplamiento presentaría un término en $(ZR)^0$ que no da contribución a $a_{k00}(p)$ pues su integración a lo largo de la trayectoria se anula, como se vé de (6-2) para $\gamma \rightarrow 0$. Luego el límite de átomo unido modifica la amplitud de transición pero conserva su orden de magnitud dado por (6-3).

El resultado (6-3) puede derivarse de la expresión (3-12) obtenida por Bang y Hansteen¹ para la sección eficaz diferencial, considerando trayectoria rectilínea, y en el límite de $p \rightarrow 0$ y $k \ll Z$.

I-7 CALCULO DE LA PROBABILIDAD DE IONIZACION

Incluimos en la misma solo la transición al estado s del continuo, ya que como demostramos anteriormente es la más importante a velocidades pequeñas del proyectil. La expresión (5-1) del estado final afectada de un factor $(2\pi)^{-3/2}$ resulta normalizada en la escala de impulsos k , luego la probabilidad de ionización al estado s del continuo, para un dado parámetro de impacto p resulta:

$$I_p = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} |a_{k00}(p)|^2 \quad (7-1)$$

Donde el factor 2 tiene en cuenta la presencia de los 2 electrones de la capa K. La expresión de $a_{k00}(p)$ es:

$$a_{k00}(p) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt M_{k00}(p,t) e^{i \int^t (E_k - E_0) dt'} \quad (7-2)$$

con $E_0(t)$ dado por (4-3) y $Z(t)$ determinado de la ecuación (4-4). El acoplamiento $M_{k00}(p,t)$ dado por (5-6) se resuelve analíticamente, resultando la siguiente expresión:

$$M_{k00}(p,t) = -i 8\pi N_0 N_{k0} \left\{ \frac{(Z-ik)^{i\eta-1}}{(Z+ik)^{i\eta+1}} \left[Z(t) - Z_2 - i \dot{Z}/(E_k - E_0) \right] + Z_1 e^{-(Z-ik)R} S_k(R;Z) \right\} \quad (7-3)$$

donde

$$N_0 = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \quad N_{k0} = \frac{e^{\eta\pi/2}}{2} \Gamma(1-i\eta) \quad (7-4)$$

y $S_k(R,Z)$ está dado por:

$$S_k(R,Z) = \sum_{m=1}^{\infty} A_{m-1}^*(\eta) (-zik)^{m-1} \left\{ \sum_{s=0}^{m+1} \frac{(m+1)!}{s!} \frac{R^{s-1}}{(Z-ik)^{m+2-s}} - \sum_{s=0}^m \frac{m!}{s!} \frac{R^s}{(Z-ik)^{m+1-s}} \right\} \quad (7-5)$$

Para mostrar la dependencia en R de M_{k00} , es conveniente reescribir (7-5) de la siguiente forma:

$$S_k(R,Z) = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{[R(Z-ik)]^s}{s!} \sum_{m=1}^{s-1} A_{m-1}^*(\eta) (-zik)^{m-1} \frac{m!}{(Z-ik)^{m+1}} - R^{-1} \sum_{s=3}^{\infty} \frac{[R(Z-ik)]^s}{s!} \sum_{m=1}^{s-1} A_{m-1}^*(\eta) (-zik)^{m-1} \frac{(m+1)!}{(Z-ik)^{m+2}} - \frac{(Z-ik)^{1+i\eta}}{(Z+ik)} \frac{1}{(Z-ik)^2} \quad (7-6)$$

Para R pequeños, teniendo en cuenta que $N_0 N_{k0}$ es del orden de Z^2 , y que $Z(t) \sim Z_1 + Z_2$, de manera que el término $(ZR)^0$ se cancela en (7-3), recuperamos el desarrollo (5-8) de M_{k00} .

I-8 RESULTADOS

Integrando numéricamente a lo largo de la trayectoria en (7-2) obtenemos $a_{k00}(p)$, cuyo módulo cuadrado integramos luego sobre los posibles impulsos \vec{k} transferidos al electrón para obtener la probabilidad de ionización. Efectuamos el cálculo considerando la carga $Z(t)$ optimizada para cada valor de R , y también consideramos el valor de Z en el punto de máximo acercamiento ($R = p$), con lo cual reproducimos los resultados de Andersen et al⁶. Comparando ambos cálculos podemos verificar la precisión de la aproximación de energía de ligadura constante a lo largo de la trayectoria.

En las figuras (I-1) y (I-2) mostramos las probabilidades de ionización en función del parámetro de impacto para distintos energías incidentes de Hidrógeno y Carbón como proyectiles, incidiendo sobre un blanco de Cobre. En ellas se observa que existe una región de velocidades para las cuales el cálculo utilizando $Z(t)$ resulta apreciablemente menor que el correspondiente con $Z(p)$. Estos resultados confirman las conclusiones de Basbas et al⁷ sobre la influencia de la carga variable en la probabilidad de ionización a bajas energías. De un análisis numérico comprobamos que la diferencia entre ambos resultados proviene fundamentalmente de las energías de ligadura consideradas en cada caso, $E_0[Z(t)]$ y $E_0[Z(p)]$, ya que el efecto producido al cambiar $Z(p)$ por $Z(t)$ en la forma funcional de los estados inicial y final es despreciable.

Podemos obtener en forma aproximada un resultado analítico para $a_{k00}(p)$, y luego estimar la región de velocidades para las cuales el uso de una carga variable disminuye la probabilidad de ionización. Para esto, consideramos el límite de $p \rightarrow 0$ y aproximamos $E_0(t)$ por los dos primeros términos del desarrollo de (4-3) alrededor del punto de máximo acercamiento. De esta manera, la fase en (7-2) resulta:

$$E_{k00}(p,t) \sim E_{k0} \frac{x}{v} + \beta \frac{x^3}{v} \quad (8-1)$$

donde

$$E_{k0} = E_0[Z(0)] - E_k \quad \beta = -\frac{4Z_1(Z_1 + Z_2)^3}{3} \quad (8-2)$$

Teniendo en cuenta que las transiciones ocurren para valores de $R \sim v / Z^2$, el orden del último término de (8-1) es:

$$\frac{\beta x^3}{v} \sim \frac{Z_1 Z^3}{v} \frac{v^3}{Z^6} \sim \left(\frac{Z_1}{Z}\right) \left(\frac{v}{Z}\right)^2 \ll 1 \quad (8-3)$$

Con lo cual podemos desarrollar $e^{i \epsilon_{k0}(p,t)}$ de la siguiente forma:

$$e^{i \epsilon_{k0}(p,t)} \sim e^{i \epsilon_{k0} x/v} \left[1 + i \frac{\beta x^3}{v} + \mathcal{O}\left(\frac{\beta^2 x^6}{v^2}\right) \right] \quad (8-4)$$

Reemplazando (8-4) en (7-2), obtenemos para la amplitud de ionización $a_{k00}(p \rightarrow 0)$:

$$a_{k00}(p \rightarrow 0) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt M_{k00}(p \rightarrow 0, t) e^{i \epsilon_{k0} x/v} \left[1 + i \frac{\beta x^3}{v} \right] \quad (8-5)$$

De acuerdo a (6-2), (6-7), (7-3) y (7-6) vemos que para valores pequeños de R , la principal contribución proviene del término en R^2 de $S_k(R, Z)$ (en este caso el factor de convergencia $e^{-\nu |k|}$ coincide con $e^{-Z |k|}$), por lo tanto podemos escribir (8-5) en este límite de $p \rightarrow 0$:

$$a_{k00}(p \rightarrow 0) = -Z_1 \delta \pi N_0 N_{k0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{v} e^{-(Z-i k) |x|} \frac{|x|^2}{6} e^{i \epsilon_{k0} x/v} \left[1 + i \frac{\beta x^3}{v} \right] \quad (8-6)$$

Resolviendo integrales en (8-6) utilizando los resultados exactos de (6-2) y (6-7), obtenemos el siguiente rango de velocidades para el cual el uso de una energía variable reduce la probabilidad de ionización respecto de la calculada con la misma evaluada en el punto de máximo acercamiento:

$$0 < \frac{v}{Z} < \frac{1}{2\sqrt{3}} \quad (8-7)$$

Según los resultados numéricos, como se muestra en las figuras (I-1) y (I-2), esta disminución ocurre en un rango de velocidades algo menor que el predicho por (8-7).

I-9 CONCLUSIONES

Hemos estudiado la probabilidad de ionización de un electrón K que interactúa con un proyectil lento que viaja según una trayectoria rectilínea. El objetivo era determinar las correcciones introducidas por el uso de una base dependiente del tiempo para describir los estados electrónicos, contemplando así la respuesta adiabática del electrón a la presencia de la carga.

A velocidades pequeñas las transiciones ocurren mientras el proyectil está en el interior de la capa. Por lo tanto se requiere una buena descripción de los estados electrónicos en dicha región, lo cual justifica el tratamiento de los electrones K como partículas independientes. Además para distancias internucleares mucho menores que el radio de la capa K, los orbitales atómicos con carga nuclear variable representan una muy buena aproximación de los orbitales moleculares, en este tipo de colisiones muy asimétricas. El potencial coulombiano del proyectil y la dependencia temporal de la base no perturbada son los causantes de las transiciones.

Estimamos el orden de magnitud de los parámetros de impacto que contribuyen apreciablemente a la ionización, basándonos en el siguiente hecho: la perturbación debe cambiar en el tiempo lo suficientemente rápido como para originar una incerteza en la energía que posibilite al electrón alcanzar los estados finales. Recuperamos así la relación sugerida por otros autores^{1,11}.

En una forma analítica aproximada mostramos que la transición monopolar es la predominante a velocidades pequeñas de la colisión.

Encontramos que el uso de una carga variable optimizada a lo largo de la trayectoria disminuye la probabilidad de ionización a velocidades suficientemente bajas, y estimamos analíticamente el rango de las mismas. Estos resultados confirman las predicciones de Basbas et al.⁷, quienes estiman en forma cualitativa la influencia de la energía de ligadura variable sobre la probabilidad de ionización. Y también son consistentes con las mediciones de la sección eficaz de ionización de la capa K del níquel por el impacto de carbón^{12,13,14}, las cuales se sitúan debajo de la curva teórica que considera la energía evaluada en el límite de átomo unido, a velocidades pequeñas del proyectil.

Nuestros resultados también muestran que a velocidades más altas, el cálculo utilizando energía de ligadura variable produce un aumento en la probabilidad respecto del cálculo que la considera estática.

Por lo tanto, en general, el signo de la corrección introducida por una energía de ligadura variable depende de las interferencias entre las distintas contribuciones a la amplitud de transición sumadas a lo largo de la trayectoria, las cuales a su vez son dependientes de la velocidad de colisión.

CAPITULO II

ENERGIA MEDIA TRANSFERIDA A ELECTRONES INTERNOS POR PROYECTILES
CANALIZADOS, Y SU FLUCTUACION

II-1 INTRODUCCION

Cuando una partícula cargada viaja a través de materia compuesta de átomos más pesados que ella, pierde energía debido principalmente a sucesivas colisiones inelásticas con los electrones atómicos. El valor medio de la energía perdida y su desviación cuadrática media han sido motivo de numerosos estudios, comenzados ya en el año 1913 con un tratamiento clásico realizado por Niels Bohr¹⁵ para describir la pérdida de energía de partículas rápidas. Posteriormente Bethe¹⁶ utilizó la formulación mecánico - cuántica para estimar el frenamiento de proyectiles rápidos no relativistas en blancos amorfos, basándose en una sección eficaz de excitación evaluada en la primera aproximación de Born. Un estudio cuidadoso de los límites de validez de la fórmula de Bethe, y su extensión al caso de proyectiles relativistas, mediante la inclusión del campo magnético generado por los mismos, se encuentra en el trabajo de Fano¹⁷ del año 1963.

Cuando la partícula se mueve a través de un sólido cristalino vé un mar de electrones de valencia y conducción distribuidos con una densidad casi uniforme a lo largo del cristal, luego la transferencia de energía a los mismos prácticamente no depende de la trayectoria que sigue dicha partícula. Esta también excita electrones del carozo atómico, siendo sí estas excitaciones fuertemente dependientes de la posición del proyectil. La respuesta de un gas de electrones al paso de una partícula cargada ha sido tratado por Lindhard¹⁸ en términos de la constante dieléctrica compleja del medio. La inhomogeneidad en la distribución espacial de los electrones de valencia fue tomada en cuenta por Bohm y Pines¹⁹, quienes consideran separadamente las contribuciones de las excitaciones colectivas y las individuales al frenamiento por un gas de electrones. El análisis de la dependencia con el parámetro de impacto del proyectil, de la transferencia de energía a los electrones internos de un átomo, ha sido realizado a través de diversos modelos, siendo uno de los más conocidos el que considera al electrón ligado armónicamente y perturbado por una fuerza uniforme. Tanto el tratamiento clásico²⁰ como el cuántico²¹ de este modelo conducen al mismo resultado. Datz²² y Dettmann²³ obtienen expresiones análogas a la predicha por el modelo del oscilador, siguiendo formalismos cuánticos para describir el proceso colisionante e introduciendo una energía media de excitación que les permite evaluar rápidamente la contribución de todos los estados finales posibles del electrón.

Estos resultados son válidos solamente para proyectiles cuyas velocidades iniciales son grandes comparadas con la velocidad característica del electrón.

Nosotros realizamos un estudio detallado de la dependencia con el parámetro de impacto de la energía media perdida y su fluctuación, de un proyectil que excita electrones de las capas internas de un átomo, utilizando la aproximación semiclásica para evaluar las amplitudes de transición. Aplicamos nuestros resultados al caso concreto de protones canalizados en silicio. El cálculo desarrollado, válido sólo para proyectiles no relativistas, utiliza funciones hidrogénicas para describir los estados inicial y final, modificadas para tener en cuenta el apantallamiento producido por los demás electrones, dependiendo por lo tanto la confiabilidad del mismo de cuán buena sea esta descripción. Nuestro formalismo, si bien requiere un cálculo numérico simple en los casos de interés, evita recurrir a la aplicación de reglas de suma basadas en la relación de clausura, que son solo justificables para el caso del átomo de Hidrógeno como blanco en cuestión.

En la sección II-2 escribimos la expresión de la amplitud de excitación en aproximación semiclásica, que resulta cuando se desarrolla la función de onda total del sistema en los estados no perturbados del blanco. Esta base es una buena elección para el caso de colisiones distantes. En II-3 discutimos principalmente la modificación de la función de onda del continuo hidrogénico para tener en cuenta el apantallamiento producido por los electrones externos del átomo blanco. El cálculo en detalle de las amplitudes de transición, considerando las capas K y L como estados iniciales, está contenido en la sección II-4, junto con los apéndices II-A y II-B. Encontramos una expresión general con un conjunto de parámetros que caracterizan las distintas transiciones posibles. En II-5 mostramos que la amplitud de transición admite una aproximación sencilla para el caso de proyectiles distantes y veloces, asegurando las 2 condiciones de validez de la misma una rápida convergencia de la suma sobre todos los estados l, m del continuo. Verificamos además en forma cualitativa que la transición dipolar es la más importante. En la sección II-6 efectuamos el cálculo explícito de estas expresiones aproximadas para la sección eficaz doble diferencial, comprobando cuantitativamente lo predicho ya en la sección anterior. En II-7 analizamos la dependencia con la energía transferida de la sección eficaz aproximada para el caso de colisiones rápidas y distantes, y encontramos que la principal contribución

al frenamiento del proyectil proviene de aquellas colisiones que involucran una transferencia de energía próxima al valor mínimo posible. En II-8 mostramos una forma alternativa para derivar las mismas expresiones aproximadas de la sección II-5. En este tipo de formalismo la transición dipolar queda identificada con la originada por la acción de una fuerza uniforme sobre el átomo, pero el mismo no permite determinar el rango de velocidades del proyectil para el cual es válida la aproximación. En la sección II-9 realizamos la integración analítica en parámetro de impacto de la sección eficaz diferencial, y calculamos la pérdida de energía media y su fluctuación para proyectiles muy veloces respecto de los electrones internos. La dependencia con la velocidad resulta la misma para $\langle \Delta E \rangle$ y $\langle \Omega^2 \rangle$, siendo del tipo $v^{-2} \ln(av)$. Encontramos también que extrapolando el parámetro de impacto mínimo al valor del radio de la capa, estas expresiones resultan equivalentes a las obtenidas cuando uno considera solamente las colisiones débiles en un cálculo en primera aproximación de Born. En II-10 mostramos y discutimos los resultados obtenidos y analizamos también la relación existente entre los mismos y los correspondientes al modelo del oscilador.

II-2 LIMITES DE VALIDEZ DE LA APROXIMACION SEMICLASICA. AMPLITUD DE TRANSICION.

La aproximación semiclásica describe al blanco cuánticamente, y al proyectil como una partícula clásica que viaja según una trayectoria perfectamente definida. La condición para que esto último sea válido es que la longitud de onda λ asociada al proyectil sea mucho menor que la distancia para la cual el potencial de interacción varía apreciablemente, siendo ésta del orden del parámetro de impacto p :

$$(Mv)^{-1} \ll p \quad (2-1)$$

donde M es la masa del proyectil, y v su velocidad inicial.

Para proyectiles muy rápidos respecto de la velocidad característica del electrón, el concepto de trayectoria sigue siendo perfectamente válido, pero en tal caso no es posible hablar de una deflexión bien definida de los mismos, ya que ésta se encuentra dentro del error determinado por el principio de incertidumbre²⁴. Con la aproximación de trayectoria rectilínea, para el caso de un proyectil rápido y distante, se deja de lado las pequeñas dispersiones angulares sufridas por éste, lo cual no introduce un error apreciable en el cálculo de la dependencia de la amplitud de transición con la posición de la partícula.

En primer orden de un cálculo perturbativo dependiente del tiempo, se obtiene la siguiente expresión para la amplitud de transición de un estado inicial $\varphi_0(r)$ a uno final $\varphi_n(r)$, por la acción del potencial perturbador $V(\vec{r}, t)$ (ver capítulo I):

$$a_n(p, \infty) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \varphi_n | V(\vec{r}, t) | \varphi_0 \rangle e^{i \omega_{n0} t} \quad (2-2)$$

donde $\omega_{n0} = \epsilon_n - \epsilon_0$ es la diferencia entre las energías de los estados final e inicial respectivamente.

La modificación de la energía del estado inicial a lo largo de la trayectoria del proyectil, tal como se estudió en el capítulo anterior, produce un efecto despreciable en la evaluación de $a_n(p, \infty)$ en los casos donde el proyectil pasa muy lejos. Esta es justamente la situación de uno canalizado en un cristal, cuyo parámetro de impacto es del orden del radio del canal.

II-3 DESCRIPCION DE LOS ESTADOS ELECTRONICOS

El uso de funciones hidrogénicas para describir los estados discretos de un átomo con muchos electrones es una buena aproximación para aquellos muy ligados, donde la interacción electrón - núcleo es mucho más fuerte que la existente con los demás electrones.

Para los estados iniciales (capas K y L) usamos funciones hidrogénicas con la carga nuclear efectiva para cada caso, con lo cual tenemos en cuenta el apantallamiento originado por los otros electrones de la misma capa. Estos son $\beta_K = Z_2 - 0.3$, $\beta_L = Z_2 - 4.15$

Para describir los estados de ionización de átomos multielectrónicos, que constituyen la principal contribución al cálculo de la energía media perdida y su fluctuación, utilizamos estados del continuo correspondientes al potencial coulombiano desplazado en un valor constante positivo dado por la diferencia entre el umbral de ionización hidrogénico y el real. Este potencial se aproxima satisfactoriamente al de Hartree - Fock en la zona interior del átomo. Los estados del continuo próximos al umbral real resultan estados con energías negativas. Los mismos se obtienen como una prolongación de la onda coulombiana a valores imaginarios del impulso final \vec{k} del electrón eyectado, cambiando además el factor de normalización $(1 - e^{-2\pi/k})^{-1}$ por la unidad. Estas funciones no tienen un comportamiento asintótico correcto, ya que para $r \rightarrow \infty$ divergen exponencialmente. Esto debido a que el término $e^{ikr} F_1[1+i\pi, 2i, 2ikr]$ se comporta para r grandes como $e^{i\pi r}$ cuando k adopta un valor imaginario.

Pero en la región de valores de r donde la superposición con el estado inicial es importante, dichas funciones constituyen una buena representación del continuo del átomo real. Las mismas, conocidas como funciones hidrogénicas modificadas, han sido utilizadas por Merzbacher y Lewis², y por Walske²⁵ en el cálculo de la sección eficaz de ionización en primera aproximación de Born.

Para la capa L como estado inicial, donde la zona de superposición apreciable con el estado final se extiende a valores de la coordenada electrónica más grandes que en el caso de la capa K, los resultados no son tan satisfactorios, pero se comprueba que siempre son mejores que los obtenidos con funciones hidrogénicas puras²⁶.

Nosotros incluimos los estados discretos desocupados como una prolongación del espectro continuo. La onda coulombiana con impulso \vec{k} imaginario

y el cambio de normalización indicado anteriormente, es una buena aproximación de los estados de Rydberg de un átomo hidrogenico en las regiones próximas al estado inicial.

II-4 DESARROLLO DEL CALCULO PARA LAS CAPA K Y L COMO ESTADOS INICIALES

Para el estado final consideramos la siguiente expansión en ondas parciales de la función del continuo hidrogenica:

$$\varphi_R(\vec{r}) = \frac{4\pi}{kr} \sum_{l,m} i^{-l} e^{-i\sigma_l(\eta)} F_l(\eta, kr) Y_{lm}(\vec{k}) Y_{lm}^*(\vec{r}) \quad (4-1)$$

donde

\vec{k} : impulso del electrón eyectado.

$\eta = \beta / k$ siendo β la carga efectiva.

$$\sigma_l(\eta) = \arg \Gamma(1+l+i\eta) \quad (4-2)$$

$$F_l(\eta, kr) = C_l(\eta) (kr)^{l+1} e^{-ikr} {}_1F_1[l+1+i\eta, 2l+2, 2ikr]$$

$$C_l(\eta) = 2^l e^{\pi\eta/2} |\Gamma(l+1+i\eta)| / (2l+1)!$$

La expresión (4-1) dividida por un factor $(2\pi)^{3/2}$ corresponde a la función de onda normalizada en la escala de impulsos \vec{k} ^{27,28}.

El potencial perturbador es el potencial coulombiano de interacción entre el proyectil de carga Z_1 y el electrón del blanco de carga Z_2 :

$$V(\vec{r}, t) = - \frac{Z_2}{|\vec{R} - \vec{r}|} \quad (4-3)$$

donde \vec{R} es la distancia entre el proyectil y el núcleo blanco, y \vec{r} la coordenada electrónica medida respecto de este último. Utilizaremos el desarrollo multipolar del potencial, dado por:

$$V(\vec{r}, t) = -Z_2 \sum_{l,m'} \frac{4\pi}{(2l+1)} \frac{r_2^l}{r_1^{l+1}} Y_{l,m'}(\vec{r}) Y_{l,m'}^*(\vec{R}) \quad (4-4)$$

4-a) Estado inicial: capa K

Representamos este estado por la función hidrogenica 1s:

$$\varphi_0(\vec{r}) = 2\beta^{3/2} e^{-\beta r} Y_{00}(\vec{r}) \quad (4-5)$$

siendo $\beta = Z_2 - 0.3$

Reemplazando en la expresión (2-2) de la amplitud de ionización, las expresiones (4-5) y (4-1) de los estados inicial y final respectivamente, y el desarrollo multipolar (4-4) del potencial $V(\vec{r}, t)$, obtenemos:

$$a_k^{100} = -i \sum_{\substack{\ell, m \\ \ell', m'}} \frac{4\pi}{k} \frac{4\pi}{(2\ell'+1)} 2\beta^{3/2} i^{-\ell} e^{-i\sigma_\ell} Y_{\ell m}(\vec{k}) Z_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{no}t} Y_{\ell' m'}(\vec{R}) \int d\vec{r} Y_{\ell m}^*(\vec{r}) Y_{\ell' m'}(\vec{r}) Y_{00}(\vec{r}) \int dr r^2 \frac{r_\ell^\ell}{r^{\ell'+1}} e^{-\beta r} \frac{F_\ell(\eta, kr)}{r} \quad (4-6)$$

Realizando la integración en las coordenadas angulares de \vec{r} :

$$a_R^{100} = -4\pi i \sum_{\ell, m} i^{-\ell} e^{-i\sigma_\ell(\eta)} Y_{\ell m}(\vec{k}) T_{\ell m}^{100} \quad (4-7)$$

donde $T_{\ell m}^{100}$ está dado por:

$$T_{\ell m}^{100} = \frac{4\sqrt{\pi}}{k(2\ell+1)} \beta^{3/2} Z_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{no}t} Y_{\ell m}(\vec{R}) f_\ell^0(R) \quad (4-8)$$

siendo $f_\ell^0(R)$ el denominado "factor de forma", cuya expresión es:

$$f_\ell^0(R) = (R)^{-(\ell+1)} \int_0^R dr e^{-\beta r} r^{\ell+1} F_\ell(\eta, kr) + R^\ell \int_R^\infty dr e^{-\beta r} r^{-\ell} F_\ell(\eta, kr) \quad (4-9)$$

Este tipo de planteo para la evaluación de $a_k(p, \infty)$ en aproximación semiclassical, es análogo al utilizado por Pauli y Trautmann³ en la descripción de la ionización de la capa K a través del formalismo de la onda distorsionada (DWBA).

La probabilidad de ionización para un dado parámetro de impacto del proyectil, teniendo en cuenta el tipo de normalización del estado final (4-1), está dada por la expresión:

$$\frac{d\sigma^{100}}{d^3p} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} |a_{\mathbf{k}}(p, \omega)|^2 = \frac{2}{\pi} \sum_{\ell, m} \int dE_{\mathbf{k}} k |T_{\ell m}^{100}|^2 \quad (4-10)$$

donde $dE_{\mathbf{k}} = k dk$

Evaluación del factor de forma $f_{\ell}^0(k)$:

Para distancias internucleares R mayores que el radio de la capa β^{-1} , que son los casos de interés para nosotros, es conveniente reescribir (4-9) en la siguiente forma:

$$f_{\ell}^0(R) = R^{-(\ell+1)} \int_0^{\infty} dr e^{-\beta r} r^{\ell+1} F_{\ell}(\eta, kr) + \int_R^{\infty} dr e^{-\beta r} F_{\ell}(\eta, kr) \left[\left(\frac{R}{r}\right)^{\ell} - \left(\frac{r}{R}\right)^{\ell+1} \right] \quad (4-11)$$

La primera integral se resuelve analíticamente (pag. 851, Gradshteyn y Ryzhik²⁹):

$$B_{\ell}^0 = \int_0^{\infty} dr e^{-\beta r} r^{\ell+1} F_{\ell}(\eta, kr) = C_{\ell}(\eta) k^{\ell+1} \frac{(2\ell+2)!}{(\beta+ik)^{-(2\ell+3)}} {}_2F_1 \left[\ell+1+i\eta, 2\ell+3, 2\ell+2, \frac{2ik}{\beta+ik} \right] \quad (4-12)$$

para resolver la segunda integral recurrimos al desarrollo en serie de $F_{\ell}(\eta, kr)$ con coeficientes reales¹⁰:

$$F_{\ell}(\eta, kr) = \sum_{s=0}^{\infty} D_s^{\ell}(\eta, k) r^{s+\ell+1} \quad (4-13)$$

donde los coeficientes $D_s^{\ell}(\eta, k)$ están dados por la siguiente relación de recurrencia:

$$D_s^{\ell}(\eta, k) = \frac{(-1)^s}{s(s+2\ell+1)} \left[2\eta k D_{s-1}^{\ell} + k^2 D_{s-2}^{\ell} \right] \quad (4-14)$$

con los valores iniciales:

$$D_0^\ell(\eta, \kappa) = C_\ell(\eta) \kappa^{\ell+1} \quad D_1^\ell(\eta, \kappa) = -D_0^\ell(\eta, \kappa) \frac{\eta \kappa}{\ell+1} \quad (4-15)$$

Introduciendo el desarrollo (4-13) en la expresión de la segunda integral de (4-11):

$$I_\ell = \int_R^\infty dr e^{-\beta r} F_\ell(\eta, \kappa r) \left[\left(\frac{R}{r} \right)^\ell - \left(\frac{r}{R} \right)^{\ell+1} \right] = \sum_{s=0}^{\infty} D_s^\ell(\eta, \kappa) \left\{ \frac{R^\ell}{\beta^{s+2}} \Gamma(s+2, \beta R) - \frac{R^{-(\ell+1)}}{\beta^{s+2\ell+3}} \Gamma(s+2\ell+3, \beta R) \right\} \quad (4-16)$$

donde hemos usado las funciones gama incompletas, definidas según¹⁰:

$$\Gamma(m, z) = \int_z^\infty dt e^{-t} t^{m-1} \quad m > 0 \quad (4-17)$$

y cuyo desarrollo en serie responde a la expresión:

$$\Gamma(n+1, z) = n! e^{-z} \sum_{k=0}^n z^k / k! \quad (4-18)$$

La expresión resultante del "factor de forma" $f_1^0(R)$ considerando (4-12) y (4-16), es:

$$f_\ell^0(R) = \frac{B_\ell^0}{R^{\ell+1}} + \sum_{s=0}^{\infty} D_s^\ell(\eta, \kappa) \left\{ \frac{R^\ell}{\beta^{s+2}} \Gamma(s+2, \beta R) - \frac{R^{-(\ell+1)}}{\beta^{s+2\ell+3}} \Gamma(s+2\ell+3, \beta R) \right\} \quad (4-19)$$

4-b) Estado inicial : capa L

En este caso debemos tratar separadamente las 4 subcapas que

componen este estado, que corresponden a un nivel 2s, y los 3 subniveles del 2p determinados por los valores de la proyección angular $m = 0, 1, -1$.

b-1) Subcapa 2s

La función de onda del estado inicial está dada por:

$$\psi_{200}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2}}{2} \left[\beta^{3/2} - \frac{\beta^{5/2}}{2} r \right] e^{-\beta r/2} Y_{00}(\check{r}) \quad (4-20)$$

siendo $\beta = Z_2 - 4.15$, la carga nuclear efectiva para la capa L.

Con un procedimiento totalmente análogo al seguido en el caso de la capa K como estado inicial, llegamos a la siguiente expresión para la amplitud de transición:

$$A_{K(p, \omega)} = -4\pi i \sum_{\ell, m} i^{-\ell} e^{-iG_{\ell}(m)} Y_{\ell, m}(\check{K}) \left[T_{\ell m}^{200,1} + T_{\ell m}^{200,2} \right] \quad (4-21)$$

donde:

$$T_{\ell m}^{200,1} = \frac{\sqrt{2\pi}}{k(2\ell+1)} Z_1 \beta^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{no}t} Y_{\ell m}(\check{R}) f_{\ell}^0(R) \quad (4-22)$$

con $f_{\ell}^0(R)$ dado por la expresión (4-19), pero reemplazando β por $\beta/2$, y teniendo en cuenta el valor de β correspondiente a la capa L.

$$T_{\ell m}^{200,2} = \frac{(-1)\sqrt{\pi/2}}{k(2\ell+1)} Z_1 \beta^{5/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{no}t} Y_{\ell m}(\check{R}) f_{\ell}^1(R) \quad (4-23)$$

con $f_{\ell}^1(R)$ dado por:

$$f_{\ell}^1(R) = R^{-(\ell+1)} \int_0^R dr r^{\ell+2} e^{-\beta r/2} F_{\ell}(m, kr) + R^{\ell} \int_R^{\infty} dr r^{-\ell+1} e^{-\beta r/2} F_{\ell}(m, kr) \quad (4-24)$$

Evaluación del factor de forma $f_{\ell}^1(R)$

Reescribiendo (4-24) de la siguiente manera:

$$f_1^{\ell}(R) = R^{-(\ell+1)} \int_0^{\infty} dr r^{\ell+2} e^{-\beta r/2} F_{\ell}(\eta, kr) + \\ R \int_R^{\infty} dr \left\{ \left(\frac{R}{r}\right)^{\ell-1} - \left(\frac{r}{R}\right)^{\ell+2} \right\} e^{-\beta r/2} F_{\ell}(\eta, kr) \quad (4-25)$$

La primera integral resulta:

$$B_{\ell}^1 = \int_0^{\infty} dr r^{\ell+2} e^{-\beta r/2} F_{\ell}(\eta, kr) = \\ C_{\ell}(\eta) \frac{k^{2\ell+1} (2\ell+3)!}{\left(\frac{\beta}{2} + ik\right)^{2\ell+4}} {}_2F_1 \left[\ell+1+i\eta, 2\ell+4, 2\ell+2; \frac{2ik}{\frac{\beta}{2} + ik} \right] \quad (4-26)$$

Para la segunda integral obtenemos, procediendo análogamente a lo ya hecho anteriormente:

$$I_{\ell} = R^{\ell} \int_R^{\infty} dr r^{-\ell+1} e^{-\beta r/2} F_{\ell}(\eta, kr) - R^{-(\ell+1)} \int_R^{\infty} dr r^{\ell+2} e^{-\beta r/2} F_{\ell}(\eta, kr) = \\ R^{\ell} \sum_{s=0}^{\infty} D_s^{\ell} \left(\frac{2}{\beta}\right)^{s+3} \Gamma(s+3, \beta R/2) - R^{-(\ell+1)} \sum_{s=0}^{\infty} D_s^{\ell} \left(\frac{2}{\beta}\right)^{s+2\ell+4} \Gamma(s+2\ell+4, \beta R/2) \quad (4-27)$$

Resultando así la siguiente expresión para $f_1^{\ell}(R)$:

$$f_1^{\ell}(R) = \frac{B_{\ell}^1}{R^{\ell+1}} + \sum_{s=0}^{\infty} D_s^{\ell}(\eta, k) \left\{ R^{\ell} \left(\frac{2}{\beta}\right)^{s+3} \Gamma(s+3, \beta R/2) - \\ R^{-(\ell+1)} \left(\frac{2}{\beta}\right)^{s+2\ell+4} \Gamma(s+2\ell+4, \beta R/2) \right\} \quad (4-28)$$

b-2) Subcapa 2p0 :

El estado inicial es:

$$\psi_{210}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{6}}{12} \beta^{5/2} r e^{-\beta r/2} Y_{10}(\vec{r}) \quad (4-29)$$

Para los tres subniveles 2p, la integral en las coordenadas angulares de \vec{r} resulta más complicada. La expresión de la amplitud de transición, luego de reemplazar las expresiones de los estados inicial y final y el desarrollo multipolar del potencial $V(\vec{r}, t)$, es:

$$a_k^{210}(p, \omega) = -i \sum_{\substack{\ell, m \\ \ell', m'}} \frac{(4\pi)^2}{k(2\ell+1)} i^{-\ell} e^{-i\sigma_\ell} Y_{\ell m}(\vec{k}) Z_1 \frac{\sqrt{6}}{12} \beta^{5/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{no}t} Y_{\ell' m'}(\vec{R}) \\ \int d\vec{r} Y_{\ell m}^*(\vec{r}) Y_{\ell' m'}(\vec{r}) Y_{10}(\vec{r}) \int dr r^2 \frac{r_2^{\ell'}}{r_2^{\ell'+1}} e^{-\beta r/2} F_\ell(m, kr) \quad (4-30)$$

Teniendo en cuenta la expresión de las funciones armónicas esféricas:

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \left[\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!} \right]^{1/2} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (4-31)$$

donde los $P_1^m(\cos \theta)$ son los polinomios asociados de Legendre, la integral en las coordenadas angulares de \vec{r} queda reducida a:

$$I = \int d\vec{r} Y_{\ell m}^*(\vec{r}) Y_{\ell' m'}(\vec{r}) Y_{10}(\vec{r}) = \left[\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!} \frac{(2\ell'+1)(\ell'-m')!}{4\pi(\ell'+m')!} \right]^{1/2} \\ \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m'-m)\varphi} \int_{-1}^1 dx P_\ell^m(x) P_{\ell'}^{m'}(x) x \quad (4-32)$$

Usando la siguiente relación de recurrencia²⁷:

$$x P_\ell^m(x) = \frac{\ell-m+1}{2\ell+1} P_{\ell+1}^m(x) + \frac{\ell+m}{2\ell+1} P_{\ell-1}^m(x) \quad (4-33)$$

y la condición de ortogonalidad de las funciones $e^{im\varphi}$ en el intervalo $(0, 2\pi)$, junto con la de ortogonalidad respecto del índice l en el intervalo $(-1, 1)$ para

un m fijo de los $P_1^m(x)$, dada esta última por la siguiente expresión:

$$\int_{-1}^1 P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m(x) dx = \frac{2}{(2\ell+1)} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \delta_{\ell\ell'} \quad (4-34)$$

podemos resolver la integral en (4-32), obteniendo:

$$I = \left[\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!} \frac{(2\ell'+1)(\ell'-m')!}{4\pi(\ell'+m')!} \right]^{1/2} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} 2\pi \frac{2(\ell'+m')!}{(2\ell'+1)(\ell'-m')!} \frac{\delta_{mm'}}{2\ell+1} \left[(\ell-m+1) \delta_{\ell',\ell+1} + (\ell+m) \delta_{\ell',\ell-1} \right] \quad (4-35)$$

Reemplazando (4-35) en (4-30):

$$a_k^{210}(\rho, \infty) = -4\pi i \sum_{\ell, m} i^{-\ell} e^{-i\sigma_\ell} Y_{\ell m}(\check{R}) \left[T_{\ell m}^{210,1} + T_{\ell m}^{210,2} \right] \quad (4-36)$$

donde

$$T_{\ell m}^{210,1} = \frac{4\pi}{k(2\ell+3)} \frac{\sqrt{6}}{12} Z_1 \beta^{5/2} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left[\frac{(\ell-m)! (\ell+m+1)!}{(\ell+m)! (2\ell+1)(2\ell+3)(\ell+1-m)!} \right]^{1/2} (\ell-m+1) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{n0} t} Y_{\ell+1, m}^*(\check{R}) f_\ell^2(R) \quad (4-37)$$

siendo la expresión del "factor de forma" $f_1^2(R)$:

$$f_\ell^2(R) = R^{-(\ell+2)} \int_0^R dr r^{\ell+2} e^{-\beta r/2} F_\ell(m, kr) + R^{\ell+1} \int_R^\infty dr r^{-\ell} e^{-\beta r/2} F_\ell(m, kr) \quad (4-38)$$

$$T_{\ell m}^{210,2} = \frac{4\pi}{k(2\ell-1)} \frac{\sqrt{6}}{12} Z_1 \beta^{5/2} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left[\frac{(\ell-m)! (\ell-1+m)!}{(\ell+m)! (2\ell-1)(2\ell+1)(\ell-1-m)!} \right]^{1/2} (\ell+m) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{n0} t} Y_{\ell-1, m}^*(\check{R}) f_\ell^3(R) \quad (4-39)$$

con $f_1^3(R)$ dado por:

$$f_\ell^3(R) = R^{-\ell} \int_0^R dr r^{\ell+1} e^{-\beta r/2} F_\ell(\eta, kr) + R^{\ell-1} \int_R^\infty dr r^{-\ell+2} e^{-\beta r/2} F_\ell(\eta, kr) \quad (4-40)$$

Evaluación de los factores de forma $f_1^2(R)$ y $f_1^3(R)$

No repetiremos en detalle los pasos, puesto que éstos son análogos a los ya expuestos anteriormente. Las expresiones resultantes para $f_1^2(R)$ y $f_1^3(R)$ son

$$f_\ell^2(R) = \frac{B_\ell^2}{R^{\ell+2}} + \sum_{s=0}^{\infty} D_s^\ell(\eta, k) \left\{ \left(\frac{2}{\beta}\right)^{s+2} R^{\ell+1} \Gamma(s+2, \beta R/2) - \left(\frac{2}{\beta}\right)^{s+2\ell+5} R^{-(\ell+2)} \Gamma(s+2\ell+5, \beta R/2) \right\} \quad (4-41)$$

donde

$$B_\ell^2 = C_\ell(\eta) k^{\ell+1} (2\ell+4)! \left(\frac{\beta}{2} + ik\right)^{-(2\ell+5)} {}_2F_1\left[\ell+1+i\eta, 2\ell+5, 2\ell+2; \frac{2ik}{\frac{\beta}{2}+ik}\right] \quad (4-42)$$

$$f_\ell^3(R) = \frac{B_\ell^3}{R^\ell} + \sum_{s=0}^{\infty} D_s^\ell(\eta, k) \left\{ \left(\frac{2}{\beta}\right)^{s+4} \Gamma(s+4, \beta R/2) R^{\ell-1} - \left(\frac{2}{\beta}\right)^{s+2\ell+3} \Gamma(s+2\ell+3, \beta R/2) R^{-\ell} \right\} \quad (4-43)$$

donde:

$$B_\ell^3 = C_\ell(\eta) k^{\ell+1} (2\ell+2)! \left(\frac{\beta}{2} + ik\right)^{-(2\ell+3)} {}_2F_1\left[\ell+1+i\eta, 2\ell+3, 2\ell+2; \frac{2ik}{\frac{\beta}{2}+ik}\right] \quad (4-44)$$

expresión que coincide con la de B_1^0 , pero considerando $\beta/2$ en lugar de β .

b-3) Subcapa 2p1 :

El estado inicial está dado por:

$$\varphi_{211}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{6}}{12} \beta^{5/2} r e^{-\beta r/2} Y_{11}(\theta, \varphi) \quad (4-45)$$

La integral en las coordenadas angulares de \vec{r} que resulta se resuelve utilizando (4-31) y la siguiente relación de recurrencia²⁹

$$(1-x^2)^{1/2} P_{\ell}^{m-1}(x) = \frac{1}{(2\ell+1)} [P_{\ell-1}^m - P_{\ell+1}^m] \quad (4-46)$$

resultando para la misma la siguiente expresión:

$$I = \int d\vec{r} Y_{\ell m}^*(\vec{r}) Y_{\ell' m'}(\vec{r}) Y_{11}(\vec{r}) =$$

$$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left[\frac{(\ell+m)! (\ell'-m')!}{(2\ell+1)(\ell-m)! (2\ell'+1)(\ell'+m')!} \right]^{1/2} \delta_{m', m-1} [\delta_{\ell', \ell+1} - \delta_{\ell', \ell-1}] \quad (4-47)$$

Reemplazando (4-47) en la expresión de la amplitud de transición, obtenemos:

$$A_{k}^{211}(p, \infty) = -4\pi i \sum_{\ell, m} i^{-\ell} e^{-i\sigma_{\ell}} Y_{\ell m}(\vec{k}) [T_{\ell m}^{211,1} + T_{\ell m}^{211,2}] \quad (4-48)$$

donde

$$T_{\ell m}^{211,1} = -\frac{4\pi}{k(2\ell+3)} \frac{\sqrt{6}}{12} Z_1 \beta^{5/2} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left[\frac{(\ell-m+2)!}{(2\ell+1)(2\ell+3)(\ell-m)!} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{not} t} Y_{\ell+1, m-1}^*(\vec{R}) f_e^2 \quad (4-49)$$

con $f_1^2(R)$ dado por (4-41).

$$T_{\ell m}^{211,2} = \frac{4\pi}{k(2\ell-1)} \frac{\sqrt{6}}{12} Z_1 \beta^{5/2} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left[\frac{(\ell+m)!}{(2\ell+1)(2\ell-1)(\ell+m-2)!} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{not} t} Y_{\ell-1, m-1}^*(\vec{R}) f_e^3 \quad (4-50)$$

con $f_1^3(R)$ dado por (4-43)

b-4) Subcapa 2p-1

El estado inicial es:

$$\Phi_{2l-1}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{6}}{12} \beta^{5/2} r e^{-\beta r/2} Y_{l-1}(\theta, \varphi) \quad (4-51)$$

Usando (4-31) y (4-46) resolvemos la integral en las coordenadas angulares de \vec{r} , de manera completamente análoga al caso anterior, obteniendo así la amplitud de transición:

$$a_{\mathbf{k}}^{2l-1}(\mathbf{p}, \omega) = -4\pi i \sum_{l,m} i^{-l} e^{-i\sigma_l} Y_{lm}(\check{\mathbf{k}}) \left[T_{em}^{2l-1,1} + T_{em}^{2l-1,2} \right] \quad (4-52)$$

donde:

$$T_{em}^{2l-1,1} = \frac{4\pi\sqrt{6}}{k(2l-1)} \frac{Z_1 \beta^{5/2}}{12} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left[\frac{(l-m)!}{(2l+1)(2l-1)(l-m-2)!} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{not}} Y_{l-1, m+1}^*(\check{\mathbf{R}}) f_l^3(\mathbf{R}) \quad (4-53)$$

$$T_{em}^{2l-1,2} = -\frac{4\pi\sqrt{6}}{k(2l+3)} \frac{Z_1 \beta^{5/2}}{12} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left[\frac{(l+m+2)!}{(l+m)!(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{not}} Y_{l+1, m+1}^*(\check{\mathbf{R}}) f_l^2(\mathbf{R}) \quad (4-54)$$

con $f_l^3(\mathbf{R})$ y $f_l^2(\mathbf{R})$ dados por (4-43) y (4-41) respectivamente.

Podemos ver que la amplitud de transición de la subcapa 2p1 al estado l, m del continuo es igual en módulo a la correspondiente de la subcapa 2p-1 al $l, -m$.

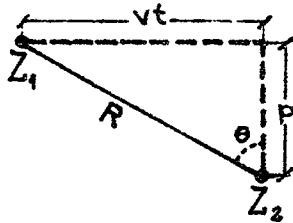
La probabilidad de transición de un subnivel de la capa L al continuo está dada en general, por:

$$\frac{d\sigma^L}{dp} = \frac{2}{\pi} \sum_{l,m} \int dE_{\mathbf{R}} k \left| T_{em}^1 + T_{em}^2 \right|^2 \quad (4-55)$$

En el apéndice (II-A) reducimos los coeficientes B_1^i , con $i = 0, 1, 2$, a expresiones reales sencillas. El carácter real de éstos se observa ya en sus expresiones integrales de definición.

Cálculo de los términos T_{lm}

Nosotros consideramos que el proyectil viaja según una trayectoria rectilínea $\vec{R} = \vec{p} + \vec{v}t$. Las funciones armónicas esféricas $Y_{lm}(\vec{R})$ son independientes del ángulo θ , y de acuerdo al siguiente diagrama:



$$\cos \theta = p / R \quad \text{--} \quad \text{sen } \theta = x / R \quad (4-56)$$

Vamos a analizar una expresión general del término T_{lm} que incluye un conjunto de parámetros, los cuales adoptan determinados valores para cada caso en particular.

Para describir un factor de forma genérico introducimos 6 parámetros definidos según:

$$f_l^i(R) = \frac{B_l^i}{R^{\ell+i_1}} + \sum_{s=0}^{\infty} D_s^{\ell}(\eta, k) e^{-\beta R} \left\{ (s+i_2)! \sum_{k=0}^{s+i_2} \beta^{k-s-i_2-1} \frac{R^{k+\ell+i_3}}{k!} - \right. \\ \left. (s+2\ell+i_4)! \sum_{k=0}^{s+2\ell+i_4} \beta^{k-s-2\ell-i_4-1} \frac{R^{k-\ell+i_5}}{k!} \right\} \quad (4-57)$$

donde hemos reemplazado las funciones gamma por su desarrollo en serie (4-18), y teniendo en cuenta que para la capa L debe reemplazarse β por $\beta/2$.

Los cuatro factores de forma que se presentan en el cálculo corresponden a los siguientes conjuntos de valores para estos parámetros:

$$i = 0 \longrightarrow i_1 = 1 \quad i_2 = 1 \quad i_3 = 0 \quad i_4 = 2 \quad i_5 = -1$$

$$i = 1 \longrightarrow i_1 = 1 \quad i_2 = 2 \quad i_3 = 0 \quad i_4 = 3 \quad i_5 = -1$$

(4-58)

$$i = 2 \longrightarrow i_1 = 2 \quad i_2 = 1 \quad i_3 = 1 \quad i_4 = 4 \quad i_5 = -2$$

$$i = 3 \longrightarrow i_1 = 0 \quad i_2 = 3 \quad i_3 = -1 \quad i_4 = 2 \quad i_5 = 0$$

Representando el armónico esférico $Y_{lm}(\check{R})$ por una expresión general del tipo:

$$Y_{lm}(\check{R}) = A_{lm} \rho^{m_3} \frac{x^n}{R^j} \quad (4-59)$$

obtenemos para la expresión de T_{lm}:

$$T_{lm} = \frac{N_{lm}^{n_1} A_{lm} 2 \rho^{m_3}}{V} \int_0^\infty dx \begin{cases} \text{sen}(q_0 x) \\ \text{cos}(q_0 x) \end{cases} x^n R^{-j} f_l^i(R) =$$

$$T(l, m, n_1, m_3, n, j, i, i_1, i_2, i_3, i_4, i_5) \quad (4-60)$$

con $q_0 = (\epsilon_R - \epsilon_0) / v$

donde n_1 indica la subcapa inicial:

$$n_1 = 100 \longrightarrow \text{capa K}$$

$$n_1 = 200 \longrightarrow \text{subcapa 2s}$$

$$n_1 = 210 \longrightarrow \text{subcapa 2p0}$$

$$n_1 = 211 \longrightarrow \text{subcapa 2p1}$$

En (4-60) figura $\text{sen}(q_0 x)$ o $\text{cos}(q_0 x)$ según n sea impar o par respectivamente.

Reemplazando (4-57) en (4-60):

$$T_{lm} = N_{lm}^{n_1} A_{lm} \frac{2 \rho^{m_3}}{V} \left\{ B_l^i \int_0^\infty dx \begin{cases} \text{cos}(q_0 x) \\ \text{sen}(q_0 x) \end{cases} \frac{x^n}{R^{j+l+i_1}} + \sum_{s=0}^\infty D_s^l \left[(s+i_2) \right] \right\}$$

$$\left. \left. \left. \sum_{k=0}^{s+i_2} \frac{\beta^{k-s-i_2-1}}{k!} \int_0^{\infty} dx \left| \frac{\cos(q_0 x)}{\sin(q_0 x)} \right| x^n R^{k+l+i_3-j} e^{-\beta R} - (s+2\ell+i_4) \sum_{k=0}^{s+2\ell+i_4} \frac{\beta^{k-s-2\ell-i_4-1}}{k!} \int_0^{\infty} dx \left| \frac{\cos(q_0 x)}{\sin(q_0 x)} \right| x^n R^{k-\ell+i_5-j} e^{-\beta R} \right] \right\} \quad (4-61)$$

Las integrales que figuran en esta expresión pueden calcularse analíticamente, salvo las del tipo $\int_0^{\infty} dx \cos(q_0 x) x^n R^\lambda e^{-\beta R}$ cuando λ es menor que -1 , en tal caso la resolución de las mismas es numérica. Según se detalla en el apéndice (II-B), la expresión (4-61) puede reducirse a la siguiente:

$$\begin{aligned} T_{em} = & N_{em}^{n_1} A_{em} p^{m_3} \frac{2}{\sqrt{V}} \left\{ B_e^i \frac{(-1)^i}{(+1)^i} \frac{1}{\sqrt{\pi}} (2p)^{\frac{(j+\ell+i_3-1)/2}{2}} \cos\left(\frac{j+\ell+i_3-1}{2} \pi\right) \Gamma\left(1 - \frac{j+\ell+i_3}{2}\right) \right. \\ & \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \left(\frac{j+\ell+i_3-1}{2}\right) \left(\frac{j+\ell+i_3-1}{2} - 1\right) \dots \left(\frac{j+\ell+i_3-1}{2} - m + 1\right) q_0^{\frac{j+\ell+i_3-1}{2} - m} \left(-\frac{p}{2}\right)^{n-m} \sum_{p_1=0}^{n-m} \\ & \binom{n-m}{p_1} K_{\frac{j+\ell+i_3-1}{2} - n + m + 2p_1} (q_0 p) + \sum_{s=0}^{\infty} D_s^e(m, R) \left[(s+i_2) \sum_{k=0}^{s+i_2} \frac{\beta^{k-s-i_2-1}}{k!} \right. \\ & \left. \left(\frac{p}{2}\right)^{n+k+\ell+i_3-j+1} \sum_{p_1=0}^{n+k+\ell+i_3-j+1} \alpha_{p_1} \frac{\cos}{\sin} \left[(n+k+\ell+i_3-j+1 - 2p_1) \arctan(q_0/\beta) \right] \right. \\ & \left. K_{n+k+\ell+i_3-j+1-2p_1} \left(p \sqrt{q_0^2 + \beta^2} \right) - (s+2\ell+i_4) \sum_{k=0}^{s+2\ell+i_4} \frac{\beta^{k-s-2\ell-i_4-1}}{k!} \right. \\ & \left. \left(\frac{p}{2}\right)^{n+k-\ell+i_5-j+1} \sum_{m=0}^{n+k-\ell+i_5-j+1} \alpha_m \frac{\cos}{\sin} \left[(n+k-\ell+i_5-j+1 - 2m) \arctan(q_0/\beta) \right] \right. \\ & \left. K_{n+k-\ell+i_5-j+1-2m} \left(p \sqrt{q_0^2 + \beta^2} \right) \right] \left. \right\} \quad (4-62) \end{aligned}$$

donde (-1) vale para $n = 2, 6, 10, \dots, 1, 5, 9, \dots$

$(+1)$ " " $n = 0, 4, 8, \dots, 3, 7, 11, \dots$

$$\alpha_{p_1} = \sum_{k=0}^{p_1} (-1)^{p_1-k} \frac{n!}{(n-p_1+k)! (p_1-k)!} \frac{(k+\ell+i_3-j+1)!}{(k+\ell+i_3-j+1-k)! k!} \quad (4-63)$$

$$\alpha_m = \sum_{k=0}^m (-1)^{m-k} \frac{n!}{(n-m+k)! (m-k)!} \frac{(k-\ell+i_5-j+1)!}{(k-\ell+i_5-j+1-k)! k!}$$

Conocida la sección eficaz doble diferencial en parámetro de impacto y energía transferida al electrón $\omega = k^2/2 + \beta^2/2 n^2$, podemos calcular la energía media perdida y su fluctuación en función de la posición del proyectil:

$$\langle \Delta E(p) \rangle = \frac{2}{\pi} \sum_{\ell, m} \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega \omega k |T_{\ell m}|^2 \quad (4-64)$$

$$\langle \Delta E^2(p) \rangle = \frac{2}{\pi} \sum_{\ell, m} \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega \omega^2 k |T_{\ell m}|^2 \quad (4-65)$$

El límite inferior de integración está dado por la energía de excitación al primer nivel discreto desocupado del átomo real. El límite superior puede considerarse $\omega_{\max} = \infty$, pues como veremos más adelante sólo los procesos con pequeñas transferencias de energía son los que contribuyen apreciablemente en el caso de colisiones que involucran parámetros de impacto grandes del proyectil, a las cuales llamaremos en el futuro colisiones distantes.

II-5 ANALISIS DE LA EXPRESION DEL TERMINO $T_{\ell m}$ PARA COLISIONES DISTANTES.

Escribamos nuevamente las expresiones integrales de los factores de forma:

$$f_e^0(R) = \frac{B_e^0}{R^{\ell+1}} + R^\ell \int_R^\infty dr e^{-\beta r} r^{-\ell} F_\ell(m, kr) - R^{-(\ell+1)} \int_R^\infty dr e^{-\beta r} r^{\ell+1} F_\ell(m, kr) \quad (5-1)$$

$$f_e^i(R) = \frac{B_e^i}{R^{\ell+i_1}} + R^{m_1} \int_R^\infty dr e^{-\frac{\beta r}{2}} r^{-m_1+1} F_\ell(m, kr) - R^{-m_2} \int_R^\infty dr e^{-\frac{\beta r}{2}} r^{m_2+1} F_\ell(m, kr) \quad (5-2)$$

La expresión (5-2) reproduce los distintos $f_1^i(R)$ con $i = 1, 2, 3$ que se presentan para el caso de la capa L como estado inicial. Por ejemplo, para $i = 1$, $i_1 = 1$, $m_1 = 1$ y $m_2 = 1+1$.

Observando (5-1) y (5-2) podemos inferir que para parámetros de impacto mucho mayores que el radio de la capa, $p \gg \beta^{-1}$, el primer término

es el importante, ya que los otros dos presentan exponenciales decrecientes con R cuyo máximo valor $e^{-\beta p}$ es muy pequeño para $\beta p \gg 1$. De acuerdo a esto, una buena aproximación de los factores de forma para el caso de proyectiles distantes es:

$$f_l^i(R) \sim \frac{B_l^i}{R^{l+1/2}} \quad (5-3)$$

Pero analizando en detalle la contribución del segundo y tercer término de $f_l^i(R)$ en la evaluación de Tlm, encontramos que la velocidad del proyectil es también un parámetro que debemos tener en cuenta para decidir si éstos son despreciables o no.

Para ello, reemplazamos las expresiones asintóticas completas de los factores de forma, deducidas en el apéndice II-C, dadas por:

$$f_l^0(R) \sim \frac{B_l^0}{R^{l+1/2}} - \frac{2l+1}{\beta^2+k^2} \frac{e^{-\beta R}}{R} \text{sen} \left[kR + \eta \ln(2kR) + \sigma_l - \frac{l\pi}{2} + 2 \tan^{-1} k/\beta \right] \quad (5-4)$$

$$f_l^i(R) \sim \frac{B_l^i}{R^{l+1/2}} - \frac{m_1+m_2}{\beta^2/4+k^2} e^{-\beta R/2} \text{sen} \left[kR + \eta \ln(2kR) + \sigma_l - \frac{l\pi}{2} + 2 \tan^{-1} 2k/\beta \right] \quad (5-5)$$

en la expresión (4-60) de Tlm, obteniendo así:

$$T_{lm} \sim C \left\{ \int_0^\infty dx \frac{|\text{sen}(q_0 x)|}{|\text{cos}(q_0 x)|} \frac{x^n}{R^l} \frac{B_l^i}{R^{l+1/2}} - \frac{m_1+m_2}{\beta^2/4+k^2} \int_0^\infty dx \frac{|\text{sen}(q_0 x)|}{|\text{cos}(q_0 x)|} \frac{x^n}{R^l} e^{-\beta R/2} \text{sen} \left[kR + \eta \ln(2kR) + \sigma_l - \frac{l\pi}{2} + 2 \tan^{-1} 2k/\beta \right] \right\} \quad (5-6)$$

donde en C incluimos todas las constantes, y solo consideramos la expresión general de $f_l^i(R)$ puesto que se observa que tanto (5-4) como (5-5) dan lugar a las mismas conclusiones.

El primer término resulta una combinación de funciones de Bessel modificadas de segunda especie con orden entero y argumento $q_0 p$ tal como se vé de la expresión completa (4-62) de Tlm.

Analicemos ahora la integral del segundo término, para lo cual

la reescribimos reemplazando $\text{sen}(kR + \eta \ln 2kR + \sigma_1 - 1 \pi/2 + 2 \tan^{-1} 2k/\beta)$ por exponenciales imaginarios, despreciando previamente el término logarítmico frente al lineal en R en el argumento del seno, siendo ésto válido para los casos que nos interesan $kR \gg 1$.

$$I = \frac{1}{2i} \left\{ e^{i\phi_e} \int_0^\infty dx \frac{\text{sen}(q_0 x)}{\cos(q_0 x)} \frac{x^n}{R^\delta} e^{-(\beta/2 - ik)R} - e^{-i\phi_e} \int_0^\infty dx \frac{\text{sen}(q_0 x)}{\cos(q_0 x)} \frac{x^n}{R^\delta} e^{-(\beta/2 + ik)R} \right\} \quad (5-7)$$

siendo $\phi_e = \sigma_1 - 1 \pi/2 + 2 \tan^{-1} 2k/\beta$

Haciendo el cambio de variable $q_0 x = y$; y llamando $\delta' = q_0 p$, $\mu_1 = \beta/2 - ik$, $\mu_2 = \beta/2 + ik$:

$$I = \frac{1}{2i} \left\{ e^{i\phi_e} \int_0^\infty \frac{dy}{q_0} \frac{\text{sen}(y)}{\cos(y)} \frac{y^n}{q_0^{n-\delta} (y^2 + \delta^2)^{\delta/2}} e^{-\frac{\mu_1}{q_0} (y^2 + \delta^2)^{1/2}} - e^{-i\phi_e} \int_0^\infty \frac{dy}{q_0} \frac{\text{sen}(y)}{\cos(y)} \frac{y^n}{q_0^{n-\delta} (y^2 + \delta^2)^{\delta/2}} e^{-\frac{\mu_2}{q_0} (y^2 + \delta^2)^{1/2}} \right\} \quad (5-8)$$

En el caso donde $\beta/2$ y k son mucho más pequeños que q_0 , podemos despreciar la variación de la exponencial con y , resultando entonces:

$$I \sim \text{sen}(\phi_e + kp) e^{-\beta p/2} \int_0^\infty dy \frac{\text{sen}(y)}{\cos(y)} \frac{y^n}{q_0^{n-\delta+1} (y^2 + \delta^2)^{\delta/2}} \quad (5-9)$$

Teniendo en cuenta que para $q_0 p \gg 1$, de acuerdo al comportamiento asintótico de $K_\nu(x)$ para x grandes, con ν entero¹⁰, el resultado de la integral se comporta como $e^{-q_0 p}$:

$$I \sim \text{sen}(\phi_e + kp) e^{-(\beta/2 + q_0) p} \quad (5-10)$$

siendo en principio esta contribución del mismo orden que la proveniente del primer término de Tlm.

Considerando procesos con transferencias pequeñas de energía, $k < \beta$, la expresión (5-10) es válida para:

$$q_0 \gg \beta \rightarrow \theta_s \beta^2 / 2v \gg \beta \rightarrow v/\beta \ll \theta_s/2 \quad (5-11)$$

donde θ_s es la relación entre el potencial de ionización real y el hidrogénico; (5-11) reproduce la condición de validez para la capa K y L, considerando $\beta/2$ en lugar de β para ésta última.

En el caso contrario, $q_0 < \beta$, la presencia de la exponencial en (5-8) disminuye apreciablemente la contribución del integrando respecto del que figura en el primer término de T_{lm}, dando por lo tanto un resultado de menor orden.

Así de este análisis puramente cualitativo concluimos que el segundo término en la expresión de T_{lm} para colisiones distantes, puede desprejarse frente al primero si se cumple también que la velocidad del proyectil es mayor que la característica del electrón en su estado inicial.

Analizaremos ahora en una forma aproximada el comportamiento general de los distintos T_{lm} que aparecen en el cálculo, con el objeto de visualizar cuales transiciones son importantes, y como es la convergencia de la suma sobre todos los estados finales.

De las expresiones de los T_{lm}, válidas para el caso de proyectiles distantes y rápidos, que se presentan para las capas K y L, consideraremos sólo las cuatro siguientes:

$$T_{em}^K \sim B_e^0 \int_0^\infty dx \cos(q_0 x) Y_{em}^*(\check{R}) R^{-\ell-1} \quad (5-12)$$

$$T_{em}^{L,1} \sim B_e^1 \int_0^\infty dx \cos(q_0 x) Y_{em}^*(\check{R}) R^{-\ell-1} \quad (5-13)$$

$$T_{em}^{L,2} \sim B_e^2 \int_0^\infty dx \cos(q_0 x) Y_{\ell+1,m}^*(\check{R}) R^{-\ell-2} \quad (5-14)$$

$$T_{em}^{L,3} \sim B_e^3 \int_0^\infty dx \cos(q_0 x) Y_{\ell-1,m}^*(\check{R}) R^{-\ell} \quad (5-15)$$

Dejamos de lado en todos los casos un factor multiplicativo que sabemos que disminuye a medida que l crece; consideramos que los armónicos esféricos están dados por la expresión:

$$Y_{lm}(\check{R}) \sim (p/R)^l \quad (5-16)$$

aproximación que no nos permite reproducir correctamente los órdenes de las funciones de Bessel que resultan, pero que no altera esencialmente las conclusiones. Debido justamente al uso de (5-16) para describir los $Y_{lm}(R)$, es que los cuatro T_{lm} de la capa L que faltan considerar están realmente ya contemplados en (5-14) y (5-15).

Reemplazando (5-16) en (5-12) - (5-15):

$$T_{em}^K \sim B_e^0 \int_0^\infty dx \frac{\cos(q_0 x)}{R^{2l+1}} p^l = \frac{B_e^0 \sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2l+1}{2})} (q_0/2)^l K_l(q_0 p) \quad (5-17)$$

$$T_{em}^{L,1} \sim \frac{B_e^1 \sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2l+1}{2})} (q_0/2)^l K_l(q_0 p) \quad (5-18)$$

$$T_{em}^{L,2} \sim \frac{B_e^2 \sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2l+3}{2})} (q_0/2)^{l+1} K_{l+1}(q_0 p) \quad (5-19)$$

$$T_{em}^{L,3} \sim \frac{B_e^3 \sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2l-1}{2})} (q_0/2)^{l-1} K_{l-1}(q_0 p) \quad (5-20)$$

Considerando los coeficientes B_e^l dados aproximadamente por:

$$B_e^0 \sim 2^{l+1} l \frac{\beta^{1/2}}{\beta^{l+3}} \quad (5-21)$$

$$B_e^1 \sim 2^{2l+1/2} (4l^2 - 6l - 2) \frac{\beta^{1/2}}{\beta^{l+4}} \quad (5-22)$$

$$B_e^2 \sim 2^{2l+5/2} (2l^3 - 3l^2 - 5l + 2) \frac{\beta^{1/2}}{\beta^{l+5}} \quad (5-23)$$

$$B_e^3 \sim 2^{2\ell+3/2} (\ell-1) \frac{\beta^{1/2}}{\beta^{\ell+3}} \quad (5-24)$$

despreciando k frente a β , y aproximando $C_1(\eta) \sim 2^\ell \beta^{\ell+1/2} / (2\ell+1)!$ se obtienen estas expresiones (ver apéndice II-B); resulta así, habiendo ya reemplazado $q_0 = \beta^2 / 2v$:

$$T_{em}^K \sim \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2\ell+1}{2})} \ell 2^{-\ell+1} \beta^{1/2-3} \left(\frac{\beta}{v}\right)^\ell K_\ell(q_0 p) \quad (5-25)$$

$$T_{em}^{L,1} \sim \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2\ell+1}{2})} (4\ell^2 - 6\ell - 2) 2^{1/2} \beta^{1/2-4} \left(\frac{\beta}{v}\right)^\ell K_\ell(q_0 p) \quad (5-26)$$

$$T_{em}^{L,2} \sim \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2\ell+3}{2})} (2\ell^3 - 3\ell^2 - 5\ell + 2) 2^{1/2} \beta^{1/2-4} \left(\frac{\beta}{v}\right)^{\ell+1} K_{\ell+1}(q_0 p) \quad (5-27)$$

$$T_{em}^{L,3} \sim \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2\ell-1}{2})} (\ell-1) 2^{7/2} \beta^{1/2-4} \left(\frac{\beta}{v}\right)^{\ell-1} K_{\ell-1}(q_0 p) \quad (5-28)$$

De acuerdo a estos resultados vemos que la convergencia de la suma sobre todos los estados finales es tanto más rápido cuanto mayor sea la velocidad del proyectil respecto de la característica del electrón, del orden de β . Esta buena convergencia puede verse también en términos de la relación existente entre el parámetro de impacto y el radio de la capa, β^{-1} , en los casos donde se cumple que $q_0 p$ es mucho menor que 1. Para los mismos podemos escribir la expresión de $K_\nu(x)$ para $x \ll 1$ ¹⁰:

$$K_\nu(x) \cong x^{-\nu} \quad x \rightarrow 0, \quad \nu > 0 \quad (5-29)$$

reemplazando (5-29) en (5-25), con lo cual representamos también los otros casos completamente análogos:

$$T_{em}^K \sim \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{2\ell+1}{2})} 2^\ell \beta^{1/2-3} (\beta p)^{-\ell} \quad (5-30)$$

Luego, las 2 condiciones de validez de la expresión de T_{lm} para colisiones rápidas y distantes, $v > \beta$ y $p > \beta^{-1}$, aseguran la pronta convergencia de la suma.

De (5-25) podemos ver que la transición de la capa K al estado del continuo con $l = 0$ es de probabilidad nula, siendo entonces la más importante la correspondiente al estado con $l = 1$, que denominaremos dipolar.

Un análisis similar para la capa L, mirando las expresiones (5-26), no es posible en forma tan directa, pero más adelante mostraremos que la transición de la subcapa 2s al estado con $l = 0$ del continuo también se anula, y que (5-26) muestra el orden de la dipolar.

Para la subcapa 2p, (5-27) representa esencialmente las transiciones a los estados con $l = 0$ y $l = 1$, mientras que la transición al estado con $l = 2$ responde a una expresión del tipo de (5-28). Vemos en este caso también que las transiciones que involucran un cambio en el impulso angular Δl igual a una unidad, del mismo orden todas ellas, son más importantes que la de carácter monopolar, esto es, con $\Delta l = 0$.

Bajo ningún punto de vista uno puede pretender obtener de este análisis relaciones cuantitativas entre los distintos tipos de transiciones. Eso lo lograremos cuando calculemos detalladamente los T_{lm} .

II-6 PROYECTILES RAPIDOS Y DISTANTES: CALCULO EXPLICITO DE LAS AMPLITUDES DE TRANSICION.

Usando la expresión general del término T_{lm} aproximada para estos casos:

$$\begin{aligned}
 T_{em} &= N_{em}^{n_i} A_{em} p^{m_3} \frac{2}{v} \left\{ B_e^i \left[\begin{matrix} (-1) \\ (+1) \end{matrix} \right] \frac{1}{\sqrt{\pi}} (2p)^{-\frac{j+l+i-1}{2}} \cos \left[\frac{j+l+i-1}{2} \pi \right] \right. \\
 &\left. \Gamma \left(1 - \frac{j+l+i}{2} \right) \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \left(\frac{j+l+i-1}{2} \right) \dots \left(\frac{j+l+i-1}{2} - m + 1 \right) q_0^{\frac{j+l+i-1}{2} - m} \left(-\frac{p}{2} \right)^{n-m} \right. \\
 &\left. \sum_{s=0}^{n-m} \binom{n-m}{s} K_{\frac{j+l+i-1}{2} - n + m + 2s} (q_0 p) \right\} \quad (6-1)
 \end{aligned}$$

y la relación de recurrencia¹⁰:

$$K_{n+1}(z) = \frac{2n}{z} K_n(z) + K_{n-1}(z) \quad (6-2)$$

encontramos las siguientes secciones eficaces doble diferencial para los casos indicados a continuación:

6-a) Transición capa K - 1 = 1 del continuo -

$$\frac{d^2\sigma^{K-l=1}}{d\omega dp} = \frac{32}{3\pi} \frac{Z_1^2 \beta^3}{k} \frac{(B_1^0)^2}{v^2} q_0^2 \left[K_0^2(q_0 p) + K_1^2(q_0 p) \right] \quad (6-3)$$

6-b) Transición subcapa 2s - 1 = 0 del continuo -

$$\frac{d^2\sigma^{2s-l=0}}{d\omega dp} = \frac{2}{\pi} \frac{Z_1^2 \beta^3}{k v^2} \left[\sqrt{2} B_0^0 - \frac{\beta}{\sqrt{2}} B_0^1 \right]^2 K_0^2(q_0 p) \quad (6-4)$$

pero observando las expresiones de B_0^0 y B_0^1 dadas en el apéndice II-B, encontramos que $B_0^1 = \frac{2}{\beta} B_0^0$, con lo cual:

$$\frac{d^2\sigma^{2s-l=0}}{d\omega dp} = 0 \quad (6-5)$$

6-c) Transición subcapa 2s - 1 = 1 del continuo -

$$\frac{d^2\sigma^{2s-l=1}}{d\omega dp} = \frac{4 Z_1^2 \beta^3}{3\pi k} (B_1^1)^2 \frac{q_0^2}{v^2} \left[K_0^2(q_0 p) + K_1^2(q_0 p) \right] \quad (6-6)$$

6-d) Transición subcapa 2s - 1 = 2 del continuo -

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma^{2s-l=2}}{d\omega dp} = & \frac{2 Z_1^2 \beta^3}{15 k v^2} \left[\sqrt{2} B_2^0 - \frac{\beta}{\sqrt{2}} B_2^1 \right]^2 \left\{ q_0^4 \left[K_0^2(q_0 p) + K_1^2(q_0 p) \right] \right. \\ & \left. + \frac{q_0^2}{p^2} K_1^2(q_0 p) + \frac{q_0^3}{p} K_1(q_0 p) K_0(q_0 p) \right\} \quad (6-7) \end{aligned}$$

6-e) Transición subcapa 2p - 1 = 0 del continuo -

$$\frac{d^2\sigma_{2p-\ell=0}}{d\omega dp} = \frac{2k}{\pi} \left\{ |T_{00}^{210,1} + T_{00}^{210,2}|^2 + 2|T_{00}^{211,1} + T_{00}^{211,2}|^2 \right\} =$$

$$\frac{Z_1^2 \beta^5 (B_0^2)^2}{9\pi k} \frac{q_0^2}{v^2} \left[K_0^2(q_0 p) + K_1^2(q_0 p) \right] \quad (6-8)$$

6-f) Transición subcapa 2p - l = 1 del continuo -

$$\frac{d^2\sigma_{2p-\ell=1}}{d\omega dp} = \frac{2k}{\pi} \sum_{m=1}^1 \left\{ |T_{1m}^{210,1} + T_{1m}^{210,2}|^2 + 2|T_{1m}^{211,1} + T_{1m}^{211,2}|^2 \right\} = \frac{2Z_1^2 \beta^5}{75\pi k v^2}$$

$$(B_1^2)^2 \left\{ q_0^4 \left[K_0^2(q_0 p) + K_1^2(q_0 p) \right] + \frac{q_0^2}{p^2} K_1^2(q_0 p) + \frac{q_0^3}{p} K_1(q_0 p) K_0(q_0 p) \right\} \quad (6-9)$$

6-g) Transición subcapa 2p - l = 2 del continuo -

$$\frac{d^2\sigma_{2p-\ell=2}}{d\omega dp} = \frac{2Z_1^2 \beta^5}{\pi k v^2} \left\{ K_0^2(q_0 p) \left[-\frac{1}{84} \sqrt{\frac{18}{5}} B_2^2 q_0^3 + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{5}} B_2^3 q_0 \right]^2 + \right.$$

$$2 K_1^2(q_0 p) \left[-\frac{1}{42} \sqrt{\frac{3}{5}} B_2^2 q_0^3 + \frac{1}{2\sqrt{15}} B_2^3 q_0 \right]^2 + \frac{2(B_2^2)^2}{28^2 \cdot 30} \left[\frac{2q_0^2}{p} K_1(q_0 p) + \right.$$

$$q_0^3 K_0(q_0 p) \left. \right]^2 + 2 K_1^2(q_0 p) \left[\frac{1}{28\sqrt{30}} B_2^2 q_0^3 + \frac{1}{6\sqrt{5}} B_2^3 q_0 \right]^2 + 2 K_0^2(q_0 p) \left[\right.$$

$$\left. \frac{1}{42\sqrt{10}} B_2^2 q_0^3 + \frac{1}{\sqrt{30}} B_2^3 q_0 \right]^2 + 2 K_1^2(q_0 p) \left[\frac{1}{28\sqrt{30}} B_2^2 q_0^3 + \frac{1}{\sqrt{30}} B_2^3 q_0 \right]^2 +$$

$$\frac{2(B_2^2)^2}{28^2 \cdot 15} \left[q_0^3 K_0 + \frac{2q_0^2}{p} K_1 \right]^2 + \frac{2(B_2^2)^2}{28^2 \cdot 30} \left[q_0^3 K_1 + \frac{4q_0^2}{p} K_0 + \frac{8q_0}{p^2} K_1(q_0 p) \right]^2 \quad (6-10)$$

Pero analizando cuidadosamente esta expresión encontramos que la contribución importante se reduce a:

$$\frac{d^2 \sigma^{2p-l=2}}{d\omega dp} \sim \frac{2 Z_1^2 \beta^5}{9 R \Pi} (B_2^3)^2 \frac{q_0^2}{v^2} [K_0^2(q_0 p) + K_1^2(q_0 p)] \quad (6-11)$$

Si consideramos las expresiones aproximadas de los coeficientes B_1^i resultantes de desprestigiar k frente a β , encontramos que:

I) la transición $2s - 1 = 2$ se anula en primera aproximación.

II) La relación entre la sección eficaz diferencial correspondiente a la transición $2p - 1 = 2$ y la correspondiente a $2p - 1 = 0$ es un factor 32.

III) Entre las secciones eficaces diferenciales para las transiciones $2p - 1 = 2$ y $2p - 1 = 1$ existe la siguiente relación:

$$\frac{d^2 \sigma^{2p-l=2}/d\omega dp}{d^2 \sigma^{2p-l=1}/d\omega dp} \sim \frac{100}{3} \left(\frac{v}{\beta}\right)^2 \quad (6-12)$$

Con estos resultados quedan confirmadas las conclusiones obtenidas en la sección 5.

II-7 ESTUDIO DE LA DEPENDENCIA CON LA ENERGÍA TRANSFERIDA DE LA SECCION EFICAZ DOBLE DIFERENCIAL, EN EL CASO DE VELOCIDADES Y PARAMETROS DE IMPACTO GRANDES

En general el comportamiento de la sección eficaz con la energía transferida se puede resumir en la siguiente expresión:

$$\frac{d^2 \sigma}{d\omega dp} \sim \frac{1}{\omega^q} [K_1^2\left(\frac{\omega p}{v}\right) + K_0^2\left(\frac{\omega p}{v}\right)] \quad (7-1)$$

teniendo en cuenta sólo las transiciones dipolares que son, como ya vimos, las importantes. La potencia q de ω en (7-1) es del orden de 5 para los casos $2s - 1 = 1$ y $2s - 1 = 1$, y del orden de 6 para $2p - 1 = 2$.

Para valores de ω , p y v tales que $\omega p/v < 1$, de acuerdo al comportamiento de las funciones de Bessel en estos casos¹⁰, tenemos que:

$$\frac{d^2 \sigma}{d\omega dp} \sim \left(\frac{v}{p}\right)^2 \frac{1}{\omega^{q+2}} \quad (7-2)$$

Mientras que para valores de ω tales que $\omega p/v > 1$ las funciones de Bessel decaen exponencialmente¹⁰:

$$K_\nu(x) \sim (\pi/2x)^{1/2} e^{-x} \quad (7-3)$$

con lo cual, para energías transferidas muy grandes, la sección eficaz diferencial tiende a 0 de la siguiente forma:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dp} \sim \frac{v}{p} \omega^{-q-1} e^{-\omega p/v} \quad (7-4)$$

Luego, de (7-2) podemos concluir que la principal contribución proviene de los procesos que involucran transferencias de energía próximas al valor mínimo, que es del orden del potencial de ionización. Por lo tanto este tipo de colisiones, que nosotros denominamos distantes, son desde el punto de vista energético, colisiones débiles.

Es interesante notar que en el término despreciado en la expresión (5-6) de T_{lm}, la contribución de las colisiones violentas, esto es, con transferencias de energías de orden de la inicial del proyectil, es despreciable frente a la proveniente de las débiles, la cual se haya manifestada totalmente en el primer término de dicha expresión.

Para mostrar lo dicho anteriormente realizamos el siguiente tratamiento aproximado del segundo término de (5-6):

$$T_{em}^{(2)} \sim \frac{(m_1+m_2)}{(\beta^2/4+k^2)} \int_0^\infty dx \frac{\text{sen}(q_0 x)}{\cos(q_0 x)} \frac{x^n}{R^\delta} e^{-\beta R/2} \text{sen} [kR + \eta \ln(2kR) + \phi_e] =$$

$$\frac{(m_1+m_2)}{(\beta^2/4+k^2)} \left\{ \frac{e^{i\phi_e}}{2i} \int_0^\infty dx \frac{\text{sen}(q_0 x)}{\cos(q_0 x)} \frac{x^n}{R^\delta} e^{-(\beta/2-ik)R} - \frac{e^{-i\phi_e}}{2i} \int_0^\infty dx \frac{\text{sen}(q_0 x)}{\cos(q_0 x)} \frac{x^n}{R^\delta} e^{-(\beta/2+ik)R} \right\} \quad (7-5)$$

Para los casos donde $k \sim v$, $q_0 \sim k \gg 1$, la principal contribución a la integral proviene de valores de x muy pequeños, y teniendo en cuenta que la convergencia de dicha integral está asegurada a través de la exponencial decreciente, podemos aproximar:

$$\text{sen}(\varphi_0 x) \sim \text{sen}(kx) \sim kx$$

$$\text{cos}(\varphi_0 x) \sim \text{cos}(kx) \sim 1 \quad (7-6)$$

con lo cual estimaremos en realidad una cota superior del resultado correcto.

Introduciendo (7-6) en (7-5) obtenemos, considerando n par:

$$T_{em}^{(2)} \sim \frac{(m_1 + m_2)}{k^2} e^{-\beta p/2} p^{-j+n} \cos(kp + \phi_e) \quad (7-7)$$

Vemos así que la contribución de las colisiones violentas a este término es tanto más pequeña cuanto mayor es el parámetro de impacto respecto del radio de la capa. Además, la dependencia con la energía transferida es principalmente a través de una función que oscila fuertemente para los casos $kp \gg 1$.

II-8 FUERZA UNIFORME SOBRE EL ATOMO.

Encararemos ahora de una manera análoga a como ya lo hizo Williams en el año 1932³⁰, para el caso del átomo de Hidrógeno como blanco, la aproximación de la sección eficaz diferencial para colisiones distantes. Esta forma de verlo permite identificar la transición dipolar con la originada por la acción de una fuerza perturbadora uniforme sobre el átomo $\vec{F} = \vec{F}(t) \cdot \check{r}$ (siendo \check{r} el versor en la dirección de \vec{r}), resultando en estos casos la probabilidad determinada por los elementos de matriz de las coordenadas de \vec{r} , $\langle k | x_i | 0 \rangle$.

Williams justifica que su tratamiento es válido solo para velocidades del proyectil grandes comparadas con la característica del electrón basándose en el primer orden del cálculo perturbativo utilizado, ya que si el proyectil es lento, la perturbación producida en el átomo de H deja de ser pequeña.

Para proyectiles muy livianos respecto del blanco, como es nuestro caso, aún a velocidades pequeñas de los mismos, el primer orden sigue siendo bueno para describir la perturbación. Por lo tanto en un tratamiento como el que detallaremos a continuación, no podemos determinar la región de velocidades para la cual el mismo es válido.

Si consideramos que para los valores de la coordenada electró-

nica r que contribuyen apreciablemente, $r \sim \beta^{-1}$, se cumple siempre que R es mayor, podemos aproximar el desarrollo multipolar del potencial $V(\vec{r}, t)$, (4-4), por la expresión:

$$V(\vec{r}, t) \sim -4\pi Z_1 \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell+1} \frac{r^\ell}{R^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\check{R}) Y_{\ell m}(\check{r}) \quad (8-1)$$

lo cual es equivalente a considerar en el desarrollo anterior del cálculo, el factor de forma dado solamente por el primer término:

$$f_\ell^i(R) \sim \frac{B_\ell^i}{R^{\ell+1}} \quad (8-2)$$

Reemplazando (8-1) en la expresión (2-2) de la amplitud de transición:

$$a_{\mathbf{k}}(p, \omega) = -4\pi i Z_1 \sum_{\ell m} \frac{1}{2\ell+1} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{no}t} \frac{Y_{\ell m}^*(\check{R})}{R^{\ell+1}} \langle \mathbf{k} | r^\ell Y_{\ell m}(\check{r}) | 0 \rangle \quad (8-3)$$

De (8-3) vemos que la transición correspondiente a $l = 0$, correspondiente a un potencial constante, se anula por la ortogonalidad entre el estado inicial y el final. Por lo tanto, para valores de R grandes, la más importante es la correspondiente a $l = 1$, que como se puede ver fácilmente, es originada por una fuerza $\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} V(\vec{r}, t)$ independiente de la posición \vec{r} del electrón.

$$\vec{F}(\vec{r}) \stackrel{\text{dip.}}{=} -\frac{1}{R^2} \left\{ \sqrt{\frac{3}{4\pi}} Y_{10}^*(\check{R}) \check{z} + 2\sqrt{\frac{3}{8\pi}} Y_{1-1}^*(\check{R}) \check{x} \right\} \quad (8-4)$$

Para obtener la probabilidad de transición para una dada transferencia de energía, debemos sumar sobre todos los estados finales con la misma energía. Si los mismos pertenecen al continuo, esto significa una integración sobre todas las direcciones posibles del impulso del electrón eyectado:

$$\frac{d^2\sigma}{dpd\omega} = Z_1^2 (4\pi)^2 \int d\check{k} \sum_{\ell_1 m_1} \frac{1}{2\ell_1+1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega_{no}t}}{R^{\ell_1+1}} Y_{\ell_1 m_1}^*(\check{R}) \langle \mathbf{k} | r^{\ell_1} Y_{\ell_1 m_1}(\check{r}) | 0 \rangle$$

$$\sum_{\ell_2 m_2} \frac{1}{2\ell_2+1} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{e^{-i\omega_{no}t'}}{R^{\ell_2+1}} Y_{\ell_2 m_2}(\check{R}) \langle \mathbf{k} | r^{\ell_2} Y_{\ell_2 m_2}(\check{r}) | 0 \rangle^* \quad (8-5)$$

De la integral en las coordenadas angulares de \vec{r} surgen determinadas reglas de selección para l_1, m_1 , iguales evidentemente que las correspondientes para l_2, m_2 . Teniendo en cuenta el desarrollo en ondas parciales del estado final, vemos de la integral en $d\vec{k}$, que l_1, m_1 , debe ser igual a l_2, m_2 .

$$\frac{d^2\sigma}{dpd\omega} = Z_1^2 (4\pi)^2 \sum_{\ell m} \frac{1}{(2\ell+1)^2} |\langle R | r^\ell Y_{\ell m}(\vec{r}) | 0 \rangle|^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega_{no}t}}{R^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\vec{R}) \right|^2 \quad (8-6)$$

Si los estados finales pertenecen al espectro discreto, el razonamiento efectuado para llegar a (8-6) es completamente similar, partiendo de una suma sobre todos los estados caracterizados por l, m que corresponden a la misma energía, en lugar de una integración en $d\vec{k}$.

De (8-6) vemos que si el estado inicial es esféricamente simétrico, el término dipolar del potencial selecciona el estado del continuo con $l = 1$. Para la subcapa $2p$, teniendo en cuenta resultados del tipo de (4-35), éste selecciona los estados finales con $l = 0$ y $l = 2$.

Es interesante la forma (8-6) para la sección eficaz diferencial, pues en ella se observa que interviene la transformada de Fourier de la dependencia temporal de la fuerza perturbadora, correspondiente a la frecuencia característica de la transición ω_{no} , para cada término multipolar del desarrollo:

$$F_{(\omega_{no})}^{\ell m} = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{no}t} F(t)^{\ell m} \quad (8-7)$$

Analicemos ahora específicamente el término dipolar de (8-6):

$$\frac{d^2\sigma^{dip.}}{dpd\omega} = \frac{Z_1^2 (4\pi)^2}{9} \sum_{m=-1}^1 |\langle R | r Y_{1m}(\vec{r}) | 0 \rangle|^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega_{no}t}}{R^2} Y_{1m}^*(\vec{R}) \right|^2 \quad (8-8)$$

Si el estado $|0\rangle$ es esféricamente simétrico, es claro que se puede reducir (8-8) a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma^{dip.}}{dpd\omega} = & \frac{Z_1^2 (4\pi)^2}{9} |\langle R | r Y_{10}(\vec{r}) | 0 \rangle|^2 \left\{ \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega_{no}t}}{R^2} Y_{10}^*(\vec{R}) \right|^2 \right. \\ & \left. + 2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega_{no}t}}{R^2} Y_{11}^*(\vec{R}) \right|^2 \right\} \quad (8-9) \end{aligned}$$

Resolviendo las integrales en el tiempo, y teniendo en cuenta que:

$$|\langle K | r | Y_{10}(\hat{r}) | 0 \rangle|^2 = \frac{3}{4\pi} |Z_{K0}|^2 \quad (8-10)$$

podemos reescribir (8-9) de la siguiente forma:

$$\frac{d^2 \sigma_K^{dip}}{d\omega dp} = \frac{4Z_{K1}^2}{V^2} |Z_{K0}|^2 q_0^2 [K_1^2(q_0 p) + K_0^2(q_0 p)] \quad (8-11)$$

Por ejemplo para la capa K como estado inicial, y sabiendo que

$$|Z_{K0}|^2 = \frac{8\beta^3 (B_1^0)^2}{3\pi R} \quad (8-12)$$

se comprueba la completa equivalencia entre (8-11) y la expresión (6-3) anteriormente obtenida.

Para la capa L como estado inicial, la contribución más importante a (8-6) puede escribirse en forma análoga a (8-11):

$$\frac{d^2 \sigma_L^{dip}}{d\omega dp} \sim \frac{4Z_{L1}^2}{V^2} q_0^2 [|\langle K | Z | 2p-1 \rangle|^2 + |\langle K | Z | 2p0 \rangle|^2 + |\langle K | Z | 2p-1 \rangle|^2] [K_1^2(q_0 p) + K_0^2(q_0 p)] \quad (8-13)$$

la cual es a su vez idéntica a la expresión (6-11)

Vemos así que para el caso de colisiones distantes, donde es válido considerar a la fuerza perturbadora como si fuese uniforme sobre el átomo, la sección eficaz diferencial puede escribirse en términos de elementos de matriz de la coordenada electrónica, y de la componente de Fourier de la fuerza correspondiente a una frecuencia igual a la característica de la transición.

Estos elementos de matriz Z_{1k0} son los que determinan los llamados "oscillator strength", definidos como:³¹

$$f_{K0} = 2(\omega_R - \omega_0) |Z_{K0}|^2 \quad (8-14)$$

y cuya densidad espectral interviene en la determinación del coeficiente de absorción de radiación electromagnética de un átomo, para grandes longitudes de onda de la misma. Si uno analiza el espectro de f_{k0} comprueba que, excepto para el Hidrógeno, el continuo de un átomo representa la mayor parte del mismo, por lo cual usualmente se incluye al discreto como un apéndice de éste³¹.

La evaluación del oscillator strength implica el conocimiento de las funciones de onda del átomo, luego ésta es posible en forma exacta sólo para el caso del átomo de Hidrógeno.

El cálculo de la energía media absorbida por un átomo en una colisión que involucre una pequeña transferencia de impulso, se reduce en el tratamiento de Bethe, a la determinación del momento de orden 0 de la distribución de los oscillators strength¹⁷:

$$S_0 = \sum_R f_{k0} \quad (8-15)$$

El resultado de esta suma, para el átomo completo, describiendo sus funciones de onda mediante determinantes de Slater, satisface la regla de suma de Thomas - Reiché - Kuhn³¹.

$S_0 = Z$ siendo Z el número total de electrones. viéndose además en esta formulación que cada capa no contribuye al total en una fracción igual al número de electrones de la misma, siendo la contribución por electrón mayor para las externas que para las internas³¹. Pero una evaluación precisa de la misma no es posible en general.

II-9 INTEGRACION ANALITICA EN PARAMETRO DE IMPACTO. FORMULAS APROXIMADAS PARA LA PERDIDA DE ENERGIA MEDIA Y SU FLUCTUACION.

Analizaremos en esta sección la contribución de las colisiones distantes y con transferencias de energías próximas al umbral de ionización para proyectiles que viajan a través de sólidos amorfos. Mostraremos que el resultado es idéntico al que se obtiene cuando en el cálculo basado en la sección eficaz en primera aproximación de Born, se consideran solo las colisiones débiles.

9-a) Transición capa $K - l = 1$ del continuo

Integrando en parámetro de impacto la expresión (6-3) desde un valor mínimo del mismo consistente con la región de validez de esta aproximación:

$$\frac{d\sigma^{k-k_0}}{d\omega} = \int_{p_{\min.}}^{\infty} dp \, 2\pi p \frac{d\sigma}{d\omega dp} = \frac{64 Z_1^2 \beta^3 (B_1^0)^2}{3 R} \frac{\omega p_{\min.}}{v^2} K_0(q_0 p_{\min.}) K_1(q_0 p_{\min.}) \quad (9-1)$$

donde hemos utilizado el resultado²⁹:

$$\int_{x_0}^{\infty} dx \, x [K_1^2(x) + K_0^2(x)] = x_0 K_1(x_0) K_0(x_0) \quad (9-2)$$

La energía media perdida y su fluctuación están dadas, respectivamente, por:

$$\langle \Delta E \rangle = \int_{\omega_{\min.}}^{\infty} d\omega \, \omega \, d\sigma/d\omega \quad (9-3)$$

$$\langle \Omega^2 \rangle = \int_{\omega_{\min.}}^{\infty} d\omega \, \omega^2 \, d\sigma/d\omega \quad (9-4)$$

Si tenemos en cuenta ahora que los valores de ω que contribuyen apreciablemente a la integral son del orden de $\omega_{\min.}$, y consideramos que para los mismos se cumple la siguiente relación:

$$\frac{\omega p_{\min.}}{v} < 1 \quad (9-5)$$

podemos reemplazar en (9-1) las funciones de Bessel por sus expresiones asintóticas:

$$K_1(x) \sim 1/x \quad - \quad K_0(x) \sim \ln(1/x) \quad \rightarrow \quad x < 1 \quad (9-6)$$

y despreciando además k frente a β en la expresión de B_1^0 , resulta:

$$\frac{d\sigma^k}{d\omega} \sim \frac{2^{12} \pi e^{-4} Z_1^2 \beta^6}{3 \cdot 2^6 \cdot v^2} \frac{1}{\omega^5} \ln\left(\frac{v}{\omega p_{\min.}}\right) \quad (9-7)$$

donde ya hemos incluido los 2 electrones de la capa K.

Introduciendo (9-7) en (9-3) y (9-4), y quedándonos solamente con el término principal en la velocidad:

$$\langle \Delta E \rangle \sim \frac{4\pi Z_i^2}{v^2} \left(\frac{2^8 e^{-4}}{9 \Theta_K^3} \right) \ln \left(\frac{v}{\omega_{\min} p_{\min}} \right) \quad (9-8)$$

$$\langle \Omega^2 \rangle \sim \frac{4\pi Z_i^2}{v^2} \left(\frac{2^6 \Theta^{-4}}{3 \Theta_K^2} \right) \beta^2 \ln \left(\frac{v}{\omega_{\min} p_{\min}} \right) \quad (9-9)$$

Consideramos $\omega_{\min} = \Theta_K \beta^2 / 2$
Williams³⁰, partiendo de la expresión (8-11), llega mediante consideraciones totalmente análogas a las realizadas por nosotros, al siguiente resultado para $d\sigma/d\omega$:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} \sim \frac{8\pi Z_i^2 |Z_{K0}|^2}{v^2} \ln \left(\frac{v}{\omega p_{\min}} \right) \quad (9-10)$$

y para el cálculo de la energía media aplica la regla de suma:

$$\sum_K 2 \omega |Z_{K0}|^2 = 1 \quad (9-11)$$

con lo cual obtiene:

$$\langle \Delta E \rangle = \frac{4\pi Z_i^2}{v^2} \ln \left(\frac{v}{\omega_{\min} p_{\min}} \right) \quad (9-12)$$

En nuestro caso, donde describimos mediante un modelo hidrogénico a un átomo multielectrónico, la aplicación de (9-11) no es posible. La misma implicaría la violación del principio de exclusión de Pauli, al incluir estados ocupados como finales posibles. Para el átomo de Hidrógeno aproximadamente la mitad de la energía transferida se gasta en la excitación del mismo al segundo nivel energético ($n=2$). El incluirlo a través de una regla de suma como (9-11) para un átomo donde ese nivel está ocupado, significa una sobreestimación del orden del 50% en el frenamiento.

Bethe¹⁶ discute en forma sencilla las sumas parciales de los oscillator strength, encontrando que están dadas por el número total de electrones

de la capa menos los oscillator strengths correspondientes a las transiciones prohibidas por el principio de Pauli. Así muestra claramente que para una capa interna las contribuciones que se restan son en general siempre positivas ($\omega_{no} > 0$), resultando por lo tanto la suma un número menor que el total de electrones de la misma. Mientras que para una capa externa sucede exactamente lo contrario. Usando funciones hidrogénicas demuestra que la suma de oscillator strengths para las capas internas de átomos pesados disminuye a 0,3 - 0,4 por electrón.

Nuestro resultado (9-8), escrito considerando sólo un electrón en la capa, y $\Theta_k = 1$:

$$\langle \Delta E \rangle = \frac{4\pi Z_1^2}{v^2} (0,26) \ln\left(\frac{v}{\omega_{\min} p_{\min}}\right) \quad (9-13)$$

muestra un factor 0,26 correspondiente a la suma $2\omega_{ko} |Z_{ko}|^2$ sobre todos los estados finales del continuo, en buen acuerdo con lo obtenido por Bethe. Si consideramos $\Theta_k \sim 0,7$, dicho factor adquiere el valor 0,75.

Vemos de (9-9) que $\langle \Omega^2 \rangle$ tiene la misma dependencia con la velocidad que la pérdida de energía media. La contribución de las transferencias de energía próximas al umbral de ionización se manifiesta a través de un término de este tipo sólo cuando se trata cuánticamente el problema¹⁷.

A altas velocidades del proyectil, la contribución de las colisiones débiles representa del orden de la mitad de la pérdida total de energía, mientras que para $\langle \Omega^2 \rangle$ las mismas pueden despreciarse frente al término proveniente de las colisiones violentas $\langle \Omega^2 \rangle \sim 4\pi Z_1^2$.

Primera aproximación de Born:

La sección eficaz doble diferencial en energía e impulso transferido al electrón es²:

$$\frac{d^2\sigma}{dq d\varepsilon} = \frac{8\pi Z_1^2}{v^2} \frac{2}{q^3} |F_\varepsilon(q)|^2 \quad (9-14)$$

donde:

Z_1 es la carga del proyectil.

ε transferencia de energía = $K^2 + \frac{B^2}{2}$, K: impulso del electrón

q : transferencia de impulso.

Cuando se emplean funciones hidrogénicas para describir los

estados electrónicos, $|F_{\epsilon}(q)|^2 d\epsilon$ es una función homogénea de K y q . Introduciendo el siguiente cambio de variables:

$$\epsilon = \frac{W}{\beta^2/2} \quad k = \frac{K}{\beta} \quad Q = \frac{q^2}{\beta^2} \quad (9-15)$$

resulta $|F_{\epsilon}(q)|^2 d\epsilon = |F_W(Q)|^2 dW$

La sección eficaz de ionización, en términos de las nuevas variables (9-15), es:

$$\sigma = \frac{8\pi Z_1^2}{V^2} \beta^{-2} \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} dQ Q^{-2} |F_W(Q)|^2 \quad (9-16)$$

siendo la expresión de $|F_W(Q)|^2$ para el caso de la capa K como estado inicial:

$$|F_W(Q)|^2 = \frac{2^7}{1 - e^{-2\pi/K}} \frac{Q [Q + K^2/3 + 1/3]}{[(Q - K^2 + 1)^2 + 4K^2]^3} e^{-\frac{2}{K} \tan^{-1} [2K/(Q - K^2 + 1)]} \quad (9-17)$$

con

$$W = k^2 + 1 \quad (9-18)$$

y donde ya en (9-14) se ha tenido en cuenta los 2 electrones de la capa.

De la conservación de energía se obtiene:

$$Q_{\min}^2 = 2M [E^{1/2} - (E - \epsilon)^{1/2}]^2 \quad (9-19)$$

y considerando que la transferencia de energía ϵ es pequeña frente a la inicial E del proyectil resulta:

$$Q_{\min} \sim \epsilon/V \quad Q_{\min} = W^2/4\eta \quad \text{con } \eta = v^2/\beta^2 \quad (9-20)$$

W_{\min} corresponde al umbral de ionización, y W_{\max} está dado por la máxima energía transferida a un electrón libre en reposo:

$$W_{\max} \sim 4\eta \quad (9-21)$$

Analicemos ahora la contribución a (9-17) proveniente de las colisiones con pequeñas transferencias de energía, $\omega \sim 1$. Para valores de $k \ll 1$ podemos aproximar el integrando $|F_\omega(Q)|^2 / Q^2$ por:

$$|F_\omega(Q)|^2 / Q^2 = \frac{2^7}{Q} \frac{[Q + k^2/3 + 1/3]}{[(Q - k^2 + 1)^2 + 4k^2]^3} e^{-4/(Q+1)} \quad (9-22)$$

vemos que la principal contribución a la integral ocurre para valores de Q próximos a Q_{\min} . Para el caso de proyectiles rápidos, $v \gg \beta$, Q_{\min} es mucho menor que 1, luego podemos aproximar $e^{-4/(Q+1)}$ por e^{-4} en (9-22), con lo cual la integral en Q se reduce a:

$$\int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_\omega(Q)|^2 dQ / Q^2 = 2^7 e^{-4} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{dQ}{Q} \frac{[Q + \omega/3]}{[Q - (k-i)^2]^3 [Q - (k+i)^2]^3} \quad (9-23)$$

Podemos extender la integración a $Q_{\max} = \infty$ sin ningún problema.

El resultado de (9-23), conservando sólo los términos de primer orden en la velocidad:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} \sim 2^7 e^{-4} \left\{ -\frac{1}{3\omega^5} \ln\left(\frac{\omega^2}{4\eta}\right) + \frac{1}{3\omega^5} \ln\left[\left(\frac{\omega^2}{4\eta} - k^2 + 1\right)^2 + 4k^2\right]^{1/2} \right\} \quad (9-24)$$

considerando que $k \sim 0$, y $4\eta/\omega^2 \gg 1$, (9-24) se reduce a:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} \sim \frac{2^7 e^{-4}}{3\omega^5} \ln(4\eta/\omega^2) \quad (9-25)$$

La pérdida de energía media, considerando sólo las colisiones débiles, está dada por:

$$\langle \Delta E \rangle^{pWBA, \text{ débiles}} \sim \frac{4\pi Z_1^2}{v^2} \left(\frac{2^7 e^{-4}}{3} \right) \int_{\omega_{\min}}^{\infty} d\omega \omega^{-4} \ln(4\eta/\omega^2) \quad (9-26)$$

Integrando por partes, el término más importante en la velocidad resulta:

$$\langle \Delta E \rangle^{pWBA, \text{ débiles}} \sim \frac{4\pi Z_1^2}{v^2} \left(\frac{2^7 e^{-4}}{9\theta_k^3} \right) \ln(4\eta) \quad (9-27)$$

Si en la expresión (9-8) consideramos $p_{\min} = \beta^{-1}$, extrapola-

ción posible dado la dependencia logarítmica en el mismo, vemos que ésta resulta equivalente a la (9-27) obtenida usando la primera aproximación de Born. De esta equivalencia surge entonces que para colisiones débiles con proyectiles veloces, los parámetros de impacto grandes son los que contribuyen efectivamente.

Esto último resulta también del análisis de la integral temporal de la fuerza perturbadora:

$$\int_0^T F(t) e^{i\omega t} dt$$

siendo T el tiempo efectivo de la colisión, que es del orden de p/v . La principal contribución a la integral en el tiempo resulta de $T \sim \omega^{-1}$, lo cual define un parámetro de impacto óptimo $p_0 \sim v/\omega$. Para valores de $p \gg p_0$, teniendo en cuenta que $F(t)$ varía poco en un período de $e^{i\omega t}$, el integrando contribuye en forma despreciable. Dicho de otra forma, la componente de Fourier de la fuerza en la aproximación dipolar:

$$F(\omega) \propto q_0^2 \{ K_1^2(q_0 p) + K_0^2(q_0 p) \} \quad (9-28)$$

decae fuertemente para valores de $\omega \gg v/p$, luego para parámetros de impacto $p \gg v/\omega_{\text{mín}}$, la frecuencia máxima efectiva del espectro es menor que $\omega_{\text{mín}}$, no existiendo para tales casos frecuencias en el desarrollo de Fourier de F suficientemente altas como para excitar el átomo³⁰. Esto significa, que para $p \gg p_0$ la evolución del sistema es netamente adiabática, siendo por lo tanto nula la transferencia de energía.

En el estudio de los procesos de ionización de capas internas a bajas energías, vimos también que los parámetros de impacto que más contribuyen a la excitación son del orden de p_0 .

A velocidades grandes del proyectil p_0 es mucho mayor que el radio de la capa. Por lo tanto, la inclusión de parámetros de impacto menores que β^{-1} no produce una modificación apreciable en el cálculo del frenamiento en tales casos. Esto es válido por supuesto, sólo para las colisiones débiles.

9-b) Transición subcapa $2s - 1 = 1$ del continuo. Transición subcapa $2p - 1 = 2$.

Con idénticas consideraciones a las realizadas para el caso

de la capa K, obtenemos:

$$\langle \Delta E \rangle^{2s-\ell=1} \sim \frac{4\pi Z_1^2}{v^2} \left(\frac{e^{-8} 2^{11}}{3 \theta_s^3} \right) \ln \left(\frac{v}{\omega_{\min} p_{\min}} \right) \quad (9-29)$$

$$\langle \Delta E \rangle^{2p-\ell=2} \sim \frac{4\pi Z_1^2}{v^2} \left(\frac{e^{-8} 2^{16}}{54 \theta_{2p}^6} \right) \ln \left(\frac{v}{\omega_{\min} p_{\min}} \right) \quad (9-30)$$

Pero estas expresiones no constituyen una buena aproximación analítica cuando se consideran funciones hidrogénicas modificadas. En este caso, para valores de $\omega \sim \omega_{\min}$, dado por el valor real del átomo, no es posible despre-
ciar $|k|$ frente a β .

II-10 DISCUSION Y RESULTADOS

Aplicamos nuestro cálculo al caso de protones canalizados en la dirección $\langle 111 \rangle$ del Si. Este es el canal más estrecho, su radio es del orden de 2,42 u.a., veremos que para el mismo, la contribución de las capas internas al frenamiento total representa ya un 20% para energías del protón del orden de 2 MeV.

Los umbrales de excitación utilizados³² son, en unidades atómicas:

capa K ----- 67,6
 subcapa 2s(L_I) = 5,47
 subcapa 2p(L_{II,III}) = 3,64

Para el caso de la capa K como estado inicial, la diferencia entre el cálculo completo utilizando la expresión (4-62) y el aproximado considerando sólo el primer término de la misma resulta:

- 1º) Para $v = 30$ u.a., $p = 1$ u.a.: del orden del 8%
- 2º) Para $v = 15$ u.a., $p = 2,42$ u.a.: del orden del 2%

También verificamos que la contribución de la transición al estado con $l = 2$ del continuo representa un 6% de la dipolar para $v = 15$ u.a. y $p = 2,42$ u.a.

10-a) Capa K

Utilizando la expresión (6-3), e integrando numéricamente en energía transferida calculamos $\langle \Delta E(p) \rangle$ y $\langle \Sigma^2(p) \rangle$. En las figuras (II-1) y (II-2) se muestran para el caso de $p = 2,42$ u.a., en función de la velocidad inicial del proyectil. Para una $v = 30$ u.a., $\langle \Delta E(p) \rangle$ y $\langle \Sigma^2(p) \rangle$ disminuyen en 5 órdenes de magnitud su valor al variar el parámetro de impacto de 2,42 a 4,84 u.a.. Si uno tiene en cuenta que para esta velocidad $p_0 \sim v / \omega \sim 0,4$ u.a., comprueba efectivamente que la excitación de la capa K para estos valores de $p \gg p_0$, es despreciable.

En la figura (II-3) mostramos los resultados obtenidos para $\langle \Delta E \rangle$ de la integración numérica en energía transferida utilizando la expresión (6-3), previamente integrada analíticamente en parámetro de impacto desde un valor mínimo del mismo igual al radio de la capa. Los valores predichos por la aproximación analítica (9-13) difieren en menos del 3% de los calculados numéricamente para $v \approx 30$ u.a.. En esta figura también incluimos los valores de $\langle \Delta E \rangle$ que resultan de considerar todo tipo de colisiones, calculados usando la sección eficaz doble diferencial en primera aproximación de Born, (9-16), (9-17). Vemos en la figura (II-4) que la relación $\langle E^{\text{débiles}} \rangle / \langle E^{\text{PWBA}} \rangle$ tiende al valor 0,5 para velocidades altas del proyectil. Esto está de acuerdo con lo que establece la regla de equipartición³³; a altas velocidades del proyectil, el frenamiento se debe a iguales contribuciones de las colisiones débiles y violentas.

10-b) Capa L

En las figuras (II-5), (II-6), (II-7) y (II-8) graficamos $\langle \Delta E(p) \rangle$ y $\langle \Sigma^2(p) \rangle$ en función de la velocidad del proyectil, para distintos parámetros de impacto, obtenidas utilizando las expresiones (6-7) y (6-10) para las subcapas 2s y 2p respectivamente. Vemos en todos los casos que la máxima contribución ocurre para velocidades del orden de $\omega_{\text{mín}} \times p$, y que el rango de parámetros de impacto que contribuyen es mayor a medida que la velocidad crece.

10-c) Cálculo de la pérdida de energía media por unidad de camino para proyectiles canalizados.

Para calcular la misma debemos sumar las contribuciones provenientes de los electrones de valencia y de los electrones internos.

Electrones de valencia

El frenamiento por un gas de electrones, considerando separadamente las excitaciones individuales y colectivas, está dado por la siguiente expresión:

$$S_v = \frac{4\pi Z_v^2 \rho}{v^2} \left[Z_v \ln \frac{v}{v_F} + Z_{loc} \ln \frac{2v v_F}{\omega_p} \right] \quad (10-1)$$

siendo ρ la densidad del medio (n° átomos por unidad de volumen), ρZ_v corresponde a la densidad del plasma, y ρZ_{loc} a la densidad local, v_F es la velocidad de Fermi, y ω_p la frecuencia de plasma.

Para el Si, $Z_v = 4$, se comprueba experimentalmente que para la dirección $\langle 111 \rangle$, $Z_{loc} \sim 4,1^{34}$, luego en este caso podemos reducir (10-1) a la siguiente expresión:

$$S_v \sim \frac{4\pi Z_v^2 \rho}{v^2} Z_v \ln \left(\frac{2v^2}{\omega_p} \right) \quad (10-2)$$

que es la que utilizamos para el cálculo de la contribución de los electrones de valencia al frenamiento total.

Electrones internos:

El frenamiento de un proyectil canalizado en un cristal por excitación de las capas internas de los átomos blancos, se calcula mediante la expresión:

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_{\text{core}} = \frac{1}{d} \sum_i S_i \Delta E(p_i) \quad (10-3)$$

donde d es el parámetro de la red, S_i es el número de átomos a la misma distancia p_i , situados en un plano perpendicular a la dirección de movimiento del proyectil. Detallamos a continuación los datos utilizados para S_i , dirección 111 :

<u>S_i</u>	<u>p_i (u.a.)</u>	<u>S_i</u>	<u>p_i (u.a.)</u>
3	2.42	6	8.71
3	4.84	3	9.67
6	6.41	6	10.54

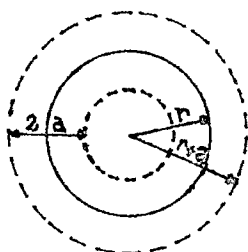
$$d = 8.9 \text{ u.a.}$$

$$\rho = 7.44 \cdot 10^{-3} \text{ u.a.} \quad \dots \quad \omega_p = 0.61 \text{ u.a.}$$

A velocidades del proyectil suficientemente altas, para las cuales el radio del canal es mucho menor que $v / \omega_{\text{mín}}$, la suma en (10-3) incluye numerosas filas de átomos. En estos casos puede considerarse una distribución continua de parámetros de impacto, resultando así :

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) \sim \rho \int_{p_{\text{mín}}}^{\infty} dp \, 2\pi p \, \Delta E(p) \quad (10-4)$$

Para la determinación de $p_{\text{mín}}$ usamos el siguiente criterio:



$$\rho d \pi [(r+a)^2 - (r-a)^2] = 3$$

Esto es, el número de átomos comprendidos en el volumen $\pi [(r+a)^2 - (r-a)^2] \cdot d$ debe ser igual a 3. Así obtenemos $p_{\text{mín}} = r - a = 0.93 \text{ u.a.}$

Para $v = 40 \text{ u.a.}$, la relación entre (10-3) y (10-4) es 0.83, mientras que para $v = 5 \text{ u.a.}$, dicha relación es 0.3.

En la figura (II-10) mostramos el frenamiento total, y las contribuciones de los electrones internos y de valencia separadamente, para el caso de un protón canalizado en la dirección $\langle 111 \rangle$ de Si. La contribución de la excitación de la capa 2s puede despreciarse en este rango de energías. No así la de la capa 2p que representa un porcentaje considerable del frenamiento total a energías altas (del orden del 30% para $E = 10 \text{ MeV}$). El acuerdo con la experiencia³⁵ es satisfactorio, como puede verse de la misma figura.

10-d) Comparación con el modelo del oscilador:

De las expresiones (8-11) y (8-13) vemos que la sección eficaz

doble diferencial es proporcional a la energía transferida a un electrón ligado armónicamente con frecuencia ω . La constante de proporcionalidad es $2|Z_{k0}|^2$.

Si para las energías transferidas que contribuyen apreciablemente, $\omega \sim \omega_{\min}$, se cumple $\omega \ll v/p$, podemos despreciar la variación de $e^{i\omega t}$ con el tiempo en la transformada de Fourier de la fuerza³⁰:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dp} = \left| \int_0^T F(t) e^{i\omega t} dt \right|^2 |Z_{k0}|^2 \sim \left| \int_0^T F(t) dt \right|^2 |Z_{k0}|^2 \quad (10-5)$$

En tal caso la energía media perdida está dada por:

$$\langle \Delta E(p) \rangle \sim \left| \int_0^T F(t) dt \right|^2 \int_{\omega_{\min}}^{\infty} |Z_{k0}|^2 \omega d\omega \quad (10-6)$$

Por lo tanto, nuestros resultados en el límite $q_0 p \ll 1$ son equivalentes a los obtenidos del modelo del oscilador afectados por un factor que representa la suma de los "oscillator strength" sobre todos los estados finales posibles.

De la figura (II-9) vemos que para la subcapa 2s, la $\sum_k f_{k0}$ es del orden de 0.5, y para la capa 2p resulta del orden de 2. Si tenemos en cuenta que el efecto de apantallamiento por los electrones externos es más notable para esta subcapa, es razonable que dicha suma supere la unidad, como ocurre ya para capas externas³¹. Se ha encontrado³⁶ que el uso de funciones hidrogénicas modificadas sobreestima la sección eficaz diferencial de ionización de la capa L, especialmente en los procesos con pequeñas transferencias de energía. Esto puede explicar el valor demasiado grande que resulta para la $\sum_k f_{k0}$.

Para la capa K, dado que el rango de velocidades analizado corresponde a valores de $q_0 p > 1$, no esperamos un buen acuerdo con (10-6).

II-11 CONCLUSIONES

La formulación semiclásica de la colisión de un ión con un átomo pesado permite comprobar que sólo las pequeñas transferencias de energía contribuyen apreciablemente a la excitación de las capas internas del blanco, cuando el proyectil es distante y rápido.

Hemos mostrado que la transición dipolar ($\Delta l = 1$) es la predominante en estos casos, y que la misma es originada por la acción de una fuerza uniforme sobre el átomo. La sección eficaz diferencial queda determinada por la componente de Fourier de la fuerza perturbadora, correspondiente a una frecuencia igual a la característica de la transición, y por los elementos de matriz de las coordenadas electrónicas.

Para el cálculo de la energía media perdida y su fluctuación, realizamos una integración numérica en energía transferida, incluyendo todos los estados finales posibles en una forma aproximada. Describimos el espectro continuo que constituye la principal contribución, mediante funciones hidrogénicas modificadas para reproducir satisfactoriamente las características del átomo real. De esta forma, para el caso en el cual el tiempo de colisión es mucho menor que el período característico del electrón en su órbita, determinamos los momentos de orden 0 y 1 de la distribución de los oscillators strength para las capas K y L. La aplicación de reglas de suma para la determinación de los mismos no es posible puesto que describimos un átomo multieletrónico mediante un modelo hidrogénico.

Para la capa K del Si, si consideramos el factor $\Theta_k \sim 0.7$ que tiene en cuenta el apantallamiento producido por los electrones externos, obtenemos un valor de $S_0 \sim 0.75$ por electrón, que está en muy buen acuerdo con lo obtenido utilizando un potencial de Hartree - Slater³⁸. Mientras que para la capa L, subcapa 2p, el carácter de capa externa de la misma queda manifestado a través de un S_0 por electrón mayor que la unidad, pero el valor resulta demasiado grande debido a que la descripción mediante funciones hidrogénicas no es realmente buena en este caso.

Encontramos que para velocidades tales que $v / \omega_{\text{mín}}$ es del orden del radio del canal, las capas internas contribuyen apreciablemente al frenamiento total.

La contribución de las capas internas a la desviación cuadrática media de la energía perdida se manifiesta a través de un término cuya dependencia con la velocidad es idéntica a la del frenamiento. Por lo tanto la misma resulta despreciable frente al $\langle \Omega^2 \rangle$ total en el rango de energías altas.

REFERENCIAS

- 1- J. Bang and J. M. Hansteen, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd., 31, N° 13 (1959)
- 2- E. Merzbacher and H. W. Lewis, Hand. Der Phys., 34, 166 (1958)
- 3- G. Basbas, W. Brandt and R. Laubert, Phys. Rev. A7, 983 (1973)
- 4- M. Pauli and D. Trautmann, J. Phys. B11, 667 (1978)
- 5- W. Brandt, R. Laubert and I. Sellin, Phys. Rev., 151, 56 (1966)
- 6- J. U. Andersen, E. Laegsgaard, M. Lund and C. D. Moak, Nucl. Instr. Meth. 132, 507 (1976)
- 7- G. Basbas, W. Brandt, and R. H. Ritchie, Phys. Rev. A7, 1971 (1973)
- 8- M. Kleber, J. Phys., B11, 1069 (1978)
- 9- T. H. Rihan, B. Muller and W. Greiner, J. Phys. B12, 761 (1979)
- 10- Handbook of Mathematical Functions, edited by M. Abramowitz and I. Stegun (Dover, New York, 1963)
- 11- J. Hansteen, Adv. in Atom. and Molec. Phys., 11, 299 (1975)
- 12- E. Laegsgaard, J. M. Andersen and M. Lund, Electronic and Atomic Collisions, Proc. of the 10th. I.C.P.E.A.C., Paris, Ed. by G. Watel (North-Holland Pub. Co., Amsterdam-New York, 1978)
- 13- T. J. Gray, P. Richard, R. L. Kauffman, T. C. Holloway, R. K. Gardner, G. M. Light, and J. Guertin, Phys. Rev. A13, 1344 (1976)
- 14- R. M. Wheeler, R. P. Chaturvedi, J. L. Duggan, J. Tricomi and P. D. Miller, Phys. Rev. A13, 958 (1976)
- 15- N. Bohr, Phil. Mag., 25, 10 (1913)
- 16- H. A. Bethe, Ann. Phys., 5, 325 (1930)
- 17- U. Fano, Annual Rev. Nucl. Sc., 13, 1 (1963)
- 18- J. Lindhard, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd., 28, N°8 (1954)-
J. Lindhard, A. Winther, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat-Fys. Medd., 34, N°4 (1964)
- 19- D. Pines, Elementary Excitations in Solids (Benjamin, Inc. NewYork) (1964)
- 20- J. D. Jackson, Electrodinámica Clásica (Alhambra S.A., 1ª edición), 424(1966)
- 21- K. W. Hill, Merzbacher, Phys. Rev. A, 9, 156 (1974)
- 22- S. Datz, C. Erginsay, G. Leibfried, H. O. Lutz, Ann. Rev. Nucl. Sc., 17, 129 (1967)

- 23- K. Dettmann, M. T. Robinson, Phys. Rev. B, 10 (1974)
- 24- E. J. Williams, Rev. Mod. Phys., 17, 217 (1945)
- 25- M. C. Walske, Phys. Rev., 88, 1283 (1952)--Phys. Rev., 101, 940 (1955)
- 26- O. Aashmar, L. Kocbach, J. Phys. B, 10, 869 (1977)
- 27- H. A. Bethe, E. E. Salpeter, Quantum Mech. of one and two-electron-atoms, Ac. Press Inc., New York (1957)
- 28- M. R. C. McDowell, J. P. Coleman, Introduction to the theory of ion-atom collisions, North-Holland Co., London (1970)
- 29- I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, Table of Integrals Series and Products, 4th edition, New York (1965)
- 30- E. J. Williams, Proc. Roy. Soc. A139, 163 (1933)
- 31- U. Fano, J. W. Cooper, Rev. Mod. Phys., 40, 441 (1968)
- 32- J. A. Bearden, Rev. Mod. Phys., 31, (1967)
- 33- N. Bohr, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat-Fys. Medd., 18, N^o8 (1948)
- 34- D. S. Gemmell, Rev. Mod. Phys., 46, N^o1, 129 (1974)
- 35- G. Della Mea. A. V. Drigo, S. LoRusso, P. Mazzoldi, Atomic Collisions in Solids II, 385 (1971)--B. R. Appleton, C. Erginsoy, W. M. Gibson, Phys. Rev., 161, 330 (1967)
- 36- W. Brandt, G. Lapick, Phys. Rev. A, 20, 465 (1979)
- 37- G. N. Watson, A treatise on the theory of Bessel Functions, 2nd ed. (1966)
- 38- J. L. Dehmer, M. Inokuti, R. P. Saxon, Phys. Rev. A, 12, 102 (1975)

DESCRIPCION DE LAS FIGURAS

Figuras I-1 y I-2 : Probabilidad de ionización I_p en función del parámetro de impacto para los casos de H^+ y C^{6+} incidiendo sobre un blanco de Cu. Las curvas llenas corresponden a la carga efectiva optimizada a lo largo de la trayectoria del proyectil, las con líneas de trazo resultan cuando evaluamos dicha carga en el punto de máximo acercamiento. Ambas curvas coinciden para el caso de H^+ de 1 MeV.

Figura II-1 : Energía media perdida en función de la velocidad del proyectil, para el caso de excitación de la capa K del Si por protones. La curva de línea llena corresponde al cálculo en aproximación semiclásica, y la de línea de trazos al modelo del oscilador. El parámetro de impacto que se considera es 2.42 u.a. .

Figura II-2 : Desviación cuadrática media de la energía perdida en función de la velocidad para el mismo caso que en la figura anterior.

Figura II-3 : La curva de línea llena representa el frenamiento de protones por excitación de la capa K del Si en función de la velocidad del proyectil, cuando se consideran sólo las colisiones débiles. La de trazos corresponde al cálculo en primera aproximación de Born, que incluye todo tipo de colisiones.

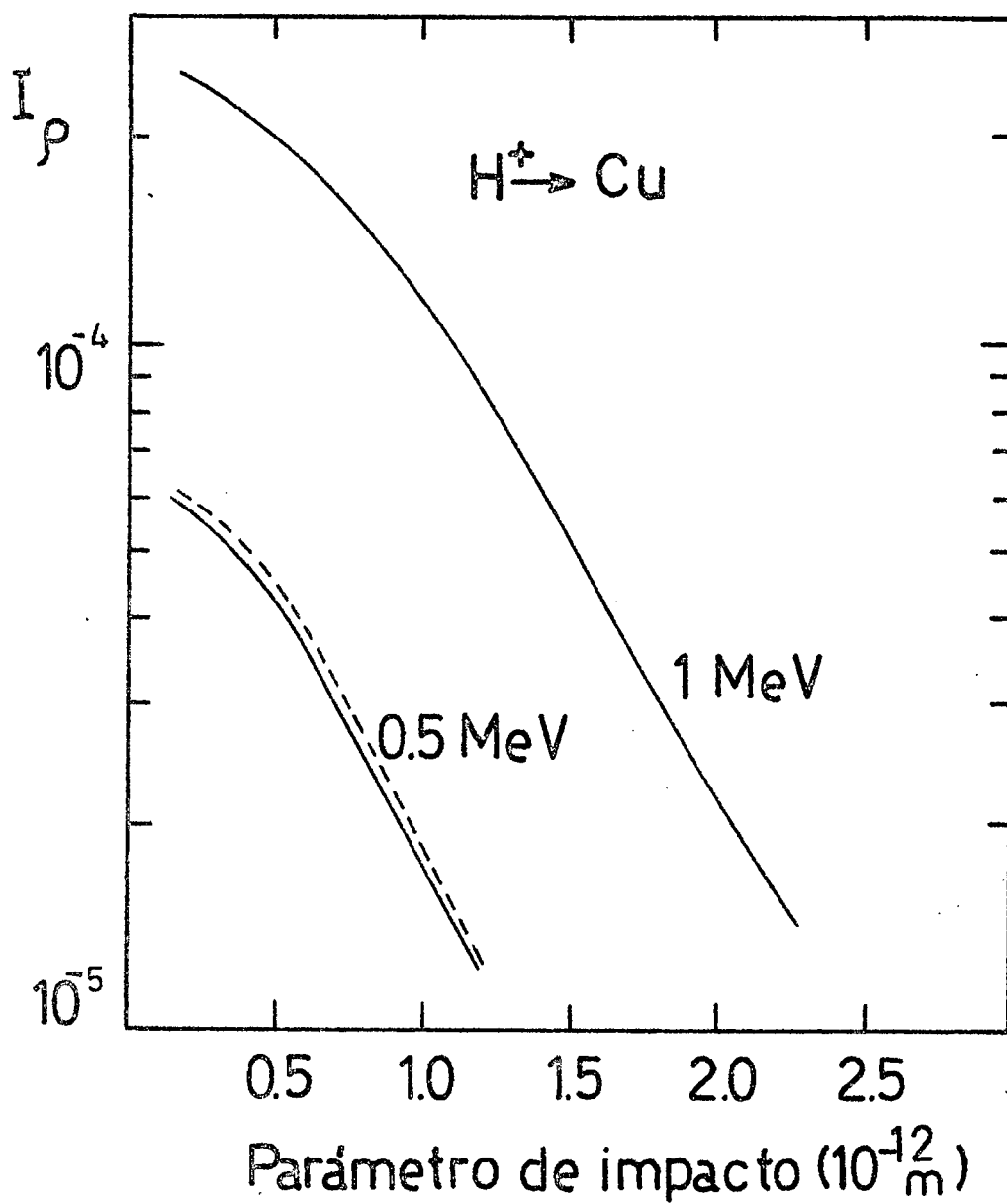
Figura II-4 : Muestra la relación entre los resultados presentados en la figura II-3, en función de la velocidad del proyectil.

Figuras II-5 y II-6 : Energía media perdida y su fluctuación en función de la velocidad, para los parámetros de impacto: 2.41, 4.84 y 6.41 u.a., correspondiente al caso de excitación de la subcapa 2s del Si por protones.

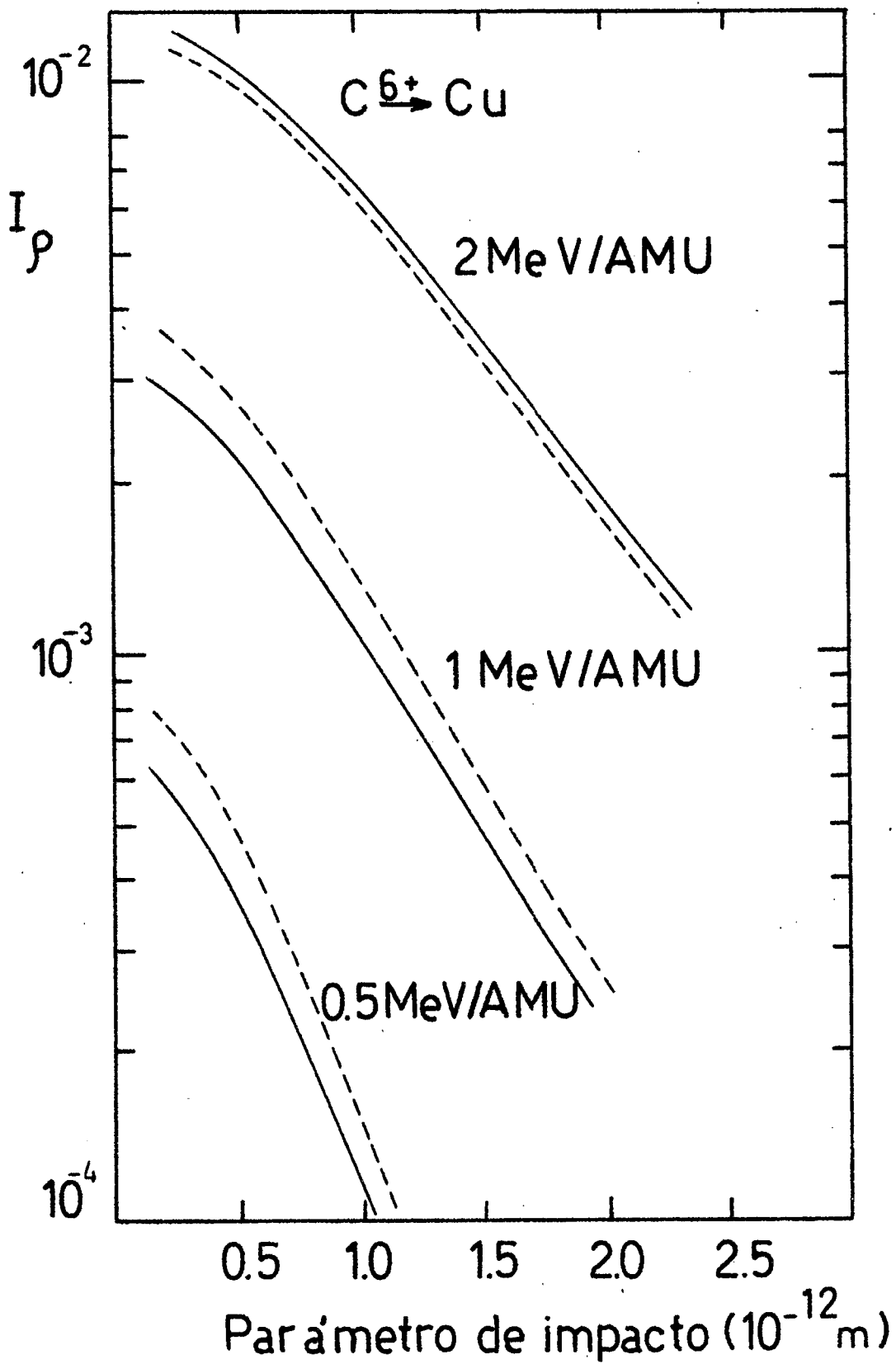
Figuras II-7 y II-8 : Idem que en las figuras II-5 y II-6, correspondiente a la excitación de la subcapa 2p.

Figura II-9 : Las curvas de línea llena corresponden al cálculo en aproximación semiclásica de la energía media perdida en función de la velocidad del proyectil, por protones que excitan las subcapas 2s y 2p del Si, con un parámetro de impacto de 2.42 u.a.. Las de línea de trazo corresponden al modelo del oscilador.

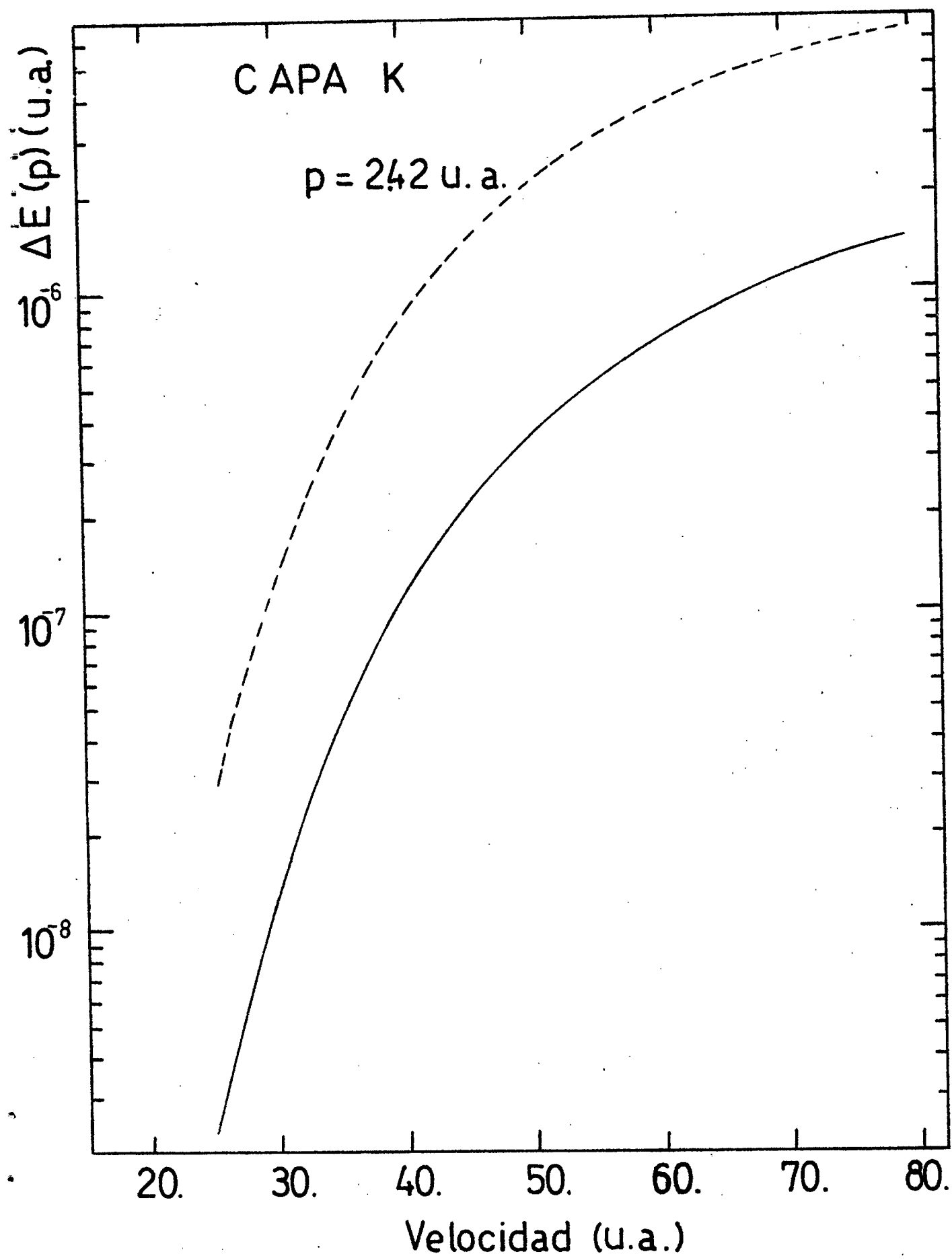
Figura II-10 : Muestra las contribuciones de los electrones internos y de valencia al frenamiento total en función de la velocidad, y los resultados experimentales de éste último, para el caso de protones canalizados en la dirección $\langle 111 \rangle$ del Si.



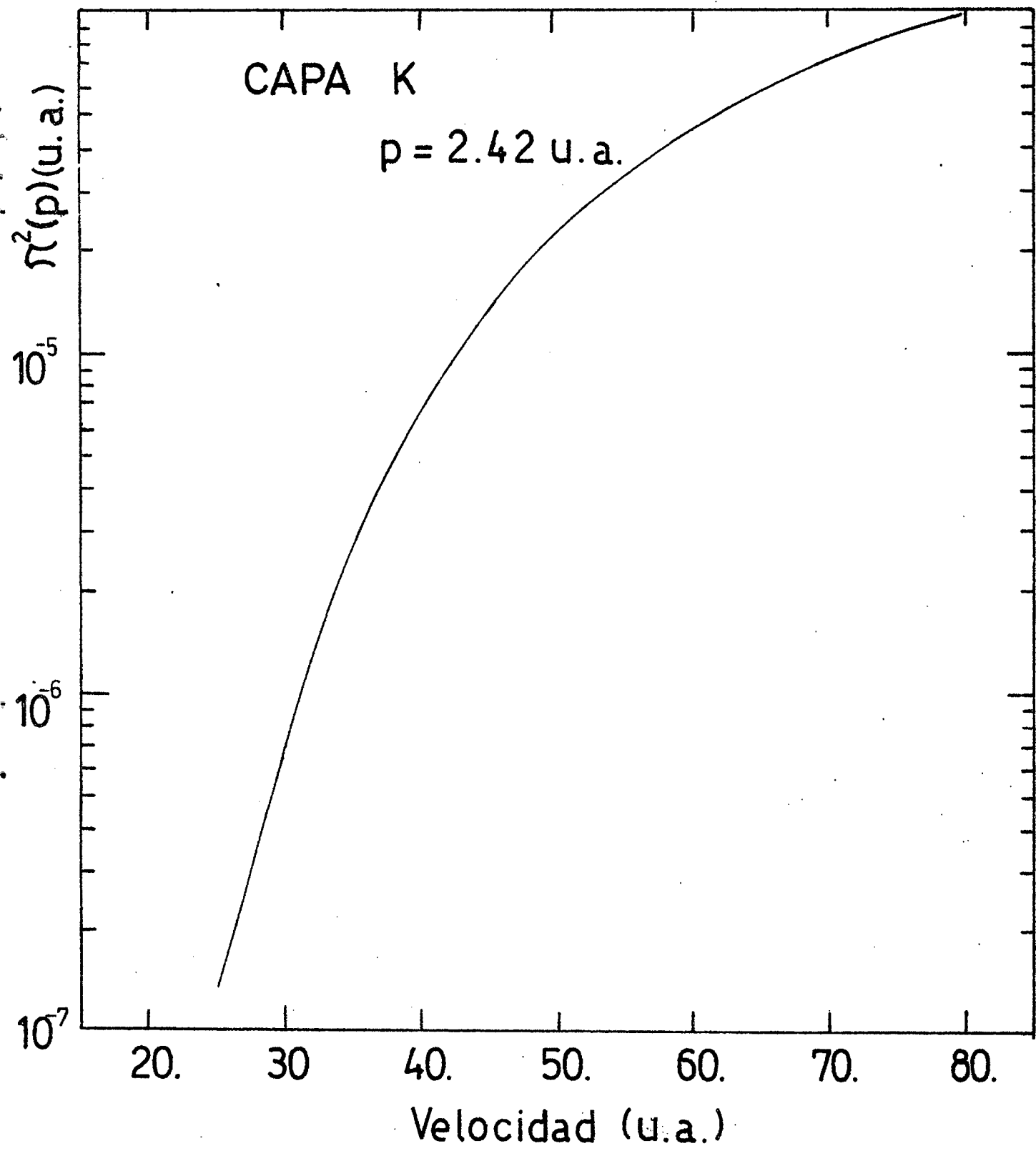
- Fig. I - 1 -



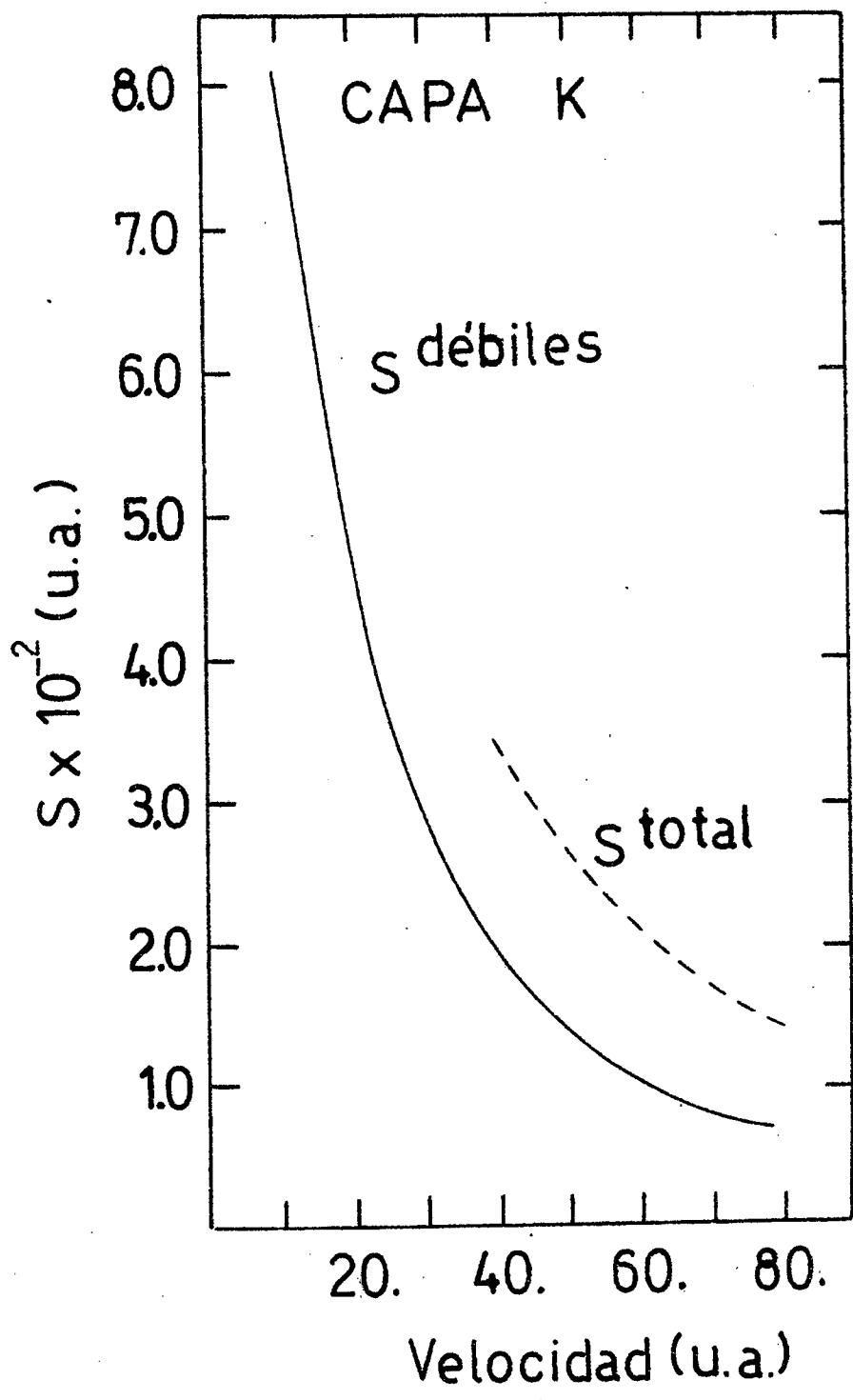
- Fig. I - 2 -



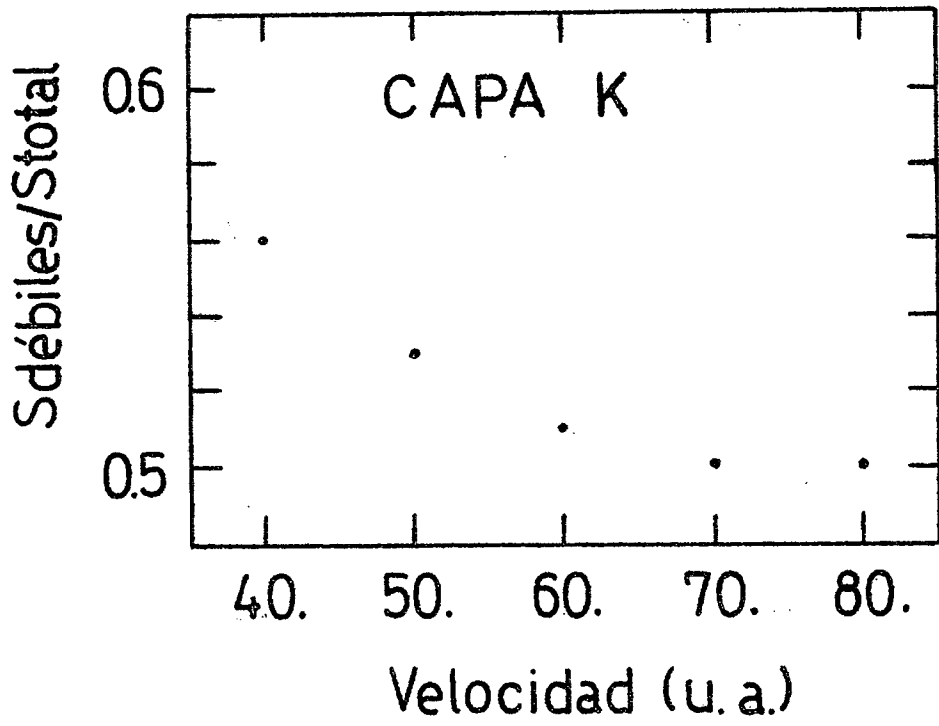
-Fig. II-1-



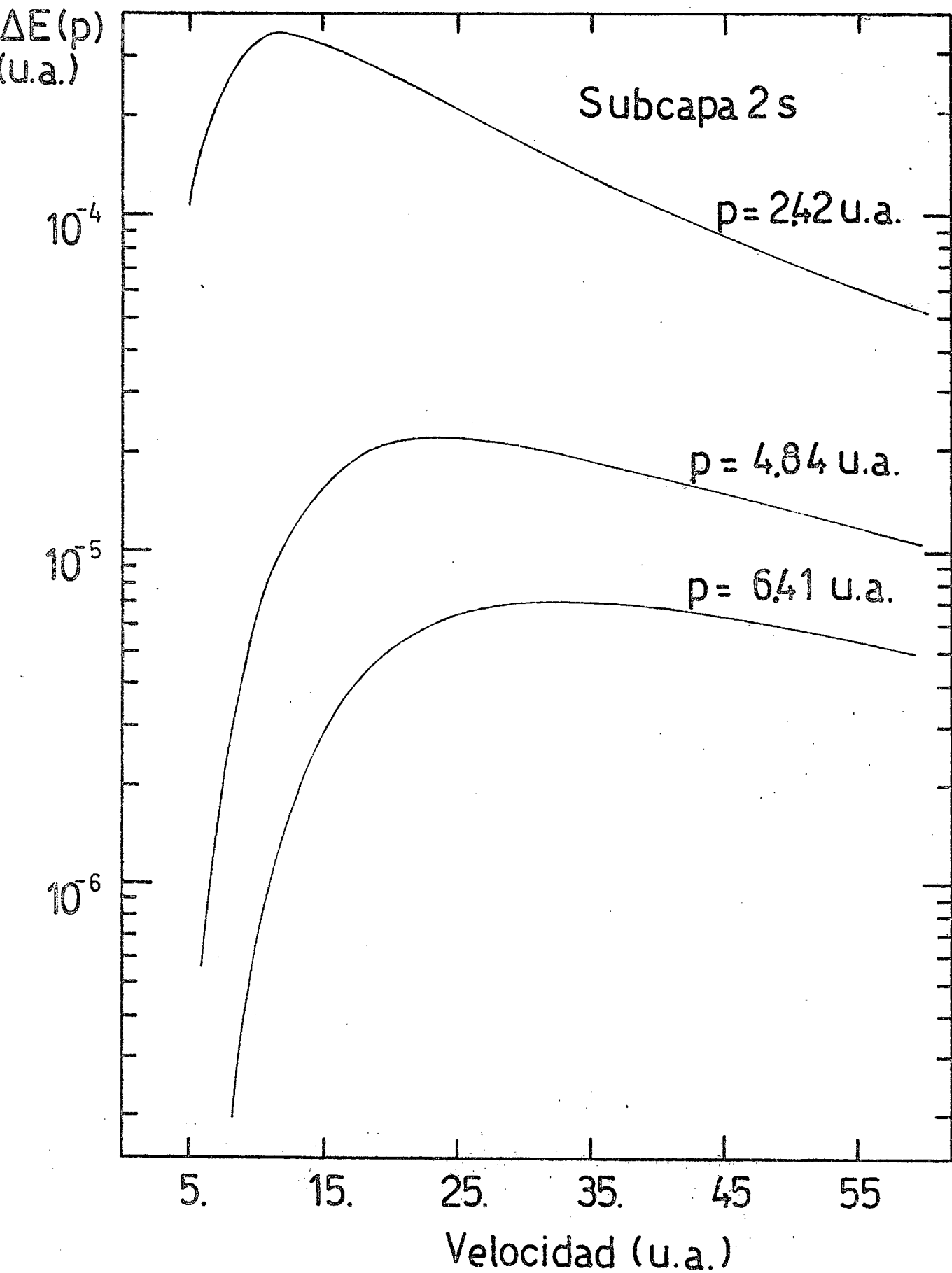
-Fig. II-2-



-Fig. II-3 -



-Fig. II-4 -



-Fig. II-5-

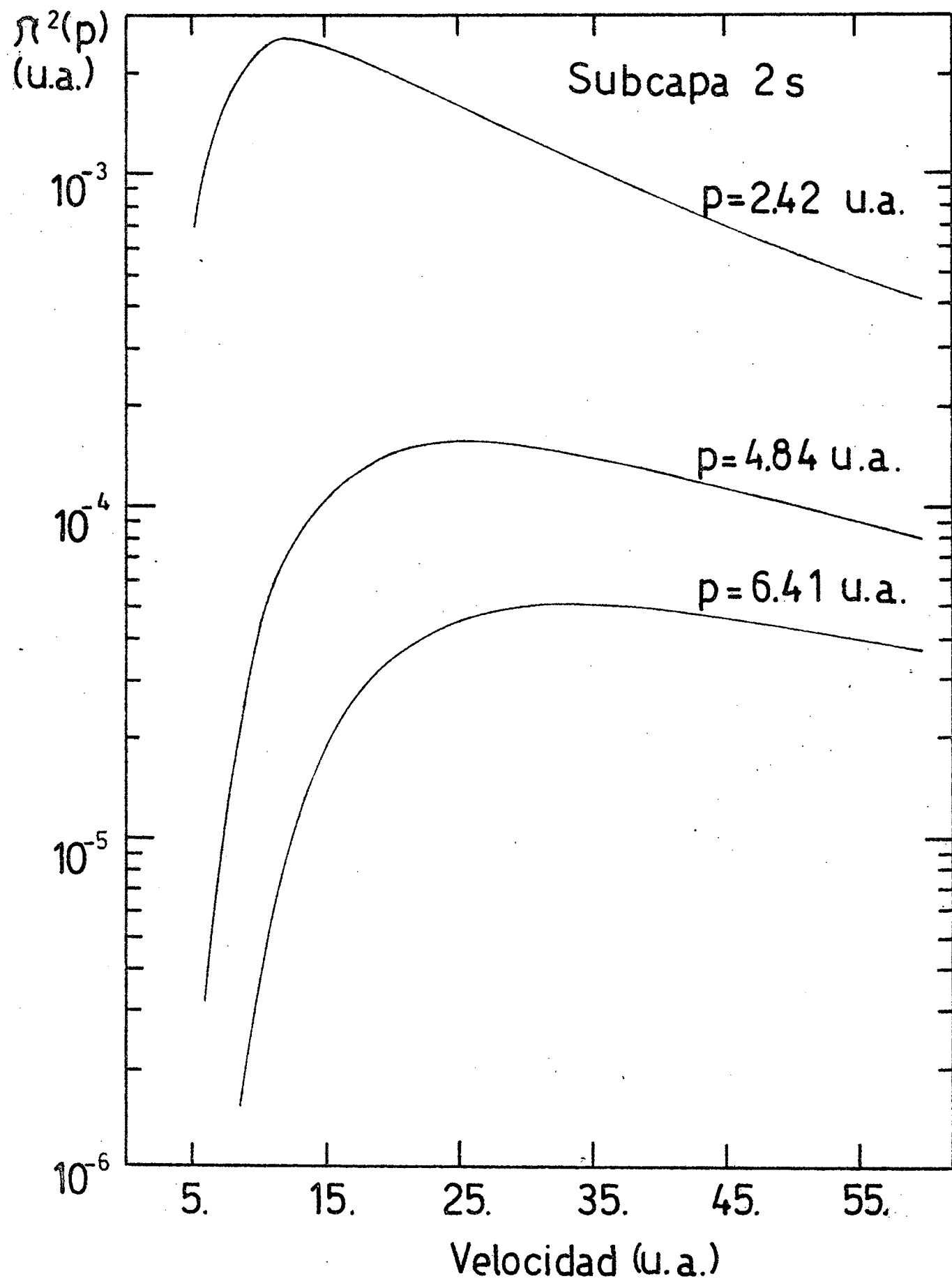
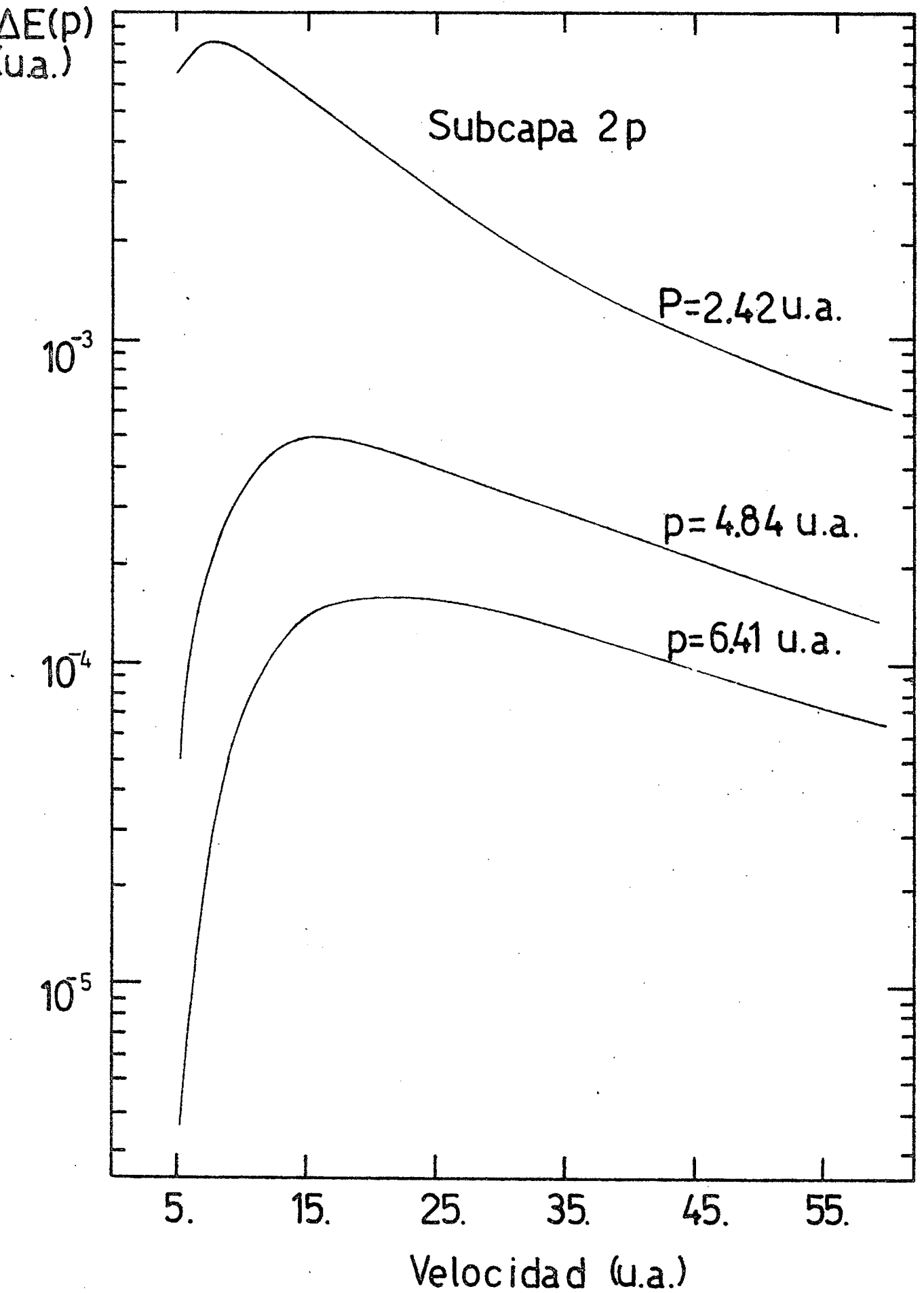
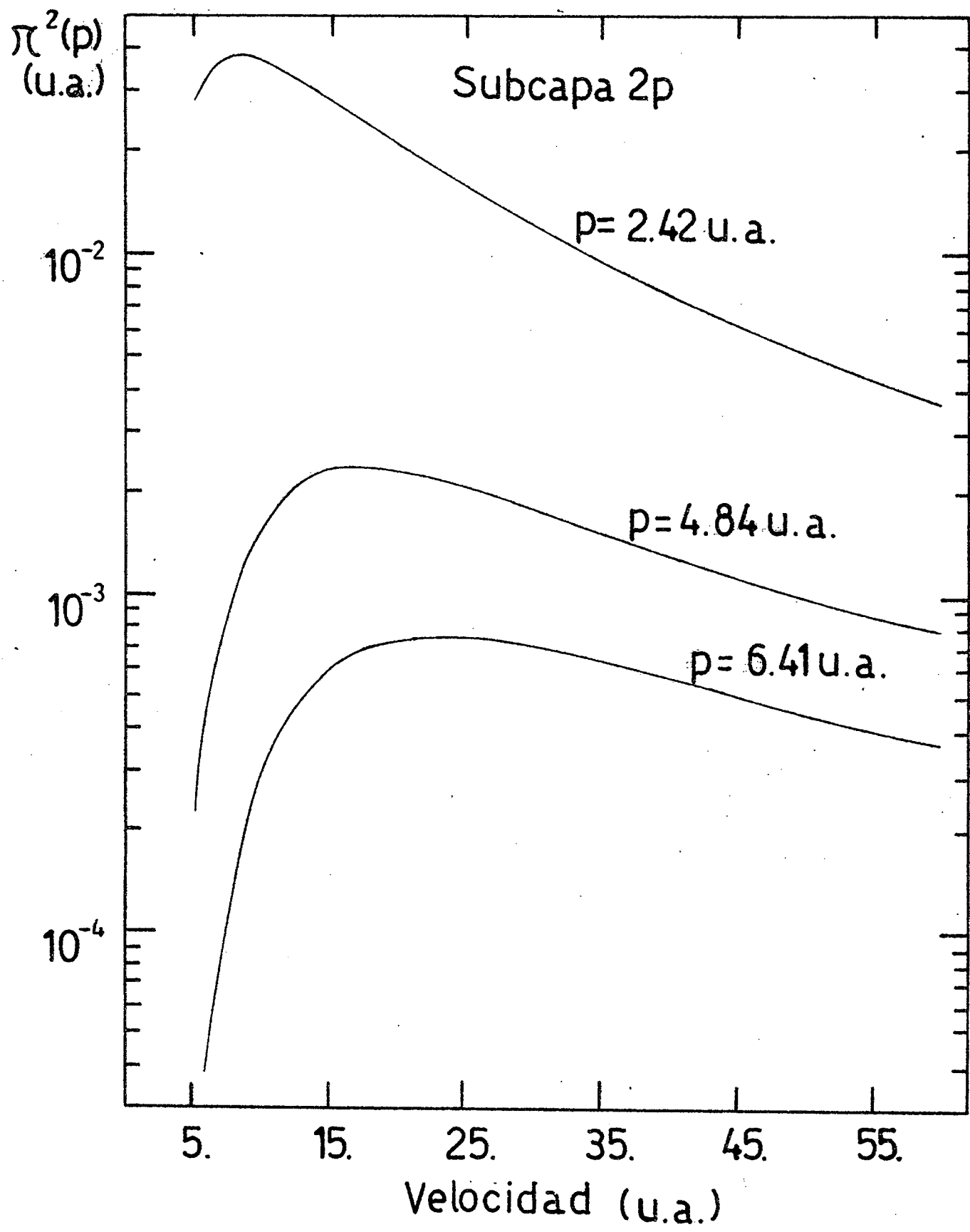


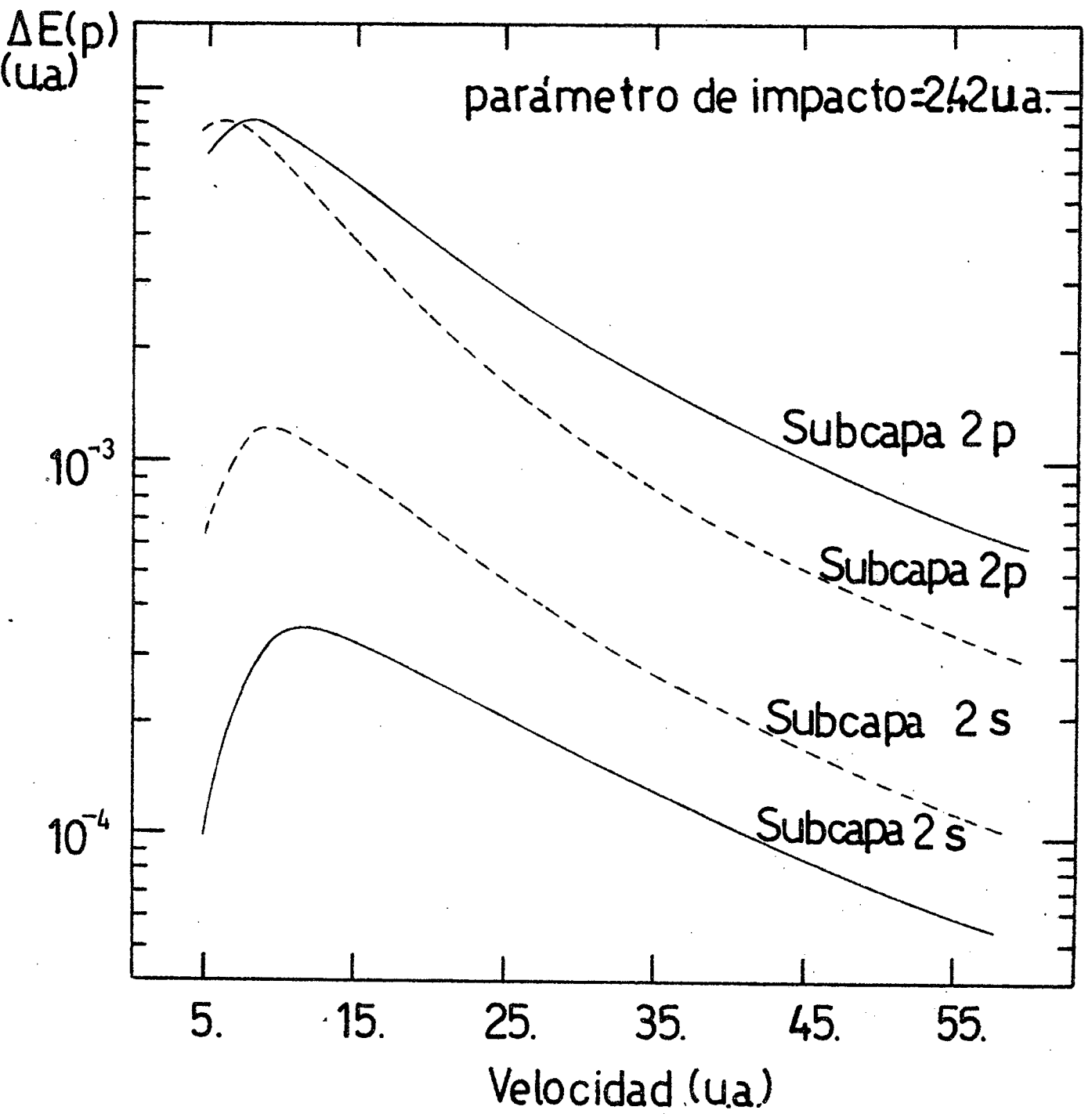
Fig. II-6



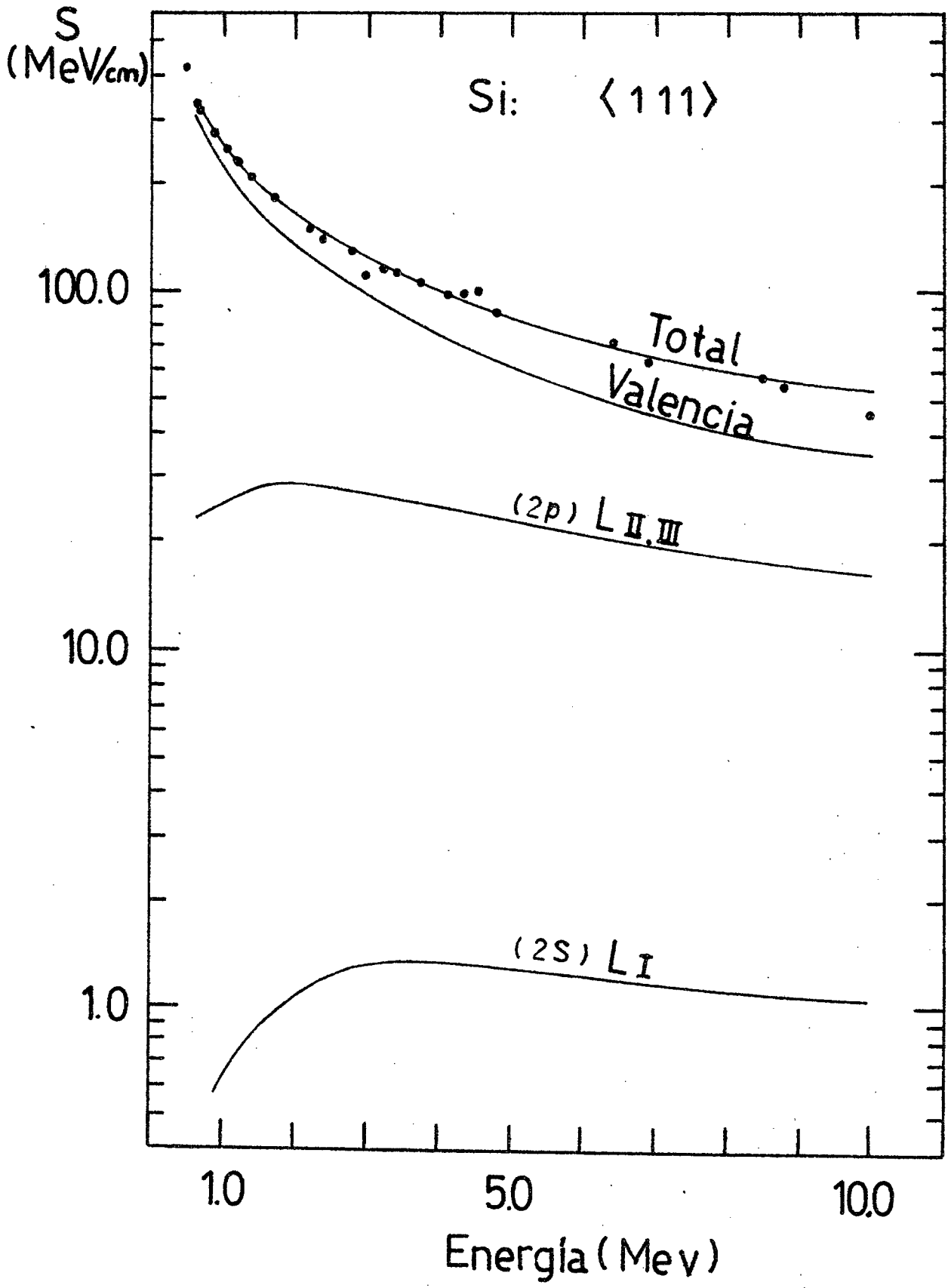
-Fig.II-7-



-Fig. II-8-



-Fig. II-9-



Puntos experimentales: Referencia 35

- Fig. II-10 -

APENDICE II - A: Coeficientes B_1^i

En el cálculo de la amplitud de ionización de la capa K y L en aproximación semiclásica aparecen los siguientes coeficientes:

$$B_e^0 = C_e(\eta) k^{\ell+1} (2\ell+2)! (\beta+ik)^{-(2\ell+3)} {}_2F_1 \left[\ell+1+i\eta, 2\ell+3, 2\ell+2, \frac{2ik}{\beta+ik} \right] \quad (a-1)$$

$$B_e^1 = C_e(\eta) k^{\ell+1} (2\ell+3)! \left(\frac{\beta}{2}+ik\right)^{-(2\ell+4)} {}_2F_1 \left[\ell+1+i\eta, 2\ell+4, 2\ell+2, \frac{2ik}{\beta/2+ik} \right] \quad (a-2)$$

$$B_e^2 = C_e(\eta) k^{\ell+1} (2\ell+4)! \left(\frac{\beta}{2}+ik\right)^{-(2\ell+5)} {}_2F_1 \left[\ell+1+i\eta, 2\ell+5, 2\ell+2, \frac{2ik}{\beta/2+ik} \right] \quad (a-3)$$

$$B_e^3 = C_e(\eta) k^{\ell+1} (2\ell+2)! \left(\frac{\beta}{2}+ik\right)^{-(2\ell+3)} {}_2F_1 \left[\ell+1+i\eta, 2\ell+3, 2\ell+2, \frac{2ik}{\beta/2+ik} \right] \quad (a-4)$$

Reduciremos estas expresiones a otras reales más sencillas usando distintas relaciones de recurrencia y propiedades de la funciones hipergeométricas ${}_2F_1(a,b,c,x)$.

1- Coeficientes B_1^0 y B_1^3

Usando la relación (Erdelyi et al. 1953)

$${}_2F_1 \left[a, 2\ell+3, 2\ell+2; z \right] = \frac{z^{-2\ell-1}}{2\ell+2} \frac{d}{dz} \left[z^{2\ell+2} (1-z)^{-a} \right] \quad (a-5)$$

podemos escribir:

$${}_2F_1 \left[\ell+1+i\eta, 2\ell+3, 2\ell+2, \frac{2ik}{\beta+ik} \right] = \frac{e^{-2\eta \tan^{-1} k/\beta}}{2\ell+2} \frac{e^{i(2\ell+3) \tan^{-1} k/\beta}}{(\beta^2+k^2)^{1/2}} 2(\beta+\ell\beta-\eta k) \quad (a-6)$$

y reemplazando (a-6) en (a-1) obtenemos:

$$B_e^0 = C_e(\eta) 2 k^{\ell+1} (2\ell+1)! (\beta^2+k^2)^{-(\ell+2)} (\beta+\ell\beta-\eta k) e^{-2\eta \tan^{-1} k/\beta} \quad (a-7)$$

La expresión de B_1^3 está dada por (a-7) reemplazando β por $\beta / 2$.

2 - Coeficiente B_1^1

Empleando la siguiente relación de recurrencia²⁹:

$$(2\beta - \gamma - \beta z + \alpha z) F(\alpha, \beta, \gamma, z) + (\gamma - \beta) F(\alpha, \beta - 1, \gamma, z) + \beta(z - 1) F(\alpha, \beta + 1, \gamma, z) = 0 \quad (a-8)$$

la identidad (Erdelyi et al. 1953):

$${}_2F_1(a, b, b, z) = (1 - z)^{-a} \quad (a-9)$$

y la relación (a-5), podemos escribir B_1^1 en la siguiente forma:

$$B_e^1 = C_e(\eta) k^{\ell+1} (2\ell+1)! \left(\frac{\beta^2}{4} + k^2\right)^{-(\ell+3)} \left[4\left(\frac{\ell\beta}{2} + \beta - \eta k\right)\left(\frac{\beta}{2} + \frac{\ell\beta}{2} - \eta k\right) - (2\ell+2)\left(\frac{\beta^2}{4} + k^2\right) \right] e^{-2\eta \tan^{-1} 2k/\beta} \quad (a-10)$$

3 - Coeficiente B_1^2

Usando (a-8), (a-9) y (a-6) resulta:

$$B_e^2 = C_e(\eta) k^{\ell+1} (2\ell+1)! 4\left(\frac{\beta^2}{4} + k^2\right)^{-(\ell+4)} \left[2\left(\frac{\ell\beta}{2} + \frac{3\beta}{2} - \eta k\right)\left(\frac{\ell\beta}{2} + \frac{\beta}{2} - \eta k\right) - \left(\frac{\ell\beta}{2} + \beta - \eta k\right) - \left(\frac{3\ell^2\beta}{2} + \frac{9\ell\beta}{2} - 3\ell\eta k + 3\beta - 4\eta k\right)\left(\frac{\beta^2}{4} + k^2\right) \right] e^{-2\eta \tan^{-1} 2k/\beta} \quad (a-11)$$

La expresión de $C_1(\eta)$ puede reducirse a la siguiente:

$$C_e(\eta) = \frac{2^\ell}{(2\ell+1)!} \prod_{s=1}^{\ell} (s^2 + \eta^2)^{1/2} \left[\frac{2\pi\eta}{1 - e^{-2\pi\eta}} \right]^{1/2} \quad (a-12)$$

APENDICE II - B: Dedución de la expresión general del término T_{lm}.

El término T_{lm} está dado en general por:

$$T_{lm} = N_{lm}^{n_1, m_2} A_{lm} \frac{2 p^{m_2}}{V} \left\{ B_l^i \int_0^\infty dx \frac{\cos(q_0 x)}{\text{sen}(q_0 x)} \frac{x^n}{R^{j+l+i_1}} + \sum_{s=0}^{\infty} D_s^l(m) [(s+i_2)] \right.$$

$$\left. \sum_{k=0}^{s+i_2} \frac{\beta^{k-s-i_2-1}}{k!} \int_0^\infty dx \frac{\cos(q_0 x)}{\text{sen}(q_0 x)} x^n R^{k+l+i_3-j} e^{-\beta R} \right.$$

$$\left. \sum_{k=0}^{s+2l+i_4} \frac{\beta^{k-s-2l-i_4-1}}{k!} \int_0^\infty dx \frac{\cos(q_0 x)}{\text{sen}(q_0 x)} x^n R^{k-l+i_5-j} e^{-\beta R} \right\} \quad (b-1)$$

Analizamos la integral:

$$I_1 = \int_0^\infty dx \frac{\cos(q_0 x)}{\text{sen}(q_0 x)} \frac{x^n}{R^{j+l+i_1}} = \frac{(-1)}{(+1)} \frac{d^n}{dq_0^n} \int_0^\infty dx \frac{\cos(q_0 x)}{(x^2+p^2)^{\frac{j+l+i_1}{2}}} \quad (b-2)$$

(-1) → n = 1, 5, 9, 13, 2, 6, 10,

(+1) → n = 3, 7, 11, 15, 0, 4, 8,

El resultado de la misma es²⁹:

$$I_1 = \frac{(-1)}{(+1)} \frac{1}{\sqrt{\pi}} (2p)^{\frac{j+l+i_1-1}{2}} \cos\left[\frac{j+l+i_1-1}{2} \pi\right] \left[\left(1 - \frac{j+l+i_1}{2}\right) \frac{d^n}{dq_0^n} \left[q_0^{\frac{j+l+i_1-1}{2}} K_{\frac{j+l+i_1-1}{2}}(q_0 p) \right] \right] \quad (b-3)$$

$$\frac{d^n}{dq_0^n} \left[q_0^{\frac{j+l+i_1-1}{2}} K_{\frac{j+l+i_1-1}{2}}(q_0 p) \right] = q_0^{\frac{j+l+i_1-1}{2}} K_{\frac{j+l+i_1-1}{2}}(q_0 p) \rightarrow n=0$$

$$= \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \frac{d^m}{dq_0^m} q_0^{\frac{j+l+i_1-1}{2}} \frac{d^{n-m}}{dq_0^{n-m}} K_{\frac{j+l+i_1-1}{2}}(q_0 p) \rightarrow n \neq 0 \quad (b-4)$$

Usando la relación de recurrencia²⁹:

$$\frac{dK_\nu(z)}{dz} = -\frac{1}{2} [K_{\nu-1} + K_{\nu+1}] \quad (b-5)$$

y la identidad:

$$\frac{d^m q_0^y}{dq_0^m} = y(y-1)\dots(y-m+1) q_0^{y-m} \quad (b-6)$$

podemos escribir (b-3) de la siguiente forma:

$$I_1 = \frac{(-1)^{(2p)} (2p)}{(+1) \sqrt{\pi}} \cos \left[\frac{j+l+i_1-1}{2} \pi \right] \Gamma \left(1 - \frac{j+l+i_1}{2} \right) \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \left(\frac{j+l+i_1-1}{2} \right) \dots$$

$$\left(\frac{j+l+i_1-1-m+1}{2} \right) q_0^{\frac{j+l+i_1-1-m}{2}} \left(-\frac{p}{2} \right)^{n-m} \sum_{p_i=0}^{n-m} \binom{n-m}{p_i} K_{\frac{j+l+i_1-1-m+2p_i}{2}}(q_0 p) \quad (b-7)$$

$$(-1) \rightarrow n = 1, 5, 9, \dots, 2, 6, \dots$$

$$(+1) \rightarrow n = 3, 7, \dots, 4, 8, \dots$$

$$I_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{q_0}{2p} \right)^{\frac{j+l+i_1}{2}} \cos \left[\frac{j+l+i_1-1}{2} \pi \right] \Gamma \left(1 - \frac{j+l+i_1-1}{2} \right) K_{\frac{j+l+i_1-1}{2}}(q_0 p) \quad (b-8)$$

para $n = 0$

Analicemos ahora las integrales del siguiente tipo:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i q_0 x} x^n R^\lambda e^{-\beta R} \quad \text{con } \lambda \geq -1 \quad (b-9)$$

Para resolverlas realizamos el cambio de variables:

$$x = p \sinh \omega \quad R = p \cosh \omega \quad (b-10)$$

$$dx = p \cosh \omega d\omega$$

con lo cual (b-9) resulta:

$$I = p^{n+\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{iq_0 p \sinh \omega} (\sinh \omega)^n (\cosh \omega)^\sigma e^{-\beta p \cosh \omega} \quad (b-11)$$

siendo $\sigma = \lambda + 1$

Empleando los desarrollos:

$$(\sinh \omega)^n = \frac{e^{n\omega}}{2^n} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{(n-k)! k!} e^{-2k\omega} (-1)^k \quad (b-12)$$

$$(\cosh \omega)^\sigma = \frac{e^{\sigma\omega}}{2^\sigma} \sum_{\ell=0}^{\sigma} \frac{\sigma!}{(\sigma-\ell)! \ell!} e^{-2\ell\omega} \quad (b-13)$$

podemos escribir:

$$(\sinh \omega)^n (\cosh \omega)^\sigma = \frac{e^{(n+\sigma)\omega}}{2^{n+\sigma}} \sum_{p_1=0}^{n+\sigma} \alpha_{p_1} e^{-2p_1\omega} \quad (b-14)$$

donde

$$\alpha_{p_1} = \sum_{m=0}^{p_1} (-1)^{p_1-m} \frac{n!}{(n-p_1+m)! (p_1-m)!} \frac{\sigma!}{(\sigma-m)! m!} \quad (b-15)$$

Reemplazando (b-14) en (b-11):

$$I = \frac{p^{n+\sigma}}{2^{n+\sigma}} \sum_{p_1=0}^{n+\sigma} \alpha_{p_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{iq_0 p \sinh \omega} e^{(n+\sigma-2p_1)\omega} e^{-\beta p \cosh \omega} \quad (b-16)$$

Haciendo el siguiente cambio de variable:

$$e^\omega = y \quad (b-17)$$

podemos escribir

$$I_s = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{iq_0 p \sinh \omega} e^{s\omega} e^{-\beta p \cosh \omega} =$$

$$\int_0^{\infty} dy y^{s-1} e^{-\frac{\beta}{2} [-\gamma(\beta-iq_0) - \frac{1}{\gamma}(\beta+iq_0)]} \quad (b-18)$$

y con otro cambio de variable, dado por:

$$(\beta - i q_0) \frac{p \gamma}{2} = t \quad (b-19)$$

(b-18) resulta:

$$I_s = \left[\frac{p(\beta - i q_0)}{2} \right]^{-s} \int_0^{\infty} dt t^{s-1} e^{-t - p^2(\beta^2 + q_0^2)/4t} \quad (b-20)$$

siendo la solución³⁷:

$$I_s = 2 e^{i s \tan^{-1} q_0/\beta} K_s [p(q_0^2 + \beta^2)^{1/2}] \quad \text{Re} [p(\beta^2 + q_0^2)] > 0 \quad (b-21)$$

Así resulta, reemplazando (b-21) en (b-16) :

$$I = 2 \left(\frac{p}{2} \right)^{n+\lambda+1} \sum_{p_i=0}^{n+\lambda+1} \alpha_{p_i} \left\{ \frac{\cos}{\text{sen}} [(n+\lambda+1-2p_i) \tan^{-1}(q_0/\beta)] \right\} K_{n+\lambda+1-2p_i} [p(q_0^2 + \beta^2)^{1/2}] \quad (b-22)$$

para n par vale el coseno, y para n impar el seno en (b-22).

En el caso $\lambda = -1$, la expresión de I responde a la forma:

$$I = 2 \left(\frac{p}{2} \right)^n \sum_{p_i=0}^n \alpha_{p_i} \left\{ \frac{\cos}{\text{sen}} [(n-2p_i) \tan^{-1}(q_0/\beta)] \right\} K_{n-2p_i} [p(q_0^2 + \beta^2)^{1/2}] \quad (b-23)$$

con

$$\alpha_{p_i} = (-1)^{p_i} \frac{n!}{(n-p_i)! p_i!} \quad (b-24)$$

Para el caso especial de $n = 0$, (b-23) resulta:

$$I = 2 K_0 [p(q_0^2 + \beta^2)^{1/2}] \quad (b-25)$$

Si $\lambda < -1$ la resolución de I es numérica. Utilizamos para la misma el método de Filon¹⁰.

Utilizando finalmente las expresiones (b-7) y (b-22) podemos escribir la resolución general de Tlm dado por (b-1):

$$T_{em} = N_{em}^{n_1, m_2} A_{em} p^{\frac{m_3}{2}} \frac{2}{V} \left\{ B_e^{i_1} \frac{(-1)^{j+l+i_1-1}}{(j+l+i_1-1)!} (2p)^{\frac{j+l+i_1-1}{2}} \cos \left[\frac{j+l+i_1-1}{2} \pi \right] \right.$$

$$\left. \left(1 - \frac{j+l+i_1}{2} \right) \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \left(\frac{j+l+i_1-1}{2} \right) \left(\frac{j+l+i_1-1}{2} - 1 \right) \dots \left(\frac{j+l+i_1-1}{2} - m + 1 \right) q_0^{\frac{j+l+i_1-1-m}{2}} \right.$$

$$\left. \left(-\frac{p}{2} \right)^{n-m} \sum_{p_1=0}^{n-m} \binom{n-m}{p_1} K_{\frac{j+l+i_1-1}{2} - n + m + 2p_1} (q_0 p) + \sum_{s=0}^{\infty} D_s^e(m, k) \left[(s+i_2) \downarrow \sum_{k=0}^{\frac{s+i_2}{2}} \right. \right.$$

$$\left. \frac{\beta^{k-s-i_2-1}}{k!} \left(-\frac{p}{2} \right)^{n+k+l+i_3-j+1} \sum_{p_1=0}^{\frac{k+l+i_3-j+n+1}{2}} \alpha_{p_1} \left\{ \frac{\cos \left[(n+k+l+i_3-j+1-2p_1) \tan^{-1} (q_0/\beta) \right]}{\sin \left[(n+k+l+i_3-j+1-2p_1) \tan^{-1} (q_0/\beta) \right]} \right\} \right.$$

$$\left. K_{n+k+l+i_3-j+1-2p_1} \left(p \sqrt{q_0^2 + \beta^2} \right) - (s+2l+i_4) \downarrow \sum_{k=0}^{\frac{s+2l+i_4}{2}} \frac{\beta^{k-s+2l-i_4-1}}{k!} \left(-\frac{p}{2} \right)^{n+k-l+i_5-j+1} \right.$$

$$\left. \sum_{m=0}^{\frac{n+k-l+i_5-j+1}{2}} \alpha_m \left\{ \frac{\cos \left[(n+k-l+i_5-j+1-2m) \tan^{-1} (q_0/\beta) \right]}{\sin \left[(n+k-l+i_5-j+1-2m) \tan^{-1} (q_0/\beta) \right]} \right\} \right.$$

$$\left. K_{n+k-l+i_5-j+1-2m} \left(p \sqrt{q_0^2 + \beta^2} \right) \right\} \quad (b-26)$$

con α_{p_1} y α_m dados por (b-15), y teniendo en cuenta (b-23) y (b-24) para el caso $k+1+i_3-j=-1$, ó $k-1+i_5-j=-1$.

APENDICE II - C: Expresiones asintóticas de los factores de forma.

Los factores de forma $f_1^i(R)$ que aparecen en el cálculo son:

$$f_e^0(R) = \frac{B_e^0}{R^{\ell+1}} + R^\ell \int_R^\infty dr e^{-\beta r} r^{-\ell} F_e(m, kr) - R^{-(\ell+1)} \int_R^\infty dr r^{\ell+1} e^{-\beta r} F_e(m, kr) \quad (c-1)$$

$$f_e^i(R) = \frac{B_e^i}{R^{\ell+i_1}} + R^{m_1} \int_R^\infty dr e^{-\beta r/2} r^{-m_1+1} F_e(m, kr) - R^{-m_2} \int_R^\infty dr e^{-\beta r/2} r^{m_2+1} F_e(m, kr) \quad (c-2)$$

$$\begin{aligned} i = 1 & \text{ --- } i_1 = 1, m_1 = 1, m_2 = 1 + 1 \\ i = 2 & \text{ --- } i_1 = 2, m_1 = 1 + 1, m_2 = 1 + 2 \\ i = 3 & \text{ --- } i_1 = 0, m_1 = 1 - 1, m_2 = 1 \end{aligned} \quad (c-3)$$

Detallaremos a continuación los pasos seguidos para hallar la expresión asintótica de $f_1^i(R)$, siendo éstos completamente análogos en el caso de $f_1^0(R)$.

La expresión asintótica de la función de Coulomb $F_1(n, kr)^{10}$ es:

$$F_e(m, kr) \sim \text{sen}[kr + \eta \ln(2kr) - \frac{\ell\pi}{2} + \sigma_e] \quad (c-4)$$

Reemplazando (c-4) en (c-2), e integrando:

$$I_1 = \int_R^\infty dr e^{-\beta r/2} r^{-m_1+1} \text{sen}(kr + \eta \ln 2kr + A) = \frac{1}{2i} \left\{ e^{iA} (2k)^{i\eta} \left(\frac{\beta}{2} - ik\right)^{m_1-2-i\eta} \right.$$

$$\left. \left[\Gamma[i\eta - m_1 - 2, \left(\frac{\beta}{2} - ik\right)R] - e^{-iA} (2k)^{-i\eta} \left(\frac{\beta}{2} + ik\right)^{m_1-2+i\eta} \left[\Gamma[-m_1+2-i\eta, \left(\frac{\beta}{2} + ik\right)R] \right] \right\} \quad (c-5)$$

Usando el desarrollo de la función gama para $R \rightarrow \infty^{10}$:

$$\Gamma(a+1, z) \sim z^a e^{-z} \left[1 + \frac{a}{z} + \frac{a(a-1)}{2z^2} + \dots \right] \quad (c-6)$$

la expresión de I_1 resulta:

$$I_1 \sim \frac{e^{-\beta R/2} R^{-m_1+1}}{(\beta^2/4 + k^2)^{1/2}} \left\{ \text{sen}(A + \eta \ln 2kR + kR + \tan^{-1} 2k/\beta) + \frac{\eta}{(\beta^2/4 + k^2)^{1/2} R} \right.$$

$$\left. \cos(A + \eta \ln 2kR + kR + 2 \tan^{-1} 2k/\beta) + \frac{1-m_1}{(\beta^2/4 + k^2)^{1/2} R} \text{sen}(A + \eta \ln 2kR + kR + \dots) \right\} \quad (c-7)$$

Análogamente:

$$I_2 = \int_R^\infty dr r^{m_2+1} e^{-\beta r/2} F_\ell(\eta, kr)$$

resulta:

$$I_2 \sim \frac{e^{-\beta R/2} R^{m_2+1}}{(\beta^2/4 + k^2)^{1/2}} \left\{ \text{sen}(A + \eta \ln 2kR + kR + \tan^{-1} 2k/\beta) + \frac{\eta}{(\beta^2/4 + k^2)^{1/2} R} \right.$$

$$\left. \cos(A + \eta \ln 2kR + \dots) + \frac{m_2+1}{(\beta^2/4 + k^2)^{1/2} R} \text{sen}(A + \eta \ln 2kR + \dots) \right\} \quad (c-8)$$

Reemplazando (c-7) y (c-8) en (c-2):

$$f_\ell^i \sim \frac{B_\ell^i}{R^{\ell+i}} - \frac{m_1 + m_2}{\beta^2/4 + k^2} e^{-\beta R/2} \text{sen}\left(\eta \ln 2kR + kR + 2 \tan^{-1} 2k/\beta + \sigma e - \frac{\ell \pi}{2}\right) \quad (c-9)$$

En forma totalmente análoga encontramos la expresión asintótica de $f_1^0(R)$:

$$f_\ell^0 \sim \frac{B_\ell^0}{R^{\ell+1}} - \frac{2\ell+1}{\beta^2 + k^2} \frac{e^{-\beta R}}{R} \text{sen}\left(\eta \ln 2kR + kR + 2 \tan^{-1} 2k/\beta + \sigma e - \frac{\ell \pi}{2}\right) \quad (c-10)$$