

Departamento de “Estructura i Constituents de la Matèria”

# Colisiones de partículas cargadas. Modelos de interacción y algoritmos numéricos

David Bote Paz

Memoria presentada para optar al título de Doctor en Física  
Tesis dirigida por el Dr. Francesc Salvat Gavaldà

Marzo de 2010



UNIVERSITAT DE BARCELONA



Programa de doctorado “Física Avançada”  
Bienio 2005–2007



*A mis padres,  
madre, tu alma y la mía son una,  
padre, tu eres el viento que agita mis alas.*

*A mis hermanos,  
mis huesos,  
mi carne,  
mi corazón.*



**PARA** que yo me llame **Ángel González,**

para que mi ser pese sobre el suelo,  
fue necesario un ancho espacio  
y un largo tiempo:  
hombres de todo el mar y toda tierra,  
fértiles vientres de mujer, y cuerpos  
y más cuerpos, fundiéndose incesantes  
en otro cuerpo nuevo.

Solsticios y equinoccios alumbraron  
con su cambiante luz, su vario cielo,  
el viaje milenario de mi carne  
trepando por los siglos y los huesos.

De su pasaje lento y doloroso  
de su huida hasta el fin, sobreviviendo  
nafragios, aferrándose  
al último suspiro de los muertos,  
yo no soy más que el resultado, el fruto,  
lo que queda, podrido, entre los restos;  
esto que veis aquí,  
tan sólo esto:

un escombros tenaz, que se resiste  
a su ruina, que lucha contra el viento,  
que avanza por caminos que no llevan  
a ningún sitio. El éxito  
de todos los fracasos. La enloquecida  
fuerza del desaliento...

*Ángel González*



## PARA que yo me llame...

“para” es espada que pende y amenazante nos invita a andar. “para” no es nombre. no es verbo, es la chispa previa, es preposición que prende y ordena. “para” inicia el movimiento, la transición del nombre al verbo; abre el presente como el futuro, un tiempo incierto, pero cerrado, seguro. “para”, hierro que nos inscribe en la leyenda, es sinónimo de finalidad; finalidad, sinónimo de necesidad. “para” lo eleva todo y a todos a la categoría de necesario. “para que yo me llame..”, para que yo me llame Dr. Bote es supervivencia, una historia de supervivencia, un proceso, el hilo de encuentros de vida, y muerte.

**Para que yo me llame Dr. Bote fue necesario**, fueron *imprescindibles* en este ancho espacio, en este largo tiempo, **hombres de todo el mar... Cesc, especialmente Cesc, y toda la tierra...** José María Fernández Varea, Xavier Llovet, Josep Sempau, Llorenç Brualla, Raynald Gauvin, Mitio Inokuti (q.e.p.d), y otros, muchos otros que han ejercido de maestros y compañeros. **Solsticios y equinoccios alumbraron...**Javier, Martí, Mario, Fran, Cristina, Miki, Xesco, *por supuesto* Xesco, todos ellos, y otros, afortunadamente muchos otros, Arnau, Dani, José María, Xavi, Benedetta, Eduardo, David, Esther, Dani, Miguel, Miquel, Pol, Óscar, Teresa, Estela, Noela, Isaac, Felisberto, Jaume, Joan, Vicent, Raül, Salva, Martí, Gerard, Rosa, Pedro, Charly, Ana, Javi, Ivo, han sido mi *luz*, **cambiante luz, vario cielo**, mi guía, mi sustento a lo largo de esta tesis, **viaje milenario de mi carne. fértiles vientres de mujer, y cuerpos y más cuerpos...** madre, padre, hermanos, sobrinos, sois mi alma, mi fuerza, todo, huesos, corazón, soy por que habéis sido, soy, porque sois.

A todos, gracias. Desde el silencio, lugar donde vuestros nombres no envejecen, gracias.

Y poco más. El **fruto** entre los restos. Sí, yo no soy más que *el resultado*, esto que veis **aquí**, tan *sólo* esto: un escombros tenaz, que **resiste**, que avanza por caminos que no llevan a ningún sitio. El éxito de todos los *fracasos*. La *enloquecida fuerza* del *desaliento* es, soy, **Dr. Flasche**.



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Colisiones inelásticas en la primera aproximación de Born</b>	<b>7</b>
2.1. Aspectos generales . . . . .	7
2.2. La aproximación de un-electrón-activo . . . . .	10
2.2.1. Elementos de matriz de transición . . . . .	14
2.2.2. La aproximación de Born con ondas planas . . . . .	16
2.3. Secciones eficaces . . . . .	17
2.4. Secciones eficaces en la PWBA . . . . .	21
2.4.1. La GOS y la TGOS de capas cerradas . . . . .	26
2.4.2. Secciones eficaces integradas . . . . .	31
<b>3. Cálculo de secciones eficaces en la PWBA</b>	<b>35</b>
3.1. Métodos numéricos . . . . .	35
3.1.1. Excitación hacia estados ligados . . . . .	37
3.1.2. Ionización . . . . .	38
3.2. La regla de suma de Bethe . . . . .	43
3.3. La estructura del Bethe ridge . . . . .	50
3.4. Programas de cálculo . . . . .	52
<b>4. Fórmulas asintóticas de Bethe</b>	<b>65</b>
4.1. Deducción de las fórmulas asintóticas . . . . .	66
4.1.1. Aproximación dipolar-impulso . . . . .	66
4.1.2. Fórmulas asintóticas para GOSs realistas . . . . .	72
4.1.3. Fórmulas asintóticas para proyectiles con masas moderadas . . . . .	76

4.1.4.	Fórmulas asintóticas para electrones . . . . .	78
4.1.5.	Fórmulas asintóticas para positrones . . . . .	80
4.2.	Compendio de fórmulas asintóticas . . . . .	81
4.2.1.	Sección eficaz total . . . . .	81
4.2.2.	Sección eficaz de frenado . . . . .	84
4.2.3.	Sección eficaz de dispersión de energía . . . . .	89
4.2.4.	Ejemplos de resultados numéricos . . . . .	92
4.3.	Correcciones de capas . . . . .	96
4.3.1.	Cálculo numérico de las correcciones de capas . . . . .	98
4.4.	Absorción inelástica en el scattering elástico . . . . .	107
<b>5.</b>	<b>Cálculo de secciones eficaces de ionización en la DWBA</b>	<b>109</b>
5.1.	Aproximación de Born con ondas planas distorsionadas . . . . .	110
5.2.	Corrección de distorsión y de intercambio a la PWBA . . . . .	112
5.3.	Secciones eficaces totales de ionización . . . . .	115
5.4.	Comparación con datos experimentales . . . . .	118
5.5.	Fórmulas analíticas . . . . .	126
5.6.	Simulación MC de rendimientos de rayos x . . . . .	130
<b>6.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>133</b>
<b>A.</b>	<b>Cinemática de las colisiones inelásticas</b>	<b>135</b>
<b>B.</b>	<b>Funciones de onda de Dirac</b>	<b>143</b>
B.1.	Ondas planas . . . . .	143
B.2.	Ondas esféricas y ondas planas distorsionadas . . . . .	144
<b>C.</b>	<b>Lista de publicaciones y comunicaciones a congresos</b>	<b>149</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>151</b>

# Capítulo 1

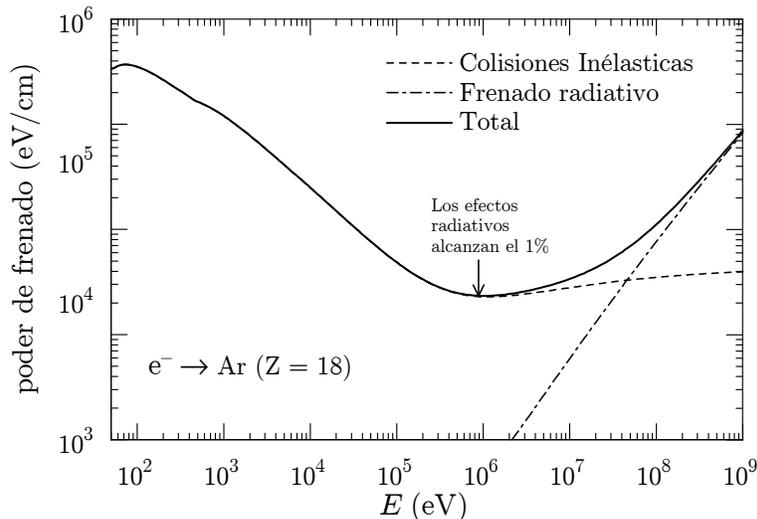
## Introducción

El transporte de radiación en medios materiales ha sido objeto de estudio desde principios del siglo XX. Este problema ha sido tratado por algunos de los físicos más brillantes del siglo pasado, tales como Rutherford, Bohr, Bethe, Fermi o Landau (ver, por ejemplo, Ahlen, 1980). La relevancia de la física de radiaciones reside en sus múltiples aplicaciones, entre las que destacan el diseño de detectores de radiación, las espectroscopias de electrones (AES, ESCA o XPS, EPES, EELS y EPMA) y de partículas pesadas (RBS y PIXE), la microscopía electrónica, la física médica (dosimetría, radioterapia y medicina nuclear), la física de partículas y la astrofísica.

Cuando una partícula cargada rápida se mueve en el seno de un material, interactúa con éste mediante colisiones elásticas, colisiones inelásticas y emisión de Bremsstrahlung o radiación de frenado (Salvat y Fernández-Varea, 2009b). Por definición, las interacciones elásticas son aquellas en las que el estado cuántico del átomo blanco permanece inalterado en el transcurso de la interacción. Estas colisiones son las principales responsables, pero no las únicas, de las deflexiones angulares de la partícula a lo largo de su trayectoria. En los choques elásticos se produce una transferencia de momento del proyectil al blanco, que se traduce en una ligera pérdida de energía del primero, y en el retroceso del segundo. En el caso de colisiones de electrones y positrones, la pérdida de energía es muy pequeña, por lo que normalmente es ignorada.

Las colisiones inelásticas producen excitaciones electrónicas en el medio, y la emisión de Bremsstrahlung es el resultado de la aceleración del proyectil por el campo electrostático del átomo. Como consecuencia de ambos procesos, el proyectil pierde de manera progresiva parte de su energía y se genera una cascada de partículas secundarias. Los choques inelásticos son el mecanismo dominante de pérdida de energía para electrones y positrones con energías cinéticas inferiores a unos pocos MeV, y para partículas pesadas de cualquier energía, mientras que la emisión de radiación de frenado representa la contribución principal al frenado del proyectil en el caso de partículas ligeras (electrones o positrones) de muy alta energía (ver la Figura 1).

En este trabajo nos centraremos en el estudio de las interacciones de partículas cargadas (especialmente electrones, positrones y protones) con átomos. Hemos reformulado



**Figura 1.1:** Poder de frenado (es decir, la pérdida de energía promedio por unidad de recorrido) para colisiones de electrones con átomos de Ar en función de la energía cinética  $E$ . Las colisiones inelásticas son la contribución mayoritaria al poder de frenado por debajo de unos pocos MeV. La emisión de Bremsstrahlung es, en cambio, el mecanismo dominante a altas energías.

la aproximación de Born con ondas planas, a la que nos referiremos como PWBA (del inglés “plane wave Born approximation”), evitando ciertas aproximaciones introducidas en las formulaciones habituales de ésta (Fano, 1963). En la PWBA, la interacción entre el proyectil y el átomo (o molécula) blanco se trata a primer orden de teoría de perturbaciones, y los estados inicial y final del proyectil se describen mediante ondas planas de Dirac. En principio, la PWBA es realista sólo cuando la velocidad del proyectil es mucho mayor que las velocidades de los electrones atómicos. En la práctica, ésta resulta aplicable en condiciones algo menos restrictivas, y sus resultados son correctos siempre que la velocidad  $v$  del proyectil sea mayor que unas pocas veces la velocidad promedio del electrón activo en su estado inicial (ver, por ejemplo, Mott y Massey, 1965; Inokuti, 1971). En el caso de ionización de capas internas de átomos por impacto de electrones o positrones, los cálculos de Bote y Salvat (2008) muestran que la diferencia entre las secciones eficaces calculadas con la PWBA y con otras aproximaciones más elaboradas es menor que el 1% cuando la energía cinética del proyectil supera 30 veces la energía de ionización del electrón activo.

La PWBA es la base de la teoría convencional del poder de frenado de partículas cargadas rápidas (Bethe, 1932; Fano, 1963; Inokuti, 1971). En principio, los resultados de la PWBA para átomos neutros e iones son apropiados para describir el frenado de partículas cargadas en gases monoatómicos poco densos. En general, la PWBA proporciona una descripción realista de la ionización de capas atómicas internas, ya que los electrones muy ligados son poco sensibles al estado de agregación. La generalización a moléculas y medios densos se complica debido, en parte, a la presencia de átomos

vecinos que distorsionan las funciones de onda de los electrones libres (Rehr y Albers, 2000). Además, para proyectiles relativistas en medios densos, la polarizabilidad del medio apantalla el campo del proyectil, dando lugar al efecto de densidad de Fermi (Fano, 1963; ICRU, 1982). Con todo, la PWBA constituye un punto de partida adecuado para diseñar modelos semiempíricos para las interacciones inelásticas de partículas cargadas en materia condensada (ver, por ejemplo, Fernández-Varea et al., 2005).

En nuestro planteamiento, describimos los estados del átomo mediante la aproximación de partículas independientes, es decir, suponiendo que los electrones atómicos se mueven en un potencial común, y tomamos este potencial igual al potencial auto-consistente Dirac-Hartree-Fock-Slater (DHFS). Para garantizar la ortogonalidad de las funciones de onda monoeléctricas, utilizaremos el mismo potencial para describir los estados inicial y final del blanco. Con este esquema, hemos deducido expresiones exactas para la sección eficaz doblemente diferencial (SEDD), dependientes de la pérdida de energía y de la energía de retroceso (o del ángulo de dispersión). Nuestra SEDD se escribe como la suma de dos términos, cada uno de los cuales es el producto de un factor cinemático y de una función. Estas funciones son, respectivamente, las intensidades de oscilador generalizadas (“generalized oscillator strength”) longitudinal (GOS) y transversal (TGOS), y caracterizan la respuesta del átomo. La GOS longitudinal da cuenta de la interacción instantánea de Coulomb entre el proyectil y el electrón de la capa activa. La TGOS describe las transiciones inducidas por la interacción transversal (intercambio de fotones virtuales). Hemos deducido expresiones compactas para estas dos funciones adecuadas para su cálculo numérico, y desarrollado además algoritmos y herramientas de cálculo para evaluar la GOS y la TGOS, y a partir de éstas, la SEDD, la sección eficaz diferencial en pérdida (SED) de energía, y las secciones eficaces integradas (total, de frenado y de dispersión de energía).

Las expresiones de la SEDD en términos de la GOS y la TGOS constituyen el punto de partida para la deducción de las fórmulas de Bethe para la sección eficaz total y la sección eficaz de frenado. Estas fórmulas son válidas asintóticamente, es decir, aplican sólo en el límite de alta energía. Las desviaciones de las secciones eficaces exactas, que se obtienen de integrar numéricamente la SEDD, causadas por las aproximaciones adoptadas en la deducción de estas fórmulas se conocen como correcciones de capas (Fano, 1963). Los cálculos existentes de correcciones de capas propuestos hasta la fecha se basan, o bien en modelos hidrogenoides, corregidos parcialmente para dar cuenta del apantallamiento de la carga nuclear por los electrones atómicos (Bichsel, 2002, y las referencias que en él se dan), o bien en la teoría del gas de electrones libres (Bonderup, 1967). En esta tesis, calcularemos las correcciones de capas como la diferencia entre las secciones eficaces integradas numéricamente y los valores de las correspondientes fórmulas asintóticas.

Nuestro trabajo no tiene por objetivo calcular secciones eficaces realistas, ya que el modelo de electrones independientes y el potencial DHFS que estamos utilizando son demasiado simplistas para reproducir correctamente los detalles del espectro real de excitaciones de átomos aislados. Este esquema proporciona resultados realistas sólo para la ionización de las capas más internas por impacto de partículas de alta energía. A

pesar de estas limitaciones, nuestro planteamiento permite el cálculo de GOSs atómicas “exactas”, a partir de las cuales se pueden obtener la SED en pérdida de energía, las secciones eficaces atómicas totales, y las correcciones de capas. En particular, incluyendo el cálculo de todas las excitaciones posibles del átomo (hacia estados tanto ligados como libres), nuestro esquema permite verificar la consistencia de la regla de suma de Bethe, que afirma que la integral de la GOS sobre la pérdida de energía es igual al número de electrones del átomo o ion blanco. Esta regla de suma juega un papel fundamental en la deducción de las fórmulas asintóticas del poder de frenado, pero sólo se puede demostrar para el caso no relativista, es decir, aplica únicamente a átomos con un número atómico bajo. Como tanto las correcciones de capas como las desviaciones relativistas de la regla de suma de Bethe se originan principalmente en las capas internas, es de esperar que los valores de estas dos cantidades calculados con nuestro esquema sean realistas.

En las colisiones inelásticas, la mayoría de las excitaciones involucra electrones de las capas externas (las menos ligadas) de los átomos. Aunque la ionización de capas internas es mucho menos probable, son éstas las que originan la emisión de rayos x y de electrones Auger. En consecuencia, se necesitan secciones eficaces de ionización realistas para el análisis cuantitativo en las técnicas de espectroscopia con haces de electrones (EPMA, AES y EELS) y para la simulación Monte Carlo del transporte acoplado de electrones y fotones. A pesar de esta necesidad, la información experimental existente es escasa, y frecuentemente está afectada por incertidumbres importantes. La falta de información experimental ha motivado el uso de fórmulas semiempíricas (ver, por ejemplo, Casnati et al., 1982), basadas en modelos simples y/o ajustadas a los datos experimentales, y que por lo tanto, están afectadas por las mismas incertidumbres que éstos.

Tampoco la PWBA es confiable en el rango de energías de interés, ya que la PWBA no tiene cuenta los efectos de distorsión del potencial atómico en las funciones de onda (inicial y final) del proyectil. Además, en el caso de colisiones con electrones, la PWBA no permite describir de manera consistente los efectos de intercambio (que resultan de la indistinguibilidad entre el proyectil y los electrones atómicos).

La aproximación de Born con ondas planas distorsionadas (en inglés “distorted wave Born approximation”, DWBA), representa una descripción teórica más elaborada que permite dar cuenta de estos efectos (distorsión e intercambio) de manera consistente. Tanto en la PWBA como en la DWBA, la función de onda del estado final del electrón activo se describe con una onda plana distorsionada, es decir, con una solución exacta de la ecuación de Dirac con el potencial central  $V(r)$ . Mientras que en la PWBA la perturbación  $\mathcal{H}'$  incluye la interacción completa, en la DWBA la perturbación se toma como la diferencia  $\mathcal{H}'' = \mathcal{H}' - V(r)$ , lo que permite describir las funciones de onda del proyectil con ondas planas distorsionadas, y dar cuenta de la distorsión del potencial  $V(r)$  en el proyectil de manera exacta. La eficacia de la DWBA reside en el hecho de que  $\mathcal{H}''$  es típicamente menor que  $\mathcal{H}'$ , por lo que es de esperar que ahora un tratamiento perturbativo a primer orden sea más realista. Segui et al. (2003) y Colgan (2006) han presentado una versión semi-relativista de la DWBA cuyos resultados para átomos neutros están en buen acuerdo con las medidas experimentales recientes de Llovet y Merlet (por ejemplo, Llovet et al., 2000; Merlet et al., 2004; Merlet et al., 2006) para la ioniza-

ción de las capas K, L y M. Desafortunadamente, debido a la lenta convergencia de las series de ondas parciales, y a que estas dos versiones de la DWBA ignoran la interacción transversal, los cálculos de estos autores se restringen a energías del proyectil de hasta unas 10 veces la energía de ionización de la capa activa, y a elementos ligeros.

En esta tesis, hemos desarrollado un esquema de cálculo que combina la PWBA completa (incluyendo tanto la interacción longitudinal como la transversal), con la versión semi-relativista de la DWBA de Segui et al.. Nuestro esquema nos permite calcular secciones eficaces de ionización con una precisión equivalente a la DWBA, pero para proyectiles con energías cinéticas arbitrariamente altas. La clave de nuestro planteamiento reside en que los efectos de distorsión causados por el potencial atómico del blanco decrecen cuando aumenta el momento angular orbital del proyectil. Podemos considerar la diferencia entre las secciones eficaces diferenciales de la DWBA y de la PWBA como una corrección a la última, con la esperanza de que los términos de la serie de ondas parciales de la diferencia decrezcan más rápido con el momento angular orbital que la correspondiente serie de la DWBA. Los cálculos numéricos confirman este hecho, y revelan que esta corrección puede ser evaluada para energías de hasta  $25E_a$ , siendo  $E_a$  la energía de ionización del electrón activo, es decir, 2.5 veces el intervalo de convergencia numérica de las series DWBA. Con la ayuda de este método, hemos calculado secciones eficaces de ionización en la DWBA para proyectiles con energías que van desde el umbral de ionización hasta  $16E_a$  y para las capas K, L y M de todos los átomos comprendidos entre el hidrógeno ( $Z = 1$ ) y el einstenio ( $Z = 99$ ). Para energías entre  $16E_a$  y  $25E_a$  el programa converge, pero los cálculos son muchos más lentos. La diferencia entre las secciones eficaces de ionización de la PWBA y de la DWBA varía suavemente con la energía del proyectil, y para energías bien por encima de la posición del máximo de la sección eficaz, su magnitud decrece rápidamente cuando aumenta la energía.

Hemos encontrado además, que para energías mayores que  $\sim 16E_a$ , las secciones eficaces de la DWBA pueden ser aproximadas fielmente por secciones eficaces PWBA multiplicadas por un factor de escalado de la forma  $E/(E + bE_a)$ , donde el parámetro  $b$  es independiente de la energía, y se determina empalmando la sección eficaz DWBA calculada en  $E = 16E_a$  con la PWBA “escalada”. Este tipo de corrección (ver, por ejemplo, Mayol y Salvat, 1990; Kim et al., 2001) da cuenta de manera aproximada del incremento efectivo de la energía cinética del proyectil causado por el potencial atómico, y nos permite calcular de manera sencilla las secciones eficaces de ionización para proyectiles con energías superiores a  $16E_a$ .

Hemos implementado este esquema de cálculo en un conjunto de programas Fortran, con los que hemos generado una base de datos de secciones eficaces realistas de ionización de las capas K, L y M, por impacto de electrones y positrones con energías comprendidas entre 50 eV y 1 GeV. Esta base de datos, que se hará pública en breve, ha sido incorporada al programa de simulación PENELOPE (Salvat et al., 2009). Con la ayuda de este programa, hemos simulado rendimientos de rayos x, y los hemos comparado con medidas experimentales para varios elementos, energías y ángulos de incidencia del haz de electrones. En las simulaciones hemos utilizado secciones eficaces de ionización DWBA y PWBA. Los resultados ponen de manifiesto que el acuerdo entre la simula-

ción y experimento es mejor cuando se usan secciones eficaces DWBA. Para facilitar el uso práctico, la base de datos numérica ha sido parametrizada mediante expresiones analíticas simples, los coeficientes de las cuales han sido determinados mediante ajustes de mínimos cuadrados (Bote et al., 2009a).

Para la simulación del transporte de electrones, también es necesaria una buena descripción de las colisiones elásticas. Normalmente, el scattering elástico e inelástico se consideran como procesos independientes, cuando en realidad existe un flujo de partículas del canal elástico hacia canales inelásticos, lo que provoca una reducción global de la SED elástica. Este efecto se conoce con el nombre de absorción inelástica (Salvat, 2003). Para evaluarlo utilizamos un modelo semiempírico de potencial óptico, que incluye una componente imaginaria que da cuenta de la absorción. La intensidad de este término depende de un parámetro empírico e independiente de la energía. En el caso de átomos libres, el valor de este parámetro se puede determinar ajustando los valores teóricos a las SEDs experimentales para ángulos intermedios y grandes. Cuando determinamos así el valor del parámetro de intensidad, la sección eficaz de absorción calculada a partir del teorema óptico concuerda razonablemente con la predicción de la fórmula asintótica de Bethe para la sección eficaz inelástica total, lo que justifica el uso de esta fórmula para ajustar la intensidad de la componente imaginaria del potencial óptico, en aquellos casos en los que no se disponga de información experimental.

Esta tesis está estructurada como sigue. En el Capítulo 2 introducimos de manera detallada el cálculo de secciones eficaces inelásticas en la primera aproximación de Born. El tercer Capítulo está dedicado a la descripción de las herramientas y los algoritmos de cálculo que hemos desarrollado para evaluar numéricamente tanto las GOSs como las secciones eficaces integradas. En el Capítulo 4 presentamos nuestra deducción de las fórmulas asintóticas, y describimos el cálculo de correcciones de capas. El Capítulo 5 presenta nuestro esquema combinado de cálculo de secciones eficaces DWBA, así como la base de datos numérica que hemos generado, y las fórmulas analíticas. En los Apéndices A y B podemos encontrar, respectivamente, una descripción de la cinemática de las colisiones inelásticas, y un resumen de las funciones de onda de Dirac que se utilizan en nuestros cálculos. El trabajo que describimos a continuación ha dado lugar a cuatro publicaciones en revistas internacionales, un documento interno de 150 páginas y varias comunicaciones a congresos. El apéndice C presenta una lista de todo ello.

# Capítulo 2

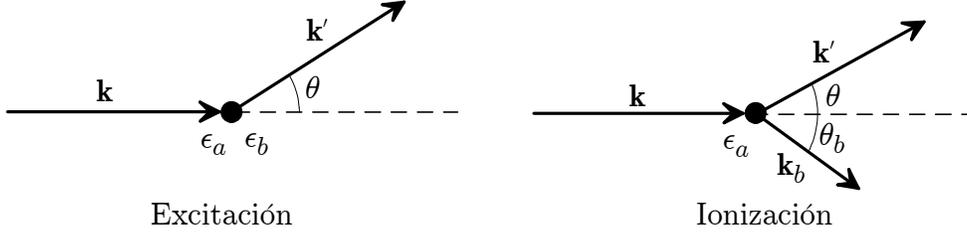
## Colisiones inelásticas en la primera aproximación de Born

En este Capítulo, presentamos una deducción detallada de la sección eficaz doblemente diferencial (SEDD) en la pérdida de energía  $W$  y en la energía de retroceso  $Q$ , para las colisiones inelásticas de partículas cargadas con átomos neutros libres o iones positivos. Describiremos los estados del átomo blanco mediante un potencial central y un modelo de partículas independientes, es decir, como determinantes de Slater; y el campo electromagnético expresado en el gauge de Coulomb (Fano, 1963). De este modo, tratando la interacción entre el proyectil y el blanco como una perturbación a primer orden, los elementos de matriz se reducen a la suma de integrales monoelectrónicas, de acuerdo con el escenario intuitivo que recibe el nombre de aproximación de “un-electrón-activo”. La SEDD que se obtiene de este esquema se expresa en términos de dos funciones, la intensidad generalizada de oscilador, “generalized oscillator strength” longitudinal (GOS), que caracteriza la respuesta del átomo blanco a la interacción instantánea de Coulomb; y la intensidad transversal generalizada de oscilador (TGOS), que da cuenta de la interacción transversal (intercambio de fotones virtuales). La introducción de esta función, la TGOS, es uno de los aspectos originales de esta tesis.

### 2.1. Aspectos generales

Consideraremos la colisión de un proyectil (0) de masa  $M$ , carga  $Z_0e$  con un átomo o ion de número atómico  $Z$  y con  $N$  electrones ( $I = 1, \dots, N$ ), en su estado fundamental. La teoría presentada aquí es aplicable tanto a átomos neutros ( $N = Z$ ) como a iones positivos ( $N < Z$ ). Todos los cálculos se desarrollarán en el sistema de referencia del laboratorio, considerando que el núcleo del átomo blanco se encuentra en reposo. La Figura 2.1 muestra la cinemática de este proceso. Antes de la colisión, el proyectil se mueve con velocidad  $\mathbf{v}$ , momento lineal  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  y energía cinética  $E$ ; las cantidades correspondientes después de la colisión, denotadas por primas, son, respectivamente,  $\mathbf{v}'$ ,  $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$  y  $E'$ . En adelante, consideraremos que la energía cinética del proyectil es mucho

mayor que la energía cinética promedio de los electrones atómicos, de modo que resulte justificado utilizar la primera aproximación de Born.



**Figura 2.1:** Cinemática de las colisiones inelásticas. Las cantidades  $\epsilon_a$  y  $\epsilon_b$  son, respectivamente, las energías de los estados inicial y final del electrón blanco.  $\theta$  es el ángulo polar de dispersión del proyectil, y, en el caso de colisiones ionizantes,  $\theta_b$  es el ángulo polar de la dirección de emisión del electrón secundario.

El hamiltoniano total del sistema es la suma de los hamiltonianos del proyectil ( $\mathcal{H}_P$ ), del átomo blanco ( $\mathcal{H}_T$ ), y una perturbación ( $\mathcal{H}'$ ) que representa la interacción del proyectil con los  $N$  electrones atómicos. Es decir,

$$\mathcal{H}(0, 1, \dots, Z) = \mathcal{H}_T(1, \dots, Z) + \mathcal{H}_P(0) + \mathcal{H}'(0, 1, \dots, N). \quad (2.1)$$

Considerando que las interacciones entre los electrones y el núcleo están dominadas por la interacción de Coulomb, el hamiltoniano del átomo blanco se puede aproximar por

$$\mathcal{H}_T = \sum_{I=1}^N [-e\varphi_{\text{nuc}}(r_I) + \mathcal{K}(I)] + \sum_{I<J} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_I - \mathbf{r}_J|}, \quad (2.2)$$

donde  $e$  es la unidad de carga elemental (es decir, el valor absoluto de la carga del electrón),  $\mathbf{r}_I$  los vectores de posición de los electrones atómicos, y  $\varphi_{\text{nuc}}(r)$  el potencial electrostático del núcleo. En la expresión (2.2) está implícito que la distribución nuclear de carga posee simetría esférica y está centrada en el origen de coordenadas. Además, en la práctica, el efecto del tamaño finito del núcleo sobre las funciones de onda atómicas, y sobre la energía de ligadura de cada capa, es pequeño, por lo que podemos tomar el núcleo como puntual sin introducir errores apreciables, y escribir

$$\varphi_{\text{nuc}} = Ze/r. \quad (2.3)$$

$\mathcal{K}$  es el operador de “energía cinética” de la teoría de Dirac, es decir,

$$\mathcal{K}(I) = c\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_I \cdot \mathbf{p}_I + (\tilde{\beta}_I - 1)m_e c^2, \quad (2.4)$$

donde  $m_e$  es la masa en reposo del electrón, y  $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_I$  y  $\tilde{\beta}_I$  son las matrices de Dirac para el electrón  $I$ . En lo que sigue consideraremos el caso concreto de un proyectil con spin  $\frac{1}{2}$ , descrito por la ecuación de Dirac, es decir,

$$\mathcal{H}_P(0) = \mathcal{K}(0) = c\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \mathbf{p}_0 + (\tilde{\beta}_0 - 1)M c^2, \quad (2.5)$$

donde  $\tilde{\alpha}_0$  y  $\tilde{\beta}_0$  son igualmente matrices de Dirac, pero en este caso, correspondientes al proyectil. Es importante notar que este tratamiento sólo es correcto para electrones y muones (y sus respectivas antipartículas), pero que, en cambio, para otras partículas cargadas, tales como protones, partículas alfa o iones pesados, los resultados teóricos obtenidos a partir del presente esquema, sólo serán correctos cuando las cantidades de interés dependan débilmente de los detalles de las funciones de onda del proyectil. La perturbación  $\mathcal{H}'$  viene dada por la expresión

$$\mathcal{H}'(0, 1, \dots, N) = Z_0 e \varphi_{\text{nuc}}(r_0) + \sum_{I=1}^N H_{\text{int}}(0, I), \quad (2.6)$$

donde el primer término corresponde a la interacción de Coulomb del proyectil con el núcleo atómico, mientras que el operador  $\mathcal{H}_{\text{int}}(0, I)$  representa la interacción efectiva del proyectil con el electrón  $I$ -ésimo.

La perturbación  $\mathcal{H}'$  induce transiciones entre los autoestados  $\phi(0) \Psi(1, \dots, N)$  del hamiltoniano no perturbado  $\mathcal{H}_T + \mathcal{H}_P$ . Como  $\mathcal{H}_P$  es el hamiltoniano de una partícula libre, las funciones de onda del proyectil son las ondas planas  $\phi(0)$ . Este esquema de cálculo se conoce como la aproximación de Born con ondas planas o PWBA, de sus siglas en inglés “plane-wave Born approximation”.

La principal limitación de la PWBA es que  $\mathcal{H}'$  representa la totalidad de la interacción entre el proyectil y el blanco. Resulta más efectivo reducir la perturbación, restando un potencial central  $V_P(r_0)$  que depende únicamente de las coordenadas del proyectil, y escribir el hamiltoniano (2.1) como

$$\mathcal{H}(0, 1, \dots, N) = \mathcal{H}_T(1, \dots, N) + [\mathcal{H}_P(0) + V_P(r_0)] + \mathcal{H}''. \quad (2.7)$$

En este esquema, los estados  $\psi(0)$  del proyectil antes y después de la colisión, son ondas planas distorsionadas, ec. (B.20), es decir, soluciones de la ecuación de Dirac con el potencial central  $V_P(r_0)$ ,

$$\left[ c \tilde{\alpha}_0 \cdot \mathbf{p}_0 + (\tilde{\beta}_0 - 1) M c^2 + V_P(r_0) \right] \psi(0) = E \psi(0), \quad (2.8)$$

que asintóticamente (lejos del núcleo) se comportan como una onda plana más una onda esférica entrante (o saliente) (ver, por ejemplo, Breit y Bethe, 1954). Podemos pues considerar que la perturbación

$$\mathcal{H}'' = Z_0 e \varphi_{\text{nuc}}(r_0) + \sum_{I=1}^N H_{\text{int}}(0, I) - V_P(r_0) \quad (2.9)$$

induce transiciones entre los autoestados  $\psi(0) \Psi(1, \dots, N)$  del hamiltoniano no perturbado  $\mathcal{H}_T + [\mathcal{H}_P + V_P]$ . El correspondiente tratamiento perturbativo a primer orden se conoce como la aproximación de Born con ondas distorsionadas, DWBA, de “distorted-wave Born approximation”.

Los resultados de la DWBA son más realistas que los de la PWBA porque, eligiendo convenientemente el potencial  $V_P(r_0)$ , que se trata exactamente, la perturbación  $\mathcal{H}''$  se

hace mucho más pequeña que la interacción original  $\mathcal{H}'$ . Nótese no obstante que  $\mathcal{H}''$  depende de las coordenadas de los electrones atómicos y, por lo tanto, no puede ser reducida a cero. Evidentemente, cuando hacemos  $V_P(r_0) = 0$ , las ondas distorsionadas se reducen a ondas planas, y la DWBA se convierte en la PWBA.

## 2.2. La aproximación de un-electrón-activo

Con el fin de simplificar los cálculos, y para facilitar su implementación numérica, de ahora en adelante describiremos los estados del átomo (o ion) blanco utilizando la aproximación de electrones independientes (aei) en un potencial central, es decir, supondremos que los electrones atómicos se mueven de manera independiente unos de otros en un potencial central común  $V_T(r)$  (por ejemplo, un potencial de tipo Dirac-Hartree-Fock-Slater). Esta aproximación es equivalente a sustituir el hamiltoniano (2.2) por

$$\mathcal{H}_T^{\text{aei}} = \sum_{I=1}^N [\mathcal{K}(I) + V_T(r_I)] . \quad (2.10)$$

Los orbitales monoparticulares  $\psi_{n\kappa m}(\mathbf{r})$  son soluciones de la ecuación de Dirac

$$\left[ c\tilde{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{p} + (\tilde{\beta} - 1)m_e c^2 + V_T(r) \right] \psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}) = \epsilon_{n\kappa} \psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

donde  $\epsilon_{n\kappa}$  es la energía del electrón (descontando la energía en reposo). Los determinantes de Slater  $\Psi_n$ , que son productos antisimetrizados de  $N$  orbitales distintos, constituyen una base completa de funciones propias del hamiltoniano  $\mathcal{H}_T^{\text{aei}}$ .

En estas condiciones, cuando la interacción con el proyectil se trata a primer orden de teoría de perturbaciones, las únicas transiciones permitidas del átomo blanco son aquellas en las que los estados inicial  $\Psi_a$  (normalmente el estado fundamental) y el final  $\Psi_b$ , difieren en un único orbital, es decir, aquellas excitaciones que involucran un único electrón. Se obtiene así la aproximación de un-electrón-activo: en las excitaciones del blanco, el electrón activo sufre una transición desde el orbital ligado  $\psi_a$  hacia un orbital desocupado (ligado o libre)  $\psi_b$ , mientras que los orbitales del resto de electrones atómicos permanecen “congelados” en el transcurso de la interacción. Es importante notar que los orbitales  $\psi_a$  y  $\psi_b$  son mutuamente ortogonales, porque son soluciones de la ecuación de Dirac con el mismo potencial, lo que conduce a simplificaciones notorias tanto teóricas como numéricas.

En principio, la teoría se puede liberar de la aproximación de un-electrón-activo sustituyendo los orbitales electrónicos activos por funciones de onda atómicas genéricas. Sin embargo, el cálculo de funciones de onda realistas (tales que, por ejemplo, sean capaces de reproducir el espectro de excitaciones observado en el rango óptico), es sumamente complejo y complicado, debido a las fuertes correlaciones entre las variables espaciales y de spin de los electrones ligados. De todas formas, la aproximación de un-electrón-activo proporciona una descripción realista de las excitaciones e ionizaciones de capas

internas (fuertemente ligadas), debido principalmente a que el potencial efectivo que “sienten” los electrones en estas capas está dominado por la interacción electrostática apantallada, y a que los efectos de correlación entre electrones representan sólo una pequeña perturbación. Por otro lado, esta aproximación resulta insuficiente para describir las excitaciones hacia estados débilmente ligados y la ionización de electrones de capas externas, que son más sensibles a los efectos de correlación.

En la aproximación de un electrón activo, los orbitales ligados solución de la ecuación de Dirac (2.14) adquieren la forma (Grant, 1961)

$$\psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) \Omega_{\kappa m}(\hat{\mathbf{r}}) \\ iQ_{n\kappa}(r) \Omega_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

donde  $\Omega_{\kappa m}(\hat{\mathbf{r}})$  son spinores esféricos,  $n$  es el número cuántico principal y  $\kappa$  es el número cuántico relativista de momento angular. La expresión

$$\kappa = (\ell - j)(2j + 1).$$

relaciona  $\kappa$  con los números cuánticos de momento angular orbital y total,  $\ell$  y  $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ , respectivamente.

Las funciones de onda radiales  $P_{n\kappa}(r)$  y  $Q_{n\kappa}(r)$  satisfacen el sistema acoplado de ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{dP_{n\kappa}}{dr} &= -\frac{\kappa}{r} P_{n\kappa} + \frac{\epsilon_{n\kappa} - V + 2m_e c^2}{c\hbar} Q_{n\kappa}, \\ \frac{dQ_{n\kappa}}{dr} &= -\frac{\epsilon_{n\kappa} - V}{c\hbar} P_{n\kappa} + \frac{\kappa}{r} Q_{n\kappa}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

con las condiciones de contorno  $P_{n\kappa}(0) = 0$  y  $Q_{n\kappa}(0) = 0$ .

De acuerdo con Segui et al. (2003) y Bote y Salvat (2008), adoptaremos como potencial  $V_T(r)$  para los electrones atómicos el potencial autoconsistente, y esféricamente promediado, de Dirac-Hartree-Fock-Slater (DHFS). Este potencial queda determinado por la densidad  $\rho(r)$  de electrones atómicos<sup>1</sup>, y se puede escribir como

$$V_{\text{DHFS}}(r) = -e\varphi_{\text{nuc}}(r) - e\varphi_{\text{el}}(r) + V_{\text{ex}}^{\text{Slater}}(r), \quad (2.14)$$

donde  $\varphi_{\text{nuc}}(r)$  es el potencial electrostático del núcleo,

$$\varphi_{\text{el}}(r) = \frac{e}{r} \int_0^r \rho(r') 4\pi r'^2 dr' + e \int_r^\infty \rho(r') 4\pi r' dr', \quad (2.15)$$

<sup>1</sup>La densidad electrónica viene dada por

$$\rho(r) = \sum_I \psi_I^\dagger(\mathbf{r}_I) \psi_I(\mathbf{r}_I),$$

donde la suma recorre todos los diferentes orbitales ocupados de la configuración del estado fundamental. En el caso de configuraciones parcialmente ocupadas, queda implícito un promedio sobre los orbitales de las capas abiertas.

es el potencial electrostático de la nube de electrones atómicos y

$$V_{\text{ex}}^{\text{Slater}}(r) = -e^2 (3/\pi)^{1/3} [\rho(r)]^{1/3} \quad (2.16)$$

es la interacción de intercambio en la aproximación “local” de Slater (1951). Además, para reproducir el comportamiento correcto del potencial a grandes distancias,  $-(Z - N + 1)e^2/r$ , adoptaremos la corrección de Latter (1955) para la cola del potencial. Con todo,  $V_{\text{DHFS}}(r)$  adquiere la forma

$$V_{\text{DHFS}}(r) \equiv \begin{cases} -e\varphi_{\text{nuc}}(r) - e\varphi_{\text{el}}(r) + V_{\text{ex}}^{\text{Slater}}(r) & \text{si } r < r_{\text{Latter}}, \\ -(Z - N + 1)e^2/r & \text{si } r > r_{\text{Latter}}, \end{cases} \quad (2.17)$$

donde el radio de corte  $r_{\text{Latter}}$  es la solución más externa de la ecuación

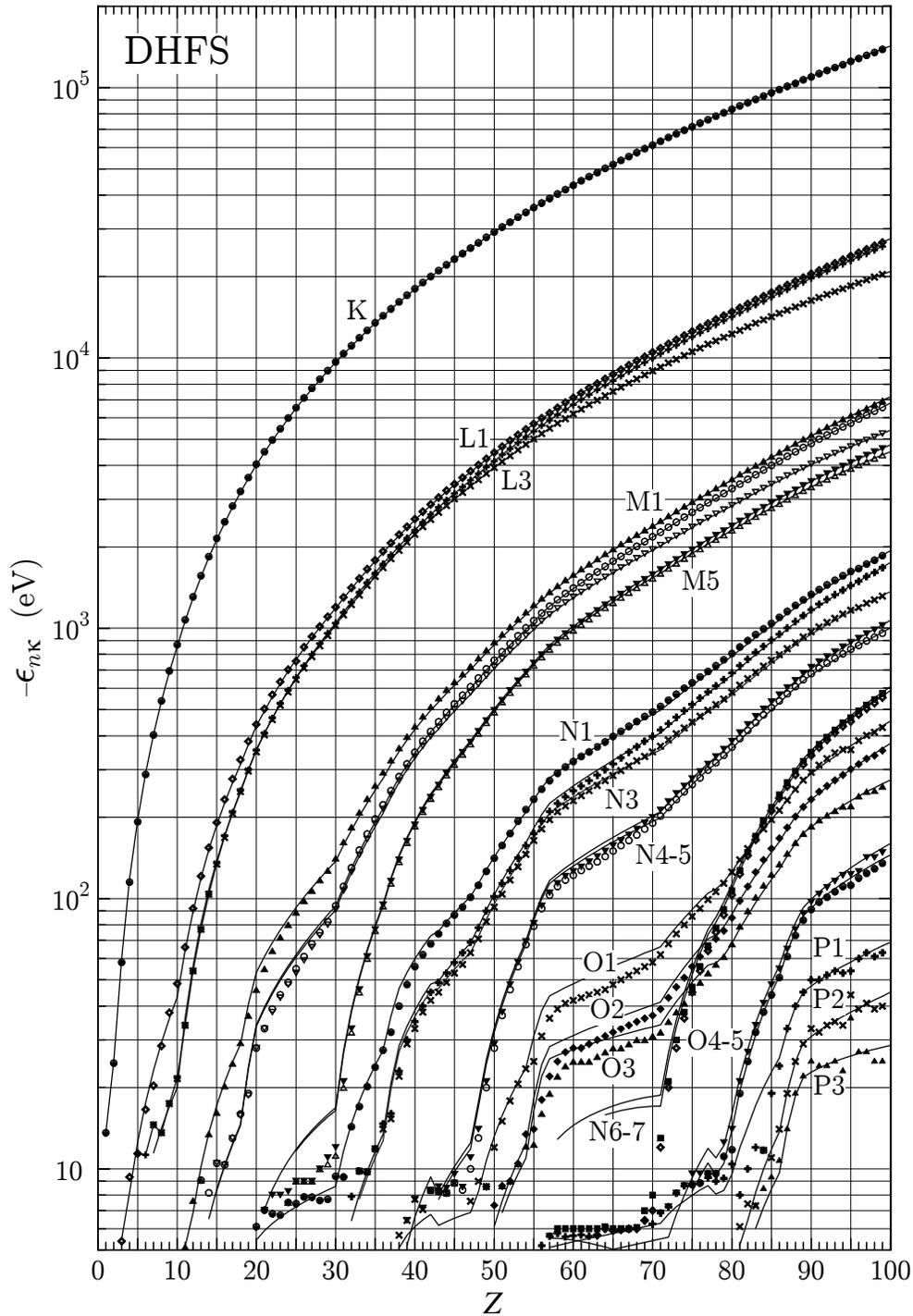
$$-e\varphi_{\text{nuc}}(r) - e\varphi_{\text{el}}(r) + V_{\text{ex}}^{\text{Slater}}(r) = -(Z - N + 1)e^2/r. \quad (2.18)$$

A pesar de que existen otros cálculos de estructura atómica más avanzados y realistas, la elección del potencial DHFS se justifica, no sólo por su sencillez, sino también por la siguiente razón práctica. Para capas internas con energías de ionización mayores que unos 200 eV, los autovalores  $-\epsilon_{n\kappa}$  de la ecuación de Dirac son muy cercanos a los valores experimentales de la energía de ionización, como se muestra en la Figura 2.2 (para una descripción más detallada ver Salvat y Fernández-Varea, 2009). Este hecho justifica además que en lo que sigue tomemos la energía de ionización  $E_{n\kappa}$  de la capa  $n\kappa$  igual al autovalor autovalor DHFS (con el signo cambiado), es decir,  $E_{n\kappa} = -\epsilon_{n\kappa}$ .

En el caso de colisiones de electrones con átomos, con el fin de garantizar que los orbitales del proyectil y del átomo blanco sean mutuamente ortogonales, tomaremos el potencial de distorsión igual al potencial atómico, es decir,  $V_{\text{P}}(r) = V_{\text{T}}(r) = V_{\text{DHFS}}(r)$ . Esta elección, que simplifica notablemente los cálculos, es la habitual en la literatura (Segui et al. 2003; Bote y Salvat, 2008; y otros). La idea subyacente es que tanto el proyectil como los electrones blanco interactúan del mismo modo con el resto de electrones atómicos inactivos. Nótese que esta elección no tiene en cuenta la dependencia en la velocidad del electrón de la interacción de intercambio (ver, por ejemplo, Riley y Truhlar, 1975; y las referencias que se dan ahí). En cambio, para colisiones de positrones, así como otras partículas cargadas, parece natural tomar  $V_{\text{P}}(r)$  igual a la interacción electrostática con la distribución de carga atómica,

$$V_{\text{st}}(r) = Z_0 e\varphi_{\text{nuc}}(r) + Z_0 e\varphi_{\text{el}}(r). \quad (2.19)$$

Es importante notar, no obstante, que a diferencia de los electrones, en este caso el potencial alcanza la forma asintótica de Coulomb para distancias mucho mayores que el  $r_{\text{Latter}}$ , lo que dificulta y enlentece el cálculo numérico. Para sortear este obstáculo, siguiendo a Segui et al. (2003), procederemos de manera paralela al caso de electrones, y adoptaremos  $V_{\text{P}}(r) = -Z_0 V_{\text{DHFS}}(r)$ , es decir, tomaremos el potencial de distorsión igual al potencial DHFS, modificado de acuerdo con el signo de la carga del proyectil. Si bien es cierto que este potencial incluye contribuciones de la interacción de intercambio, lo que a primera vista parece inapropiado para otras partículas diferentes del electrón, para distancias radiales suficientemente grandes,  $-Z_0 V_{\text{DHFS}}(r)$  representa correctamente la interacción del proyectil con los electrones atómicos inactivos.



**Figura 2.2:** Energías de ionización de las capas de átomos neutros. Los símbolos son valores experimentales (Carlson, 1975). Las líneas representan las energías (cambiadas de signo) de los orbitales monoparticulares  $-\epsilon_{n\kappa}$  del potencial  $V_{\text{DHFS}}(r)$ , ec. (2.17). Todas las energías están en eV.

### 2.2.1. Elementos de matriz de transición

Como veremos más adelante, las secciones eficaces para las colisiones inelásticas se expresan en términos de elementos de matriz del operador  $\mathcal{H}''$  entre los estados inicial y final del sistema. En la aproximación de un electrón activo, utilizando las reglas de Slater-Condon (Condon, 1930), estos elementos de matriz toman la forma

$$T_{fi} = \left\langle \psi_{\mathbf{k}', m'_s}^{(-)}(0) \psi_b(1) \left| \mathcal{H}_{\text{int}}(0, 1) \right| \psi_{\mathbf{k}, m_s}^{(+)}(0) \psi_a(1) \right\rangle, \quad (2.20)$$

donde el hamiltoniano  $\mathcal{H}_{\text{int}}(0, 1)$  describe la interacción entre el proyectil y el electrón activo.  $\psi_{\mathbf{k}, m_s}^{(+)}$  y  $\psi_{\mathbf{k}', m'_s}^{(-)}$  son las ondas planas distorsionadas correspondientes a los estados inicial y final del proyectil, respectivamente (ver la Sección B.2 del Apéndice B). En lo que sigue, adoptaremos el siguiente criterio para la normalización de las ondas planas distorsionadas

$$\int \left[ \psi_{\mathbf{k}', m'_s}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger \psi_{\mathbf{k}, m_s}^{(\pm)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{m_s, m'_s}, \quad (2.21a)$$

es decir, las ondas planas distorsionadas están normalizadas en la escala del número de ondas. Es también oportuno recordar que los estados ligados (2.12) están normalizados a la unidad, es decir,

$$\int \psi_{n\kappa m}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1. \quad (2.21b)$$

El hamiltoniano  $H_{\text{int}}(0, 1)$  describe la interacción del electrón activo con el campo electromagnético del proyectil. En el “gauge” de Coulomb, el potencial escalar es el potencial instantáneo de Coulomb, y el potencial vector es transversal. La parte transversal de la interacción, que se conoce como “interacción de Breit”, describe el “intercambio de fotones virtuales”, que en electrodinámica cuántica se trata perturbativamente como un proceso de segundo orden, que corresponde a la emisión de un fotón por parte del proyectil o del blanco, seguida de la absorción del mismo por la otra partícula. Para una discusión del significado de la interacción de Breit y de las diferentes versiones de la misma utilizadas en la literatura ver, por ejemplo, Mann y Johnson (1971).

En los cálculos que siguen, adoptaremos el hamiltoniano de interacción  $H_{\text{int}}(0, 1)$  utilizado por Fano (1963) en su estudio sobre el poder frenado de partículas pesadas:

$$\mathcal{H}_{\text{int}}(0, 1) = \mathcal{H}^L(0, 1) + \mathcal{H}^T(0, 1) \quad (2.22a)$$

con

$$\mathcal{H}^L(0, 1) = -\frac{Z_0 e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0|} = -\frac{Z_0 e^2}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \frac{1}{q^2} \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)], \quad (2.22b)$$

y

$$\mathcal{H}^T(0, 1) = -\frac{Z_0 e^2}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \left( -\frac{\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_1 - (\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \hat{\mathbf{q}})(\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_1 \cdot \hat{\mathbf{q}})}{q^2 - (W/\hbar c)^2} \right) \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)]. \quad (2.22c)$$

Nótese que el hamiltoniano  $H_{\text{int}}(0, 1)$  así definido es correcto sólo a primer orden en  $e^2$ . Para una deducción detallada del mismo, ver la Sección 2 de Bote y Salvat (2010).

Conviene indicar que en la mayoría de estudios de colisiones inelásticas de proyectiles relativistas (Møller, 1932; Bethe, 1933; Arthurs y Moiseiwitsch, 1958; Scofield, 1978) se utiliza el gauge de Lorenz, en el que la interacción toma la forma del hamiltoniano de Møller. La ventaja del hamiltoniano (2.22) es que separa limpiamente las partes longitudinal (Coulomb) y transversal (Breit) de la interacción. Nótese además que como la contribución de cada  $\tilde{\alpha}$  es del orden de  $v/c$  ( $v = |\mathbf{v}|$  es la velocidad de la partícula) los efectos de la interacción transversal (2.22b) sólo son apreciables para velocidades relativistas tanto del electrón activo como de proyectil, es decir, para electrones de capas internas de elementos pesados y proyectiles muy energéticos. En el caso de la PWBA, como veremos más adelante, los resultados obtenidos a partir de (2.22), y a partir del hamiltoniano de Møller son equivalentes.

Mientras que los cálculos con la PWBA son factibles para proyectiles con energías arbitrariamente grandes, debido a problemas de convergencia los estudios basados en la DWBA son posibles sólo para electrones y positrones con energías menores que unas 10 veces la energía de ionización de la capa del electrón activo. Como para estas energías la contribución de la interacción transversal es pequeña, en los cálculos DWBA (Segui et al., 2003; Colgan et al., 2006) se considera sólo la interacción (longitudinal) de Coulomb, es decir,

$$\mathcal{H}_{\text{int}}(0, 1) \approx \mathcal{H}^L(0, 1).$$

Esta simplificación establece un límite superior para el rango de energías donde la DWBA es aplicable. De hecho, la comparación de medidas experimentales de la sección eficaz triplemente diferencial de ionización por impacto de electrones con cálculos teóricos, indica que sólo se consigue un acuerdo satisfactorio entre la teoría y los experimentos cuando se toma el hamiltoniano completo (2.22) (ver Nakel y Whelan 1995). Este hecho, junto con las dificultades numéricas de los cálculos con la DWBA, motivaron el esquema de cálculo que se describe en el Capítulo 5 de la presente tesis, que combina la DWBA con la PWBA.

Introduciendo el hamiltoniano (2.22) en los elementos de matriz transición (2.20) obtenemos

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \left\langle \psi_{\mathbf{k}', m'_S}^{(-)}(0) \psi_b(1) \left| \mathcal{H}_{\text{int}}(0, 1) \right| \psi_{\mathbf{k}, m_S}^{(+)}(0) \psi_a(1) \right\rangle \\ &= -\frac{Z_0 e^2}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{r}_0 \int d\mathbf{r}_1 \left[ \psi_{\mathbf{k}', m'_S}^{(-)}(\mathbf{r}_0) \right]^\dagger \psi_b^\dagger(\mathbf{r}_1) \\ &\quad \times \left( \frac{1}{q^2} - \frac{\tilde{\alpha}_0 \cdot \tilde{\alpha}_1 - (\tilde{\alpha}_0 \cdot \hat{\mathbf{q}})(\tilde{\alpha}_1 \cdot \hat{\mathbf{q}})}{q^2 - (W/\hbar c)^2} \right) \\ &\quad \times \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)] \psi_{\mathbf{k}, m_S}^{(+)}(\mathbf{r}_0) \psi_a(\mathbf{r}_1), \end{aligned} \tag{2.23}$$

que son los elementos de matriz de transición en la versión relativista completa de la DWBA. Nótese que el estado final del electrón activo,  $\psi_b$ , se representa por un orbital esférico:  $\psi_{\epsilon_b, \kappa_b, m_b}$  en el caso de ionización ( $\epsilon_b > 0$ ) y  $\psi_{n_b, \kappa_b, m_b}$  en el caso de excitaciones hacia estados ligados discretos ( $\epsilon_b < 0$ ).

### 2.2.2. La aproximación de Born con ondas planas

Los elementos de matriz de transición en la PWBA se obtienen, como ya hemos dicho, reemplazando las ondas planas distorsionadas  $\psi_{\mathbf{k},m_S}^{(\pm)}(\mathbf{r})$  en la expresión (2.23), por ondas planas de energía positiva [ecs. (B.4) y (B.5a)],

$$\phi_{\mathbf{k},m_S,+1}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} U_{\mathbf{k},m_S,+1} \quad (2.24)$$

con

$$U_{\mathbf{k},m_S,+1} \equiv \left[ \frac{E + 2Mc^2}{2E + 2Mc^2} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} I_2 \\ \frac{c\hbar(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k})}{E + 2Mc^2} \end{pmatrix} \chi_{m_S}. \quad (2.25)$$

En principio, el uso de ondas planas para describir los estados del proyectil está justificado sólo cuando las energías de éste, antes y después de la colisión,  $E$  y  $E' = E - W$ , son suficientemente grandes como para que la distorsión causada por el potencial atómico sobre las funciones de onda del proyectil sea despreciable. En la práctica, la PWBA es aplicable bajo condiciones mucho menos restrictivas, dando resultados realistas siempre que la velocidad  $v$  del proyectil sea mayor que unas pocas veces la velocidad promedio del electrón activo en su estado inicial (ver, por ejemplo, Mott y Massey, 1965; Inokuti, 1971). En el caso de ionización de capas internas de átomos por impacto de electrones o positrones, los cálculos de Bote y Salvat (2008) muestran que la DWBA y la PWBA difieren en menos de un 1 % cuando la energía cinética del proyectil supera las 30 veces la energía de ionización del electrón activo.

Introduciendo las ondas planas (2.24), el elemento de matriz de  $T$  toma la forma

$$\begin{aligned} T_{fi}^{\text{PW}} &= - \frac{Z_0 e^2}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{r}_0 \int d\mathbf{r} \phi_{\mathbf{k}',m'_S,+1}^\dagger(\mathbf{r}_0) \psi_b^\dagger(\mathbf{r}) \\ &\times \left( \frac{1}{q^2} - \frac{\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}} - (\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \hat{\mathbf{q}})(\tilde{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \hat{\mathbf{q}})}{q^2 - (W/\hbar c)^2} \right) \\ &\times \exp[i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)] \phi_{\mathbf{k},m_S,+1}(\mathbf{r}_0) \psi_{n_a\kappa_a m_a}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.26)$$

La principal ventaja de la PWBA reside en que las integrales sobre el espacio de coordenadas  $\mathbf{r}_0$  pueden realizarse manera analítica. Esta integral da lugar a la delta de Dirac  $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{k}')$ . Entonces,  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  pasa a ser la transferencia de momento en unidades de  $\hbar$ .

Nuestra formulación de la PWBA es estrictamente equivalente a la de Bethe (1932, 1933). Esta afirmación puede probarse de manera sencilla haciendo uso de la ecuación de Dirac para las ondas planas [ec. (B.3) con  $V = 0$ ], que implica

$$\left[ c\tilde{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\mathbf{p} + (\tilde{\beta}_0 - 1)m_e c^2 \right] U_{\mathbf{k},m_S,+1} = E U_{\mathbf{k},m_S,+1}, \quad (2.27)$$

y, por lo tanto,

$$\begin{aligned} (c\hbar\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \mathbf{q}) U_{\mathbf{k},m_S,+1} &= \left[ \left( c\hbar\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \mathbf{k} + (\tilde{\beta} - 1)m_e c^2 \right) - \left( c\hbar\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \mathbf{k}' - (\tilde{\beta} - 1)m_e c^2 \right) \right] U_{\mathbf{k},m_S,+1} \\ &= (E - E') U_{\mathbf{k},m_S,+1} = W U_{\mathbf{k},m_S,+1}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Así,

$$\left[ \frac{1}{q^2} - \frac{\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_1 - (\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \hat{\mathbf{q}})(\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_1 \cdot \hat{\mathbf{q}})}{q^2 - (W/\hbar c)^2} \right] U_{\mathbf{k},m_S,+1} = \frac{1 - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_1}{q^2 - (W/\hbar c)^2} U_{\mathbf{k},m_S,+1}, \quad (2.29)$$

con lo que el elemento de matriz de transición se puede expresar como

$$\begin{aligned} T_{fi}^{\text{PW}} &= -\frac{Z_0 e^2}{2\pi^2} \frac{1}{q^2 - (W/\hbar c)^2} \int d\mathbf{r} \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b}^\dagger(\mathbf{r}) \\ &\quad \times (A_0 + \mathbf{A} \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \psi_{n_a \kappa_a m_a}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.30)$$

donde

$$A_0 = U_{\mathbf{k}',m_{S'},+1}^\dagger U_{\mathbf{k},m_S,+1}, \quad (2.31a)$$

y

$$\mathbf{A} = -U_{\mathbf{k}',m_{S'},+1}^\dagger \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 U_{\mathbf{k},m_S,+1}. \quad (2.31b)$$

La expresión (2.30) es idéntica a la utilizada por Bethe [ec. (5) de Bethe, 1932; y ec. (50.1) de Bethe, 1933].

En nuestro caso, resulta más conveniente escribir los elementos de matriz (2.26) en la forma

$$\begin{aligned} T_{fi}^{\text{PW}} &= -\frac{Z_0 e^2}{2\pi^2} \left\{ U_{\mathbf{k}',m_{S'},+1}^\dagger U_{\mathbf{k},m_S,+1} \frac{1}{q^2} \langle \psi_b | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_{n_a \kappa_a m_a} \rangle \right. \\ &\quad \left. - U_{\mathbf{k}',m_{S'},+1}^\dagger \left( \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 - \frac{W}{c\hbar q^2} \mathbf{q} \right) U_{\mathbf{k},m_S,+1} \cdot \frac{\langle \psi_b | \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_{n_a \kappa_a m_a} \rangle}{q^2 - (W/c\hbar)^2} \right\} \quad (2.32) \end{aligned}$$

## 2.3. Secciones eficaces

La sección eficaz diferencial (SED) para la excitación de un electrón activo desde el orbital  $\psi_a$  hasta un orbital ligado desocupado  $\psi_b$  viene dada por la expresión (ver, por ejemplo, Bethe, 1932; Fano, 1963; Joachain, 1983)

$$d\sigma^{\text{exc}} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} |T_{fi}|^2 \delta(E - E' - \epsilon_b + \epsilon_a) d\mathbf{k}', \quad (2.33)$$

donde  $T_{fi}$  son los elementos de matriz de transición (2.20). De acuerdo con el convenio de normalización (2.21) para las funciones de onda, la ec. (2.33) se deduce directamente de la regla de oro de Fermi. Utilizando la relación

$$(c\hbar k')^2 = E'(E' + 2m_e c^2),$$

tenemos

$$d\mathbf{k}' = k'^2 dk' d\hat{\mathbf{k}}' = k'^2 \frac{dk'}{dE'} dE' d\hat{\mathbf{k}}' = k' \frac{E' + Mc^2}{c^2 \hbar^2} dE' d\hat{\mathbf{k}}', \quad (2.34)$$

y, por lo tanto,

$$d\sigma^{\text{exc}} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} k' \frac{E' + Mc^2}{c^2 \hbar^2} |T_{fi}|^2 \delta(W - \epsilon_b + \epsilon_a) dE' d\hat{\mathbf{k}}'. \quad (2.35)$$

En esta expresión mantendremos la función delta, que expresa la conservación de la energía, a pesar de que puede ser integrada de manera sencilla, para poder considerar la SED de excitación como una función de la deflexión angular  $\hat{\mathbf{k}}'$  y la pérdida de energía  $W \equiv E - E' = \epsilon_b - \epsilon_a$  del proyectil. Es decir, tenemos que

$$\frac{d^2\sigma^{\text{exc}}}{dW d\hat{\mathbf{k}}'} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} k' \frac{E - W + Mc^2}{c^2 \hbar^2} \delta(W - \epsilon_b + \epsilon_a) |T_{fi}|^2, \quad (2.36)$$

donde los elementos de matriz  $T_{fi}$  están en la capa de energía (“on the energy shell”), es decir, los estados inicial y final (del proyectil y del electrón activo) tienen la misma energía,  $E + \epsilon_a = E' + \epsilon_b$ .

La SED para ionización (es decir, para transiciones donde  $\psi_b$  es un orbital libre) viene dada por

$$d\sigma^{\text{ion}} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} |T_{fi}|^2 \delta(E - E' - \epsilon_b + \epsilon_a) d\mathbf{k}' d\mathbf{k}_b, \quad (2.37)$$

donde  $\hbar\mathbf{k}_b$  es el momento lineal del electrón emitido. Utilizando la relación (2.34) y su análoga para  $\mathbf{k}_b$ ,

$$d\mathbf{k}_b = k_b \frac{\epsilon_b + m_e c^2}{c^2 \hbar^2} d\epsilon_b d\hat{\mathbf{k}}_b, \quad (2.38)$$

e integrando respecto  $E'$ , obtenemos

$$d\sigma^{\text{ion}} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} k' k_b \frac{E - W + Mc^2}{c^2 \hbar^2} \frac{\epsilon_b + m_e c^2}{c^2 \hbar^2} |T_{fi}|^2 d\hat{\mathbf{k}}' d\epsilon_b d\hat{\mathbf{k}}_b. \quad (2.39)$$

Por lo tanto,

$$\frac{d^2\sigma^{\text{ion}}}{dW d\hat{\mathbf{k}}' d\hat{\mathbf{k}}_b} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} k' k_b \frac{E - W + Mc^2}{c^2 \hbar^2} \frac{\epsilon_b + m_e c^2}{c^2 \hbar^2} |T_{fi}|^2, \quad (2.40)$$

donde hemos utilizado que  $\epsilon_b = \epsilon_a + W$ . Frecuentemente, por ejemplo en los cálculos de poderes de frenado para gases, sólo necesitamos describir los efectos de la interacción sobre el proyectil. En tal caso, la sección eficaz doblemente diferencial (SEDD) que

interesa se obtiene después de integrar la ec. (2.40) respecto la dirección  $\hat{\mathbf{k}}_b$  del electrón emitido,

$$\frac{d^2\sigma^{\text{ion}}}{dW d\hat{\mathbf{k}}'} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} k' k_b \frac{E - W + Mc^2}{c^2 \hbar^2} \frac{\epsilon_b + m_e c^2}{c^2 \hbar^2} \int |T_{fi}|^2 d\hat{\mathbf{k}}_b. \quad (2.41)$$

Nótese que las ecs. (2.36) y (2.41) sólo son válidas cuando se adopta el criterio de normalización (2.21).

En la deducción de las SEDDs dadas por las ecs. (2.36) y (2.41), hemos tomado transiciones desde un estado inicial dado  $i = \{\psi_{\mathbf{k}, m_S}^{(+)}(0), \psi_{n_a \kappa_a m_a}(1)\}$  hacia un estado final bien definido  $f = \{\psi_{\mathbf{k}', m'_S}^{(-)}(0), \psi_b(1)\}$ . En todo lo que sigue, supondremos que los átomos del blanco están orientados al azar, que el haz incidente es no polarizado, y que los estados finales magnéticos y de spin no se observan. En estas circunstancias, la SEDD se obtiene promediando sobre los estados iniciales degenerados magnéticos y de spin, y sumando sobre todos los estados finales degenerados. Así pues, en el caso de excitación hacia estados ligados la SEDD viene dada por

$$\frac{d^2\sigma^{\text{exc}}}{dW d\hat{\mathbf{k}}'} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} k' \frac{E - W + Mc^2}{c^2 \hbar^2} \mathcal{I}_{fi}, \quad (2.42)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{fi} &\equiv \delta(W - \epsilon_b + \epsilon_a) \frac{1}{2(2j_a + 1)} \sum_{m_a, m_S} \sum_{m_b, m'_S} |T_{fi}|^2 \\ &= \frac{\delta(W - \epsilon_b + \epsilon_a)}{2(2j_a + 1)} \sum_{m_a, m_S} \sum_{m_b, m'_S} \left| \left\langle \psi_{\mathbf{k}', m'_S}^{(-)} \psi_{n_b \kappa_b m_b} \left| \mathcal{H}_{\text{int}} \right| \psi_{\mathbf{k}, m_S}^{(+)} \psi_{n_a \kappa_a m_a} \right\rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (2.43)$$

La SEDD para la ionización se puede expresar también en la forma (2.42),

$$\frac{d^2\sigma^{\text{ion}}}{dW d\hat{\mathbf{k}}'} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} k' \frac{E - W + Mc^2}{c^2 \hbar^2} \mathcal{J}_{fi}, \quad (2.44)$$

con

$$\mathcal{J}_{fi} \equiv k_b \frac{\epsilon_b + m_e c^2}{c^2 \hbar^2} \frac{1}{2(2j_a + 1)} \sum_{m_a, m_S} \sum_{m_{Sb}, m'_S} \int d\hat{\mathbf{k}}_b |T_{fi}|^2 \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} &= k_b \frac{\epsilon_b + m_e c^2}{c^2 \hbar^2} \frac{1}{2(2j_a + 1)} \sum_{m_a, m_S} \sum_{m_{Sb}, m'_S} \\ &\quad \times \int d\hat{\mathbf{k}}_b \left| \left\langle \psi_{\mathbf{k}', m'_S}^{(-)} \psi_{\mathbf{k}_b, m_{Sb}}^{(-)} \left| \mathcal{H}_{\text{int}} \right| \psi_{\mathbf{k}, m_S}^{(+)} \psi_{n_a \kappa_a m_a} \right\rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Nótese que el orbital final del electrón activo está descrito por una onda plana distorsionada.

Introduciendo la energía de retroceso  $Q$ , definida como [viende de la ec. (A.5)],

$$Q(Q + 2m_e c^2) = c^2 \hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 = c^2 \hbar^2 (k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta) \quad (2.47)$$

y considerando que

$$d\hat{\mathbf{k}}' = 2\pi d(\cos \theta) = \frac{2\pi(Q + m_e c^2)}{c^2 \hbar^2 k k'} dQ, \quad (2.48)$$

las SEDDs para la excitación y la ionización toman las formas

$$\frac{d^2 \sigma^{\text{exc}}}{dW dQ} = \frac{(2\pi)^5}{c^2 \hbar^4 v^2} \frac{E - W + M c^2}{E + M c^2} (Q + m_e c^2) \mathcal{I}_{fi} \quad (2.49)$$

y

$$\frac{d^2 \sigma^{\text{ion}}}{dW dQ} = \frac{(2\pi)^5}{c^2 \hbar^4 v^2} \frac{E - W + M c^2}{E + M c^2} (Q + m_e c^2) \mathcal{J}_{fi}, \quad (2.50)$$

respectivamente.

Con la ayuda del desarrollo (B.20) de las ondas planas distorsionadas

$$\psi_{\mathbf{k}_b m_{Sb}}^{(-)} = \frac{1}{k_b} \sqrt{\frac{\epsilon_b + 2m_e c^2}{\pi(\epsilon_b + m_e c^2)}} \sum_{\kappa_b, m_b} i^{\ell_b} \exp(-i\delta_{\kappa_b}) \left\{ \Omega_{\kappa_b m_b}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}_b) \chi_{m_{Sb}} \right\} \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b}, \quad (2.51)$$

podemos escribir  $\mathcal{J}_{fi}$  como

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{fi} &= k_b \frac{\epsilon_b + m_e c^2}{c^2 \hbar^2} \frac{1}{2(2j_a + 1)} \sum_{m_a, m_S} \sum_{m_{Sb}, m'_S} \int d\hat{\mathbf{k}}_b \frac{\epsilon_b + 2m_e c^2}{k_b^2 \pi(\epsilon_b + m_e c^2)} \\ &\times \sum_{\kappa_b, m_b} \sum_{\kappa'_b, m'_b} i^{\ell'_b - \ell_b} \exp[i(\delta_{\kappa_b} - \delta_{\kappa'_b})] \left\{ \Omega_{\kappa'_b m'_b}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}_b) \chi_{m_{Sb}} \right\} \left\{ \chi_{m_{Sb}}^\dagger \Omega_{\kappa_b m_b}(\hat{\mathbf{k}}_b) \right\} \\ &\times \left\langle \psi_{\mathbf{k}', m'_S}^{(-)} \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b} \left| \mathcal{H}_{\text{int}} \right| \psi_{\mathbf{k}, m_S}^{(+)} \psi_{n_a \kappa_a m_a} \right\rangle \left\langle \psi_{\mathbf{k}, m_S}^{(+)} \psi_{n_a \kappa_a m_a} \left| \mathcal{H}_{\text{int}} \right| \psi_{\mathbf{k}', m'_S}^{(-)} \psi_{\epsilon_b \kappa'_b m'_b} \right\rangle. \end{aligned}$$

Utilizando la relación de clausura de los spinores esféricos, ec. (B.10),

$$\sum_{m_{Sb}} \int d\hat{\mathbf{k}}_b \Omega_{\kappa_b m_b}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}_b) \chi_{m_{Sb}} \chi_{m_{Sb}}^\dagger \Omega_{\kappa'_b m'_b}(\hat{\mathbf{k}}_b) = \delta_{\kappa'_b, \kappa_b} \delta_{m'_b, m_b}, \quad (2.52)$$

obtenemos

$$\mathcal{J}_{fi} = \frac{k_b}{\epsilon_b \pi} \frac{1}{2(2j_a + 1)} \sum_{m_a, m_S} \sum_{m'_S} \sum_{\kappa_b, m_b} \left| \left\langle \psi_{\mathbf{k}', m'_S}^{(-)} \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b} \left| \mathcal{H}_{\text{int}} \right| \psi_{\mathbf{k}, m_S}^{(+)} \psi_{n_a \kappa_a m_a} \right\rangle \right|^2. \quad (2.53)$$

Vemos que, exceptuando un factor trivial y un sumatorio adicional,  $\mathcal{J}_{fi}$  tiene la misma estructura que  $\mathcal{I}_{fi}$ , ec. (2.43). O, lo que es lo mismo, cuando la dirección final del electrón emitido no se observa, podemos describir su estado final de manera indistinta bien con una onda plana distorsionada, bien con una onda esférica. Obviamente, el cálculo numérico utilizando ondas esféricas es mucho más sencillo.

## 2.4. Secciones eficaces en la PWBA

En la PWBA, los elementos de matriz de transición están dados por la expresión (2.32). El cálculo de los cuadrados  $|T_{fi}^{\text{PW}}|^2$  se simplifica mucho observando que los operadores en los términos longitudinal y transversal tienen paridad diferente bajo reflexiones respecto a cualquier plano que contenga el vector  $\mathbf{q}$ . Como las ondas esféricas tienen paridad definida bajo reflexiones, se sigue que, para una transición dada, los términos longitudinal y transversal no pueden ser diferentes de cero simultáneamente. Es decir, las interacciones longitudinal y transversal excitan el electrón desde un orbital ligado inicial hasta orbitales finales con paridades diferentes (aunque, quizás, con las mismas energías). Por lo tanto,

$$|T_{fi}^{\text{PW}}|^2 = \frac{Z_0^2 e^4}{4\pi^4} \frac{1}{q^4} \left| U_{\mathbf{k}', m'_S, +1}^\dagger U_{\mathbf{k}, m_S, +1} \right|^2 \left| \langle \psi_b | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_{n_a \kappa_a m_a} \rangle \right|^2 + \frac{Z_0^2 e^4}{4\pi^4} \frac{1}{[q^2 - (W/c\hbar)^2]^2} \left| U_{\mathbf{k}', m'_S, +1}^\dagger \left( \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_0 - \frac{W}{c\hbar q^2} \mathbf{q} \right) \cdot \mathbf{D} U_{\mathbf{k}, m_S, +1} \right|^2, \quad (2.54)$$

con

$$\mathbf{D} \equiv \langle \psi_b | \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_{n_a \kappa_a m_a} \rangle. \quad (2.55)$$

La separación en dos términos independientes entre sí, uno longitudinal y uno transversal, sólo se da cuando el electrón activo se mueve en un potencial esférico. En cambio, cuando se rompe la simetría esférica, aparece un término de interferencia entre las partes longitudinal y transversal (Schattschneider et al., 2005).

Introduciendo la ec. (2.54) en (2.43) y en (2.53), obtenemos respectivamente

$$\mathcal{I}_{fi}^{\text{PW}} = \delta(W - \epsilon_b + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \mathcal{I}_{fi}^{\text{ef}} \quad (2.56)$$

y

$$\mathcal{J}_{fi}^{\text{PW}} = \frac{\epsilon_b + 2m_e c^2}{c^2 \hbar^2 k_b \pi} \sum_{\kappa_b} \mathcal{I}_{fi}^{\text{ef}} = \frac{k_b}{\epsilon_b \pi} \sum_{\kappa_b} \mathcal{I}_{fi}^{\text{ef}} \quad (2.57)$$

donde

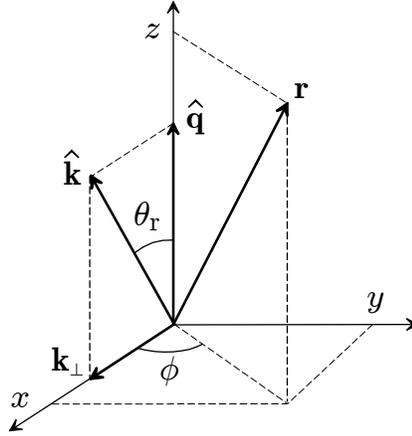
$$\mathcal{I}_{fi}^{\text{ef}} \equiv \sum_{m_b} \sum_{m_a} \frac{1}{2} \sum_{m'_S, m_S} |T_{fi}^{\text{PW}}|^2. \quad (2.58)$$

Para evaluar estos elementos de matriz, es conveniente seleccionar un sistema de referencia con el eje  $z$  en la dirección  $\mathbf{q}$  y el eje  $x$  paralelo a  $\mathbf{k}$  (ver la Figura 3.1). Utilizando proyectores para expresar las sumas de spin como trazas de productos de matrices de

Dirac, hemos obtenido que

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_{fi}^{\text{ef}} &= \frac{Z_0^2 e^4}{4\pi^4} \frac{1}{q^4} \frac{(2E - W + 2Mc^2)^2 - (c\hbar q)^2}{4(E + Mc^2)(E - W + Mc^2)} \sum_{m_b} \sum_{m_a} \left| \langle \psi_b | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_{n_a \kappa_a m_a} \rangle \right|^2 \\
&+ \frac{Z_0^2 e^4}{4\pi^4} \frac{1}{[q^2 - (W/c\hbar)^2]^2} \frac{E + Mc^2}{E - W + Mc^2} \\
&\times \left( \beta^2 \sin^2 \theta_r + \frac{(c\hbar q)^2 - W^2}{2(E + Mc^2)^2} \right) \sum_{m_b} \sum_{m_a} |D_x|^2. \tag{2.59}
\end{aligned}$$

Para una deducción detallada de este resultado, véase el report de Bote y Salvat (2010).



**Figura 2.3:** Sistema de referencia empleado para la evaluación de los elementos de matriz de transición en la PWBA.

La SEDD para la excitación y la ionización de una capa cerrada se obtiene introduciendo los elementos de matriz (2.59) en las ecs. (2.49) y (2.50). En el caso de capas abiertas, con  $q_a < 2j_a + 1$  electrones, la SEDD se obtiene multiplicando la SEDD de la capa cerrada por la ocupación fraccional,  $q_a/(2j_a + 1)$ . Escribimos a continuación, a modo de recopilación, las ecuaciones para las SEDD de excitación e ionización que hemos obtenido (véase Bote y Salvat, 2010).

#### • Excitación.

La SEDD para excitación de los electrones de la capa cerrada  $n_a \kappa_a$  hacia estados ligados  $n_b \kappa_b$  viene dada por [ver la ec. (2.49)]

$$\frac{d^2 \sigma_a^{\text{exc}}}{dW dQ} = \frac{(2\pi)^5}{c^2 \hbar^4 v^2} \frac{E - W + Mc^2}{E + Mc^2} (Q + m_e c^2) \mathcal{I}_{fi}^{\text{PW}}, \tag{2.60}$$

con

$$\mathcal{I}_{fi}^{\text{PW}} = \delta(W - \epsilon_b + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \mathcal{T}_{fi}^{\text{ef,exc}}. \tag{2.61}$$

donde  $\mathcal{T}_{fi}^{\text{ef,exc}}$  es el cuadrado del elemento de matriz promediado, ec. (2.59), con el orbital final del electrón activo  $\psi_b$  reemplazado por un orbital esférico ligado,  $\psi_{n_b\kappa_b m_b}$ .

• **Ionización.**

La SEDD para ionización de la capa  $n_a\kappa_a$  está dada por la ec. (2.50),

$$\frac{d^2\sigma_a^{\text{ion}}}{dW dQ} = \frac{(2\pi)^5}{c^2\hbar^4v^2} \frac{E - W + Mc^2}{E + Mc^2} (Q + m_e c^2) \mathcal{J}_{fi}^{\text{PW}}, \quad (2.62)$$

donde

$$\mathcal{J}_{fi}^{\text{PW}} = \frac{k_b}{\epsilon_b\pi} \sum_{\kappa_b} \mathcal{T}_{fi}^{\text{ef,ion}}. \quad (2.63)$$

En este caso  $\mathcal{T}_{fi}^{\text{ef,ion}}$  es el cuadrado del elemento de matriz promediado (2.59), donde ahora  $\psi_b$  es una onda esférica libre,  $\psi_{\epsilon_b\kappa_b m_b}$  ( $\epsilon_b = \epsilon_a + W$ ).

La SEDD para la totalidad de excitaciones (excitación a niveles discretos e ionización) es pues

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_a}{dW dQ} &= \frac{(2\pi)^5}{c^2\hbar^4v^2} \frac{E - W + Mc^2}{E + Mc^2} (Q + m_e c^2) \\ &\times \left( \delta(W - \epsilon_{n_b\kappa_b} + \epsilon_{n_a\kappa_a}) \mathcal{T}_{fi}^{\text{ef,exc}} + \frac{k_b}{\epsilon_b\pi} \sum_{\kappa_b} \mathcal{T}_{fi}^{\text{ef,ion}} \right). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Después de algunas manipulaciones algebraicas simples, la ecuación anterior se puede escribir como

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_a}{dW dQ} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ \frac{2m_e c^2}{WQ(Q + 2m_e c^2)} \right. \\ &\times \left\{ \frac{(2E - W + 2Mc^2)^2 - Q(Q + 2m_e c^2)}{4(E + Mc^2)^2} \right\} \frac{df_a(Q, W)}{dW} \\ &+ \frac{2m_e c^2 W}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} \\ &\times \left. \left( \beta^2 \sin^2 \theta_r + \left\{ \frac{Q(Q + 2m_e c^2) - W^2}{2(E + Mc^2)^2} \right\} \right) \frac{dg_a(Q, W)}{dW} \right], \end{aligned} \quad (2.65)$$

con [ver la ec. (A.8) del Apéndice A]

$$\beta^2 \sin^2 \theta_r = \beta^2 - \frac{W^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \left( 1 + \frac{Q(Q + 2m_e c^2) - W^2}{2W(E + Mc^2)} \right)^2. \quad (2.66)$$

En la ec. (2.65) hemos introducido la intensidad de oscilador generalizada (“generalized oscillator strength”, GOS) longitudinal, definida por

$$\begin{aligned} \frac{df_a(Q, W)}{dW} &\equiv \frac{W2(Q + m_e c^2)}{Q(Q + 2m_e c^2)} \frac{k_b}{\epsilon_b \pi} \\ &\quad \times \sum_{\kappa_b, m_b} \sum_{m_a} \left| \left\langle \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b} \left| \exp(\mathbf{i}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right| \psi_{n_a \kappa_a m_a} \right\rangle \right|^2 \\ &\quad + \frac{W2(Q + m_e c^2)}{Q(Q + 2m_e c^2)} \sum_{n_b, \kappa_b} \delta(W - \epsilon_{n_b \kappa_b} + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \\ &\quad \times \sum_{m_a, m_b} \left| \left\langle \psi_{n_b \kappa_b m_b} \left| \exp(\mathbf{i}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right| \psi_{n_a \kappa_a m_a} \right\rangle \right|^2, \end{aligned} \quad (2.67)$$

y la intensidad de oscilador generalizada transversal (“transverse generalized oscillator strength”, TGOS), definida como

$$\begin{aligned} \frac{dg_a(Q, W)}{dW} &\equiv \frac{2(Q + m_e c^2)}{W} \frac{k_b}{\epsilon_b \pi} \\ &\quad \times \sum_{m_a} \sum_{\kappa_b, m_b} \left| \left\langle \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b} \left| \tilde{\alpha}_x \exp(\mathbf{i}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right| \psi_{n_a \kappa_a m_a} \right\rangle \right|^2 \\ &\quad + \frac{2(Q + m_e c^2)}{W} \sum_{n_b, \kappa_b} \delta(W - \epsilon_{n_b \kappa_b} + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \\ &\quad \times \sum_{m_a, m_b} \left| \left\langle \psi_{n_b \kappa_b m_b} \left| \tilde{\alpha}_x \exp(\mathbf{i}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right| \psi_{n_a \kappa_a m_a} \right\rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Debido a la simetría esférica de las capas cerradas, tanto la GOS como la TGOS dependen únicamente de la pérdida de energía  $W$  y de la energía de retroceso  $Q$  (es decir, dependen del módulo del vector  $\mathbf{q}$ , pero no de su dirección).

Los factores numéricos y cinemáticos que aparecen en las ecs. (2.67) y (2.68) son tales que, en el límite  $Q \rightarrow 0$ , tanto la GOS como la TGOS se reducen a la intensidad de oscilador óptica (“optical oscillator strength”, OOS),

$$\frac{df_a(W)}{dW} \equiv \lim_{Q \rightarrow 0} \frac{df_a(Q, W)}{dW} = \lim_{Q \rightarrow 0} \frac{dg_a(Q, W)}{dW}. \quad (2.69)$$

Si desarrollamos la exponencial

$$\exp(\mathbf{i}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$$

como una serie de potencias en  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}$ , recordando que el orbital inicial y el final son

ortogonales, y nos quedamos sólo con el primer término no nulo, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{df_a(W)}{dW} &= \frac{W 2m_e}{\hbar^2} \frac{k_b}{\epsilon_b \pi} \sum_{\kappa_b, m_b} \sum_{m_a} \left| \hat{\mathbf{q}} \cdot \langle \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b} \left| \mathbf{r} \right| \psi_{n_a \kappa_a m_a} \rangle \right|^2 \\ &+ \frac{W 2m_e}{\hbar^2} \sum_{n_b, \kappa_b} \delta(W - \epsilon_{n_b \kappa_b} + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \sum_{m_a, m_b} \left| \hat{\mathbf{q}} \cdot \langle \psi_{n_b \kappa_b m_b} \left| \mathbf{r} \right| \psi_{n_a \kappa_a m_a} \rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Podemos comprobar que, efectivamente, en el límite  $Q = 0$  la GOS y la TGOS son iguales, utilizando la ortogonalidad de las ondas esféricas y la relación  $\tilde{\boldsymbol{\alpha}} = i(c\hbar)^{-1} [\mathcal{H}_D, \mathbf{r}]$ , donde  $\mathcal{H}_D$  es el hamiltoniano de Dirac (B.1).

La representación de la GOS y la TGOS como funciones de  $W$  y  $Q$  se conoce como la superficie de Bethe. Como acabamos de mostrar, en el límite  $Q \rightarrow 0$  el perfil de estas superficies coincide con la OOS. En el extremo opuesto, para energías de retroceso  $Q$  mucho más grandes que la energía de ionización  $E_a = -\epsilon_{n_a \kappa_a}$ , tanto la GOS como la TGOS difieren de cero sólo en los alrededores de la recta  $Q = W$ , donde presentan un máximo que se conoce como “Bethe ridge”. Las transiciones en esta región representan colisiones próximas con los electrones blanco, que reaccionan esencialmente como si estuvieran libres y en reposo. Para un electrón blanco estacionario, la GOS y la TGOS se reducen a (véase el Apéndice C de Bote y Salvat, 2010),

$$\frac{df^{\text{libre}}(Q, W)}{dW} = \delta(Q - W) \quad \text{y} \quad \frac{dg^{\text{libre}}(Q, W)}{dW} = \delta(Q - W), \quad (2.71)$$

respectivamente. De acuerdo con las definiciones (2.67) y (2.68), en el límite de  $Q$ s grandes, tanto la GOS como la TGOS satisfacen de manera aproximada la regla de suma de Bethe,

$$\int_0^\infty \frac{df_a(Q, W)}{dW} dW \simeq 2|\kappa_a|, \quad \int_0^\infty \frac{dg_a(Q, W)}{dW} dW \simeq 2|\kappa_a|, \quad (2.72)$$

donde  $2|\kappa_a|$  es el número de electrones en la capa *cerrada* activa. En la versión no relativista de la PWBA, Bethe (1930) demostró que la GOS longitudinal (en el caso no relativista la interacción transversal se anula) satisface la regla de suma (2.72) para todo  $Q$ . Esta regla de suma se utiliza explícitamente en la deducción de la fórmula de Bethe para el poder de frenado de partículas cargadas de alta energía. Desgraciadamente, las GOSs relativistas no la satisfacen. Dedicaremos una Sección posterior a discutir las desviaciones relativistas de la regla de suma de Bethe y sus consecuencias en la fórmula asintótica de la sección eficaz de frenado.

Nuestra deducción de la SEDD, ec. (2.65), es similar a la presentada por Fano en su artículo de revisión sobre el frenado de partículas cargadas pesadas (Fano, 1963). Sin embargo, Fano considera que la masa del proyectil es mucho mayor que la del electrón activo, o lo que es lo mismo, que la transferencia de momento es mucho menor que el momento del proyectil. Evidentemente, esta suposición no se cumple para electrones y positrones, y tampoco para partículas cargadas pesadas con energías cercanas al umbral

de ionización. Nosotros hemos evitado esta aproximación, por lo que nuestro resultado, ec. (2.65), es más general. La expresión de la SEDD deducida por Fano se obtiene eliminando de (2.65) los términos entre llaves.

### 2.4.1. La GOS y la TGOS de capas cerradas

Las GOSs longitudinal y transversal son proporcionales a las cantidades

$$\mathcal{F}_{ba} \equiv \sum_{m_b, m_a} \left| \left\langle \psi_{\epsilon_b, \kappa_b, m_b} \left| \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right| \psi_{n_a, \kappa_a, m_a} \right\rangle \right|^2 \quad (2.73)$$

y

$$\mathcal{G}_{ba} \equiv \sum_{m_a, m_b} \left| \left\langle \psi_{\epsilon_b, \kappa_b, m_b} \left| \hat{\mathbf{x}} \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right| \psi_{n_a, \kappa_a, m_a} \right\rangle \right|^2, \quad (2.74)$$

respectivamente, donde  $\hat{\mathbf{x}}$  es un vector unitario perpendicular a  $\mathbf{q}$ . Los orbitales inicial y final del electrón activo se representan mediante ondas esféricas (B.8) de la forma

$$\psi_{\epsilon, \kappa, m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) \Omega_{\kappa m}(\hat{\mathbf{r}}) \\ iQ_{n\kappa}(r) \Omega_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}. \quad (2.75)$$

Los orbitales  $\psi_{\epsilon_a, \kappa_a, m_a}$  son ligados, mientras que los  $\psi_{\epsilon_b, \kappa_b, m_b}$  son ligados en el caso de excitación y libres en el de ionización. A continuación elaboraremos estas expresiones para reducirlas a una forma apta para su evaluación numérica.

#### • Interacción longitudinal

Para evaluar el elemento de matriz

$$\mathcal{A}_{ba} \equiv \left\langle \psi_{\epsilon_b, \kappa_b, m_b} \left| \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right| \psi_{\epsilon_a, \kappa_a, m_a} \right\rangle, \quad (2.76)$$

introducimos el desarrollo de Rayleigh de la onda plana (Abramowitz y Stegun, 1974),

$$\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} i^{\lambda} (2\lambda + 1) j_{\lambda}(qr) C_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{r}}) C_{\lambda\mu}^*(\hat{\mathbf{q}}), \quad (2.77)$$

donde  $j_{\lambda}(qr)$  son funciones esféricas de Bessel y  $C_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{r}}) \equiv [4\pi/(2\lambda + 1)]^{1/2} Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{r}})$  son las funciones de Racah. Haciendo uso de las expresiones cerradas para los elementos de matriz de los tensores de Racah, así como de sus relaciones de simetría, que se dan en el Apéndice C de Bote y Salvat (2010), obtenemos que

$$\mathcal{F}_{ba} = \sum_{\lambda} (2\lambda + 1) \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(\lambda)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [R_{\epsilon_b, \kappa_b; \epsilon_a, \kappa_a}^{\lambda}(q)]^2. \quad (2.78)$$

Las cantidades  $\langle \ell_1 \frac{1}{2} j_1 || \mathbf{C}^{(L)} || \ell_2 \frac{1}{2} j_2 \rangle$  son los elementos de matriz reducidos de los tensores de Racah. Utilizando métodos relativamente elaborados de álgebra de momento angular, se puede demostrar que estos se pueden escribir como (ver, por ejemplo, Grant, 1961)

$$\langle \ell_1 \frac{1}{2} j_1 || \mathbf{C}^{(L)} || \ell_2 \frac{1}{2} j_2 \rangle = v(L, \ell_1, \ell_2) \sqrt{2j_2 + 1} \langle L j_2 0 \frac{1}{2} | j_1 \frac{1}{2} \rangle, \quad (2.79)$$

donde el factor

$$v(L, \ell_1, \ell_2) \equiv \left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ si } L + \ell_1 + \ell_2 \text{ es par} \\ 0 \text{ en cualquier otro caso,} \end{array} \right\} \equiv \frac{1}{2} [1 + (-1)^{L+\ell_1+\ell_2}] , \quad (2.80)$$

da cuenta de la regla de selección asociada a la paridad. El coeficiente Clebsch-Gordan en la expresión (2.79) se puede calcular analíticamente (ver, por ejemplo, Condon y Oda-başı, 1980). El resultado (2.78) demuestra que la GOS es independiente de la dirección del vector  $\mathbf{q}$ , como hemos indicado más arriba. Las integrales radiales,

$$R_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^\lambda(q) = \int_0^\infty [P_{\epsilon_b \kappa_b}(r)P_{\epsilon_a \kappa_a}(r) + Q_{\epsilon_b \kappa_b}(r)Q_{\epsilon_a \kappa_a}(r)] j_\lambda(qr) dr, \quad (2.81)$$

son reales e independientes de los números cuánticos magnéticos.

#### • Interacción transversal

Los elementos de matriz de transición de la interacción transversal, ec. (2.74), involucran al operador  $\mathcal{M} \equiv \boldsymbol{\zeta} \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ . Este operador y su hermítico conjugado describen, respectivamente, la emisión y la absorción de un fotón con vector de ondas  $\mathbf{q}$  y vector (unitario) de polarización  $\boldsymbol{\zeta}$ . Así, los elementos de matriz (2.74) no sólo son importantes para el presente cálculo, sino que también son útiles en otros cálculos en electrodinámica cuántica (por ejemplo, efecto fotoeléctrico, emisión de bremsstrahlung por electrones, producción de pares electrón-positrón por fotones y aniquilación del positrón). Los elementos de matriz que nos interesan son

$$\mathcal{M}_{ba} = \boldsymbol{\zeta} \cdot \langle \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b} | \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_{\epsilon_a \kappa_a m_a} \rangle , \quad (2.82)$$

donde, en general, el vector de polarización  $\boldsymbol{\zeta}$  puede ser complejo. Resulta útil introducir el vector [ver ec. (2.55)]

$$\mathbf{D} = \langle \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b} | \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_{\epsilon_a \kappa_a m_a} \rangle , \quad (2.83)$$

y escribir

$$\mathcal{M}_{ba} = \boldsymbol{\zeta} \cdot \mathbf{D}. \quad (2.84)$$

Los cálculos se simplifican si expresamos todos los vectores en la base esférica (ver, por ejemplo, Edmonds, 1960)

$$\boldsymbol{\xi}_{+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\xi}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\xi}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

En esta base, cualquier vector genérico  $\mathbf{D}$  se expresa como

$$\mathbf{D} = \sum_{\nu} (-1)^{\nu} D_{\nu} \boldsymbol{\xi}_{-\nu} = \sum_{\nu} D_{\nu} \boldsymbol{\xi}_{\nu}^*, \quad (2.86)$$

donde las componentes esféricas  $D_\nu$  son

$$D_\nu = \boldsymbol{\xi}_\nu \cdot \mathbf{D}. \quad (2.87)$$

El cálculo de (2.82) se inicia evaluando el vector  $\mathbf{D}$ , ec. (2.83). De nuevo, como en el caso longitudinal, introducimos el desarrollo de Rayleigh de la onda plana, ec. (2.77). Para facilitar los cálculos, escogemos un sistema de referencia con el eje  $z$  paralelo a la dirección  $\hat{\mathbf{q}}$  del fotón. En este sistema de referencia,  $C_{\lambda\mu}^*(\hat{\mathbf{q}}) = \delta_{\mu 0}$ , es decir,

$$\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = \sum_{\lambda} i^\lambda (2\lambda + 1) j_\lambda(qr) C_{\lambda 0}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (2.88)$$

y el vector  $\mathbf{D}$  se puede escribir como

$$\mathbf{D} = \sum_{\lambda} i^\lambda (2\lambda + 1) \left\langle \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b} \left| \tilde{\boldsymbol{\alpha}} j_\lambda(qr) C_{\lambda 0}(\hat{\mathbf{r}}) \right| \psi_{\epsilon_a \kappa_a m_a} \right\rangle. \quad (2.89)$$

Siguiendo un método similar al utilizado por Mann y Johnson en (1971) para resolver un problema relacionado con éste, y después de cierta dosis de álgebra de momento angular (ver Bote y Salvat, 2010), obtenemos las siguientes expresiones para las componentes esféricas del vector  $\mathbf{D}$

$$D_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{J=1}^{\infty} i^J \frac{2J+1}{\sqrt{J(J+1)}} \left\{ d_{\mp 1}^J(\kappa_b, m_b; \kappa_a, m_a) {}^e\mathcal{R}_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^J \right. \\ \left. \pm i d_{\mp 1}^J(\kappa_b, m_b; -\kappa_a, m_a) {}^m\mathcal{R}_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^J \right\} \quad (2.90a)$$

y

$$D_0 = \sum_{J=0}^{\infty} i^J d_0^J(\kappa_b, m_b; \kappa_a, m_a) {}^l\mathcal{R}_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^J, \quad (2.90b)$$

donde

$$d_M^L(\kappa_1 m_1; \kappa_2 m_2) = v(L, \ell_1, \ell_2) \sqrt{\frac{2j_2 + 1}{2j_1 + 1}} \langle j_2 L m_2 M | j_1 m_1 \rangle \langle L j_2 0 \frac{1}{2} | j_1 \frac{1}{2} \rangle \quad (2.91)$$

y hemos introducido las integrales radiales

$${}^l\mathcal{R}_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^J \equiv (\kappa_b - \kappa_a) (F_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J-1} + G_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J-1}) - J (F_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J-1} - G_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J-1}) \\ + (\kappa_b - \kappa_a) (F_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J+1} + G_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J+1}) + (J+1) (F_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J+1} - G_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J+1}) \quad (2.92a)$$

$${}^e\mathcal{R}_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^J \equiv -\frac{J(J+1)}{2J+1} \left[ -\frac{\kappa_b - \kappa_a}{J} (F_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J-1} + G_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J-1}) + (F_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J-1} - G_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J-1}) \right. \\ \left. + \frac{\kappa_b - \kappa_a}{J+1} (F_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J+1} + G_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J+1}) + (F_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J+1} - G_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon_a \kappa_a}^{J+1}) \right], \quad (2.92b)$$

y

$${}^m\mathcal{R}_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon_a\kappa_a}^J \equiv (\kappa_a + \kappa_b) (F_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon_a\kappa_a}^J + G_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon_a\kappa_a}^J), \quad (2.92c)$$

con

$$\begin{aligned} F_{\epsilon_b\kappa_b;n_a\kappa_a}^J &= \int_0^\infty P_{\epsilon_b\kappa_b}(r) Q_{n_a\kappa_a}(r) j_J(qr) dr, \\ G_{\epsilon_b\kappa_b;n_a\kappa_a}^J &= \int_0^\infty Q_{\epsilon_b\kappa_b}(r) P_{n_a\kappa_a}(r) j_J(qr) dr. \end{aligned} \quad (2.93)$$

Los subíndices “l”, “e” y “m” denotan, respectivamente, “longitudinal”, “eléctrica” y “magnética”, porque las mismas integrales aparecen en un tratamiento alternativo basado en el desarrollo multipolar del campo de radiación (ver Scofield, 1978).

Finalmente, los elementos de matriz (2.84) se pueden expresar como

$$\mathcal{M}_{ba} = \boldsymbol{\zeta} \cdot \mathbf{D} = \sum_{\nu} (-1)^{\nu} \zeta_{-\nu} D_{\nu}, \quad (2.94)$$

por lo que, para acabar el cálculo de (2.74), sólo nos queda elevar al cuadrado y promediar sobre los números cuánticos magnéticos,

$$\mathcal{G}_{ba} \equiv \sum_{m_a, m_b} \left| \left\langle \psi_{\epsilon_b\kappa_b m_b} \left| \boldsymbol{\zeta} \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right| \psi_{n_a\kappa_a m_a} \right\rangle \right|^2 = \sum_{m_a, m_b} |\mathcal{M}_{ba}|^2. \quad (2.95)$$

Como en el caso longitudinal, haremos uso de las propiedades de los elementos de matriz de los tensores de Racah para escribir (los detalles pueden encontrarse en Bote y Salvat, 2010),

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{ba} &= |\zeta_0|^2 \sum_{m_a, m_b} D_0 D_0^* + |\zeta_{-1}|^2 \sum_{m_a, m_b} D_{+1} D_{+1}^* + |\zeta_{+1}|^2 \sum_{m_a, m_b} D_{-1} D_{-1}^* \\ &= |\zeta_0|^2 \sum_J \frac{1}{2J+1} [{}^l\mathcal{R}_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon_a\kappa_a}^J]^2 \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 \\ &\quad + [|\zeta_{-1}|^2 + |\zeta_{+1}|^2] \sum_J \frac{2J+1}{2J(J+1)} \left\{ \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^e\mathcal{R}_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon_a\kappa_a}^J]^2 \right. \\ &\quad \left. + \langle \bar{\ell}_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^m\mathcal{R}_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon_a\kappa_a}^J]^2 \right\}, \end{aligned} \quad (2.96)$$

donde  $\bar{\ell}_a$  es el número cuántico de momento angular orbital correspondiente a  $-\kappa_a$ . Finalmente, cuando el campo electromagnético se expresa en el gauge de Colulomb, el vector de polarización del fotón,  $\boldsymbol{\zeta}$ , es perpendicular al vector de ondas  $\mathbf{q}$  y, en consecuencia,  $\zeta_0 = 0$ . Entonces, el primer término de (2.96) desaparece, y

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{ba} &= [|\zeta_{-1}|^2 + |\zeta_{+1}|^2] \sum_J \frac{2J+1}{2J(J+1)} \left\{ \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^e\mathcal{R}_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon_a\kappa_a}^J]^2 \right. \\ &\quad \left. + \langle \bar{\ell}_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^m\mathcal{R}_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon_a\kappa_a}^J]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.97)$$

La definición (2.68) de la TGOS contienen estos elementos de matriz promediados con  $\zeta = \hat{\mathbf{x}}$ , lo que corresponde a  $\zeta_{\pm 1} = \boldsymbol{\xi}_{\pm 1} \cdot \hat{\mathbf{x}} = \mp 1/\sqrt{2}$ .

Con las expresiones para los elementos de matriz promediados que acabamos de presentar, podemos expresar la GOS y la TGOS de una capa cerrada en términos de integrales radiales. Así, haciendo uso del resultado (2.78), la GOS longitudinal, ec. (2.67), toma la forma

$$\begin{aligned} \frac{df_a(Q, W)}{dW} &= \frac{W 2(Q + m_e c^2)}{Q(Q + 2m_e c^2)} \frac{k_b}{\epsilon_b \pi} \\ &\quad \times \sum_{\kappa_b} \sum_{\lambda} (2\lambda + 1) \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(\lambda)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [R_{\epsilon_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^\lambda(q)]^2 \\ &+ \frac{W 2(Q + m_e c^2)}{Q(Q + 2m_e c^2)} \sum_{n_b, \kappa_b} \delta(W - \epsilon_{n_b \kappa_b} + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \\ &\quad \times \sum_{\lambda} (2\lambda + 1) \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(\lambda)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [R_{n_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^\lambda(q)]^2. \end{aligned} \quad (2.98)$$

De manera análoga, con la ayuda de la expresión (2.97), la TGOS, ec. (2.68), se puede escribir como

$$\begin{aligned} \frac{dg_a(Q, W)}{dW} &= \frac{2(Q + m_e c^2)}{W} \frac{k_b}{\epsilon_b \pi} \\ &\quad \times \sum_{\kappa_b} \sum_J \frac{2J + 1}{2J(J + 1)} \left\{ \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^e \mathcal{R}_{\epsilon_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^J(q)]^2 \right. \\ &\quad \left. + \langle \bar{\ell}_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^m \mathcal{R}_{\epsilon_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^J(q)]^2 \right\} \\ &+ \frac{2(Q + m_e c^2)}{W} \sum_{n_b, \kappa_b} \delta(W - \epsilon_{n_b \kappa_b} + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \\ &\quad \times \sum_J \frac{2J + 1}{2J(J + 1)} \left\{ \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^e \mathcal{R}_{n_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^J(q)]^2 \right. \\ &\quad \left. + \langle \bar{\ell}_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^m \mathcal{R}_{n_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^J(q)]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Estas fórmulas son las que se utilizan para el cálculo numérico de la GOS y la TGOS.

Finalmente, podemos aprovechar estas expresiones para calcular la OOS, ec. (2.70), como el límite  $Q \rightarrow 0$  de la GOS. Utilizando el desarrollo de las funciones esféricas de Bessel para argumentos pequeños (ver Abramowitz y Stegun, 1974),

$$j_\ell(x) = \frac{x^\ell}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot (2\ell + 1)} \left[ 1 - \frac{x^2/2}{1!(2\ell + 3)} + \frac{(x^2/2)^2}{2!(2\ell + 3)(2\ell + 5)} - \dots \right], \quad (2.100)$$

tenemos

$$\lim_{q \rightarrow 0} R_{\epsilon_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^\lambda(q) = \frac{q^\lambda}{(2\lambda + 1)!!} \int_0^\infty [P_{\epsilon_b \kappa_b}(r) P_{n_a \kappa_a}(r) + Q_{\epsilon_b \kappa_b}(r) Q_{n_a \kappa_a}(r)] r^\lambda dr. \quad (2.101)$$

Debido a la ortogonalidad de los orbitales inicial y final, estas integrales se anulan para  $\lambda = 0$ . Las contribuciones no nulas de orden más bajo son las dipolares ( $\lambda = 1$ ), que dan

$$\begin{aligned} \frac{df_a(W)}{dW} &\equiv \lim_{Q \rightarrow 0} \frac{df_a(Q, W)}{dW} = \frac{W 2m_e}{3\hbar^2} \frac{k_b}{\epsilon_b \pi} \sum_{\kappa_b} \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(1)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [\mathcal{D}_{\epsilon_b \kappa_b; n_a \kappa_a}]^2, \\ &+ \frac{W 2m_e}{3\hbar^2} \sum_{n_b, \kappa_b} \delta(W - \epsilon_b + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(1)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [\mathcal{D}_{n_b \kappa_b; n_a \kappa_a}]^2, \end{aligned} \quad (2.102)$$

con

$$\mathcal{D}_{\epsilon_b \kappa_b; n_a \kappa_a} = \int_0^\infty [P_{\epsilon_b \kappa_b}(r) P_{n_a \kappa_a}(r) + Q_{\epsilon_b \kappa_b}(r) Q_{n_a \kappa_a}(r)] r dr. \quad (2.103)$$

### 2.4.2. Secciones eficaces integradas

Hasta el momento hemos considerado la SEDD para colisiones con los electrones de una capa cerrada. La SEDD para todas las colisiones inelásticas con el átomo blanco es

$$\frac{d^2\sigma}{dW dQ} = \sum_a \frac{d^2\sigma_a}{dW dQ}, \quad (2.104)$$

donde el sumatorio se extiende sobre las capas ocupadas,  $a \equiv n_a \kappa_a$ , de la configuración del estado fundamental.

Dada una pérdida de energía  $W$ , las energías de retroceso permitidas están restringidas al intervalo  $(Q_-, Q_+)$  con [ec. (A.10)]

$$\begin{aligned} Q_\pm &= \sqrt{(cp \pm cp')^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 \\ &= \sqrt{\left[ \sqrt{E(E + 2Mc^2)} \pm \sqrt{(E - W)(E - W + 2Mc^2)} \right]^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2. \end{aligned} \quad (2.105)$$

Recíprocamente, para una energía de retroceso  $Q < Q_+$ , la máxima pérdida de energía permitida es [ver la ec. (A.16)]

$$W_m(Q) = E + Mc^2 - \sqrt{\left[ \sqrt{E(E + 2Mc^2)} - \sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)} \right]^2 + M^2 c^4}. \quad (2.106)$$

Nótese que la máxima pérdida de energía permitida  $W_m(Q)$  crece con la energía cinética del proyectil, y a muy altas energías, tiende a la energía de la línea de fotones en el vacío [ver Figura A.3],

$$W_0(Q) = \sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}. \quad (2.107)$$

La SED en la pérdida de energía  $W$  se obtiene integrando la SEDD sobre el intervalo de energías de retroceso permitidas, es decir,

$$\frac{d\sigma}{dW} = \int_{Q_-}^{Q_+} \frac{d^2\sigma}{dW dQ} dQ. \quad (2.108)$$

Evidentemente, esta SED sólo está definida para pérdidas de energía menores que  $W_{\max} = E$ . Para pérdidas de energía mucho menores que  $E$ , tenemos [ver ec. (A.14)],

$$Q_- = W^2 / (2m_e c^2 \beta^2), \quad (2.109)$$

que es independiente de la masa del proyectil. Además,  $Q_+$  es mucho mayor que  $W$ , por lo que la GOS es despreciable en el límite superior de la integral. Consecuentemente, la SED en pérdida de energía para  $W$ s mucho menores que  $E$  depende de la masa  $M$  del proyectil sólo a través de los factores que aparecen entre llaves en la ec. (2.65). Sin embargo, esto deja de ser cierto cuando la pérdida de energía es comparable a  $E$ , porque los valores de  $Q_-$  y  $Q_+$  dependen de  $M$ .

A partir de la SED en pérdida de energía, podemos calcular las secciones eficaces integradas como

$$\sigma^{(k)} \equiv \int_0^{W_{\max}} W^k \frac{d\sigma}{dW} dW. \quad (2.110)$$

Nótese que  $\sigma^{(0)}$  es la sección eficaz total inelástica,  $\sigma^{(1)}$  y  $\sigma^{(2)}$  son la sección eficaz de frenado y de dispersión (“straggling”) de energía, respectivamente. Si tenemos en cuenta que la densidad de probabilidad de la pérdida de energía  $W$  en una colisión es

$$p_1(W) = \frac{1}{\sigma_0} \frac{d\sigma}{dW}, \quad (2.111)$$

podemos escribir

$$\sigma^{(k)} = \sigma^{(0)} \int_0^{W_{\max}} W^k p_1(W) dW = \sigma^{(0)} \langle W^k \rangle, \quad (2.112)$$

donde  $\langle W^k \rangle$  es el valor promedio de  $W^k$  en una colisión.

Supongamos, por un momento, que nuestro proyectil se mueve en un gas monoatómico con número atómico  $Z$  con densidad de masa  $\rho_M$ . El número de átomos por unidad de volumen es

$$\mathcal{N} = \frac{N_A \rho_M}{A_w}, \quad (2.113)$$

donde  $N_A = 6,023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  es el número de Avogadro y  $A_w$  es la masa molar (g/mol) del elemento. El recorrido libre medio  $\lambda$  para colisiones inelásticas está dado por

$$\lambda = 1 / (\mathcal{N} \sigma^{(0)}). \quad (2.114)$$

Su inverso,  $\lambda^{-1} = \mathcal{N} \sigma^{(0)}$ , es la probabilidad de interacción por unidad de recorrido del proyectil. El poder de frenado (debido a colisiones)  $S$  y el parámetro de dispersión de energía  $\Omega^2$  se definen por

$$S = \mathcal{N} \sigma^{(1)} = \frac{\langle W \rangle}{\lambda} \quad (2.115)$$

y

$$\Omega^2 = \mathcal{N}\sigma^{(2)} = \frac{\langle W^2 \rangle}{\lambda}, \quad (2.116)$$

respectivamente. Evidentemente, el poder de frenado da la pérdida de energía promedio por unidad de recorrido. El producto  $\Omega^2 ds$  es la varianza de la distribución de energía del haz (inicialmente monoenergético) después de un pequeño recorrido  $ds$  en el gas (ver, por ejemplo, Salvat et al., 2009).



# Capítulo 3

## Cálculo de secciones eficaces en la PWBA

En este Capítulo describimos los algoritmos y herramientas numéricas que hemos desarrollado para el cálculo de secciones eficaces para colisiones inelásticas de partículas cargadas con átomos libres en la PWBA. Estos algoritmos han sido implementados en un conjunto de programas Fortran para realizar la secuencia de cálculos que conduce, primero a la SED en pérdida de energía, y posteriormente a las secciones eficaces integradas. El paquete completo de programas se compone de los códigos GOSAT y PWACS. El programa GOSAT calcula la GOS y la TGOS para excitación e ionización de capas electrónicas cerradas de átomos neutros e iones positivos. El potencial atómico ha sido calculado con el programa DHFXA (Salvat y Fernández-Varea, 2009). La solución de las ecuaciones radiales de Dirac se realiza mediante el paquete de subrutinas RADIAL (Salvat y Fernández-Varea, 2009). El programa Fortran PWACS calcula la SED en pérdida de energía, para partículas cargadas pesadas, así como electrones y positrones, a partir de las tablas numéricas de la GOS y la TGOS, precalculadas con GOSAT. Para asegurar la precisión de los resultados numéricos, hemos diseñado esquemas de interpolación y extrapolación específicos que garantizan la obtención de valores precisos de la GOS y la TGOS para cualquier punto del plano  $(Q, W)$  a partir de las tablas numéricas de las GOSs. El programa PWACS calcula además secciones eficaces totales, secciones eficaces de frenado, y secciones eficaces de dispersión de energía mediante la integración numérica de la SED en pérdida de energía.

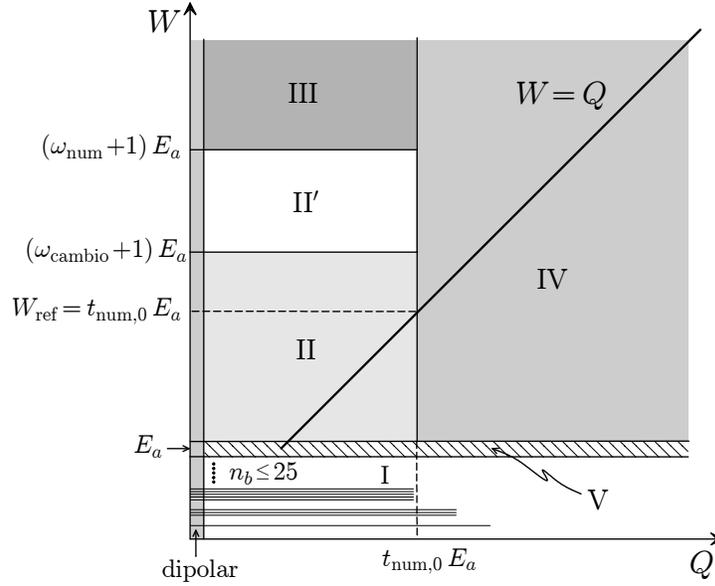
### 3.1. Métodos numéricos

La GOS y la TGOS de capas cerradas se calculan a partir de sus expresiones (2.98) y (2.99). Éstas se han implementado en el programa Fortran GOSAT, que utiliza orbitales de campo central calculados resolviendo numéricamente la ecuación de Dirac para el potencial DHFS auto-consistente. Este programa es la extensión de uno anterior desarrollado por Segui et al. (2003) que calculaba únicamente la GOS para ionización, que

hemos mejorado y ampliado para incluir el cálculo de la TGOS, y de la GOS y TGOS para transiciones hacia niveles discretos. Como en el programa original de Segui et al. las funciones de onda radiales se calculan utilizando el paquete de subrutinas RADIAL (Salvat et al., 1995; Salvat y Fernández-Varea, 2009), que implementa un algoritmo numérico que evita la acumulación de errores de redondeo. Comparando los resultados del programa de Segui et al. con los valores obtenidos a partir de las fórmulas analíticas de GOSs hidrogenoides no-relativistas (ver, por ejemplo, Inokuti, 1971; Heredia-Ávalos et al., 2005), se concluyó que la precisión del programa de Segui et al. ronda las cinco cifras significativas. Un test similar muestra que la precisión de GOSAT es ligeramente superior.

Las subrutinas RADIAL (al igual que cualquier otro algoritmo numérico) tienen dificultades para resolver la ecuación de Dirac para estados muy excitados con energías de ligadura muy pequeñas. Esto se debe a que las ecuaciones radiales (2.13) se deben integrar hasta el punto de retroceso más externo, que está muy lejos del núcleo cuando el número cuántico principal es grande. En principio, las subrutinas de RADIAL son capaces de determinar las funciones radiales de estados ligados con números cuánticos principales  $n_b$  de hasta aproximadamente 35, si la malla radial es suficientemente densa y se extiende suficientemente lejos. En los cálculos actuales, las funciones radiales se evalúan utilizando una malla radial de 10,000 puntos, espaciados de manera no-uniforme (logarítmica cerca del origen, uniforme a distancias grandes). Sin embargo, incluso utilizando una malla tan generosa como ésta, el cálculo de la GOS para transiciones hacia estados discretos finales con número cuántico principal superior a 30, se hace muy difícil, debido en parte, a las rápidas oscilaciones de las funciones de Bessel esféricas para  $Q$ s grandes. Las subrutinas de RADIAL también tienen dificultades para calcular los estados correspondientes a electrones libres de muy baja energía, con  $\epsilon_b \lesssim 10^{-4}$  unidades atómicas, y momentos angulares orbitales moderados, debido a que las ecuaciones radiales se tienen que integrar hasta distancias radiales más allá del punto de retroceso clásico ( $r_{TP} \sim \ell/k$ ) antes de poder ser normalizadas correctamente. Resumiendo, ni la GOS ni la TGOS pueden evaluarse de manera directa para pérdidas de energía  $W$  muy próximas (bien por encima, bien por debajo) a la energía de ionización.

El programa GOSAT calcula la OOS y las GOSs para cada capa atómica individual. El cálculo numérico de cada una de estas funciones se restringe a una malla discreta de valores de  $W$  y de  $Q$  que cubre intervalos limitados de estas variables, a partir de la cual debemos generar GOS continuas mediante interpolaciones y extrapolaciones adecuadas. Por lo tanto, la precisión de las SEDDs calculadas no depende únicamente de la precisión de las GOSs numéricas, sino también de cuán precisos son los algoritmos utilizados para interpolar y extrapolar las tablas. En el diagrama de la Figura 3.1 se muestran las zonas del plano  $(Q, W)$  en las que aplicamos los diferentes esquemas de interpolación que hemos elegido. Las energías características en este diagrama se dan en unidades de la energía de ionización  $E_a$  del electrón atómico activo. Obsérvese que para  $Q < 10^{-4} E_a$  podemos aplicar la aproximación dipolar, es decir, la GOS y la TGOS se pueden tomar ambas iguales a la OOS.



**Figura 3.1:** Esquema de las regiones del plano  $(Q, W)$  que se utilizan en las distintas estrategias de interpolación y extrapolación descritas en el texto. La franja izquierda, correspondiente a energías de retroceso pequeñas, representa la región dipolar, donde la GOS y la TGOS se reducen a la OOS. La figura no está a escala.

### 3.1.1. Excitación hacia estados ligados

La GOS longitudinal para excitaciones desde la capa activa  $n_a \kappa_a$  hacia niveles ligados con energía  $\epsilon_{n_b \kappa_b}$  es [ver las ecs. (2.67) y (2.68)]

$$\frac{df_a^{\text{exc}}(Q, W)}{dW} = \sum_{n_b, \kappa_b} \delta(W - \epsilon_{n_b \kappa_b} + \epsilon_{n_a \kappa_a}) f_{ba}(Q) \quad (3.1)$$

con

$$f_{ba}(Q) \equiv \frac{W 2(Q + m_e c^2)}{Q(Q + 2m_e c^2)} \sum_{\lambda} (2\lambda + 1) \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(\lambda)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [R_{n_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^{\lambda}(q)]^2. \quad (3.2)$$

Por otro lado, la TGOS para estas excitaciones es

$$\frac{dg_a^{\text{exc}}(Q, W)}{dW} = \sum_{n_b, \kappa_b} \delta(W - \epsilon_{n_b \kappa_b} + \epsilon_{n_a \kappa_a}) g_{ba}(Q), \quad (3.3)$$

con

$$g_{ba}(Q) \equiv \frac{2(Q + m_e c^2)}{W} \sum_J \frac{2J + 1}{2J(J + 1)} \left\{ \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^e \mathcal{R}_{n_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^J]^2 + \langle \bar{\ell}_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(J)} || \bar{\ell}_b \frac{1}{2} j_b \rangle^2 [{}^m \mathcal{R}_{n_b \kappa_b; n_a \kappa_a}^J]^2 \right\}. \quad (3.4)$$

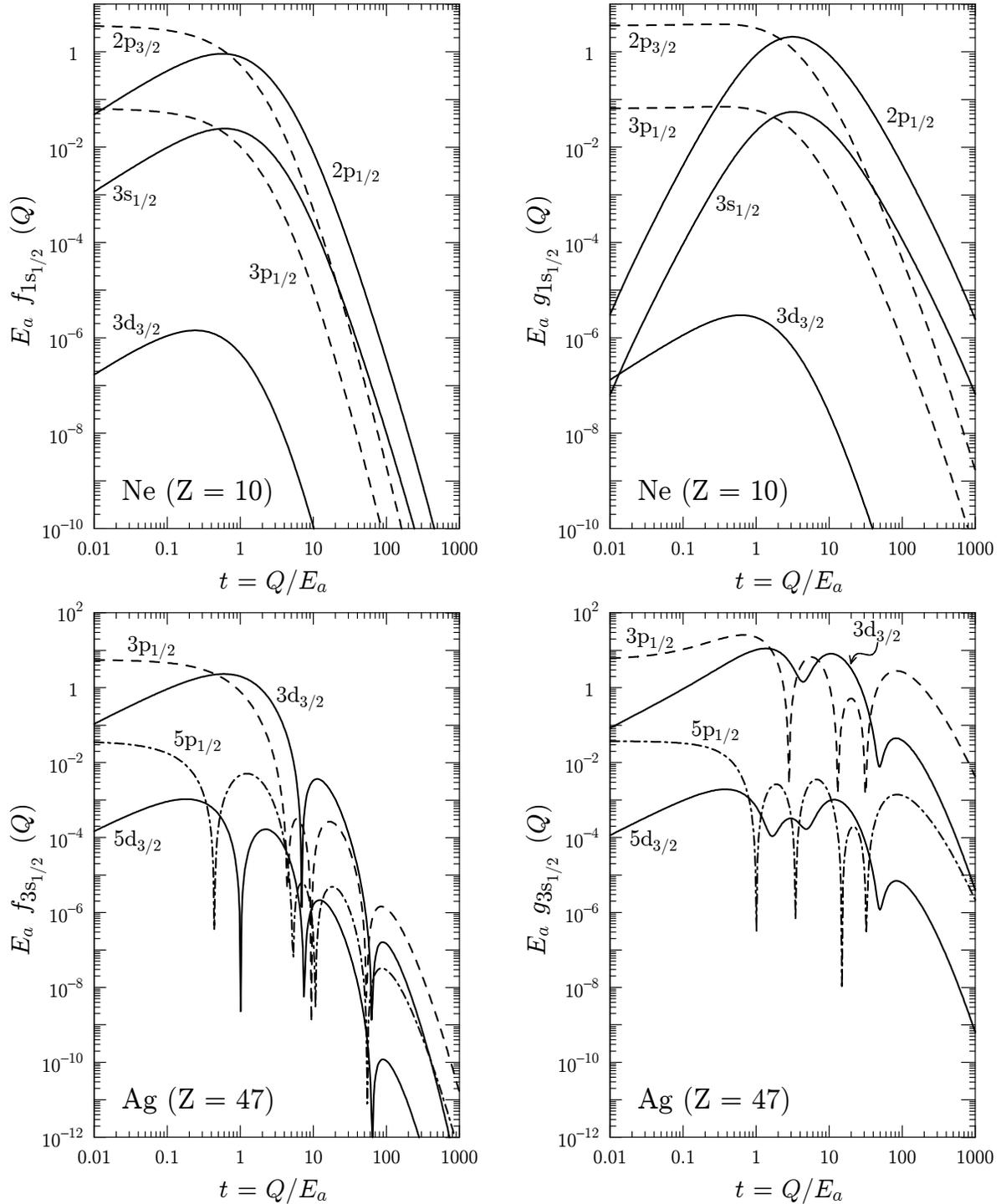
El programa GOSAT calcula estas funciones para transiciones discretas desde la capa activa hacia niveles con  $n_b \leq 25$  (región I de la Figura 3.1). Aunque el principio de exclusión de Pauli prohíbe las transiciones hacia estados ocupados, GOSAT calcula también las GOSs de las transiciones hacia estados ligados con energías  $\epsilon_{n_b \kappa_b}$  menores que  $\epsilon_{n_a \kappa_a}$ , que normalmente están ocupados, y para los que tanto  $f_{ba}(Q)$  como  $g_{ba}(Q)$  son negativas. La GOS y la TGOS se calculan para mallas logarítmicas de 512 energías de retroceso, que se extienden desde  $Q = 10^{-4}E_a$  hasta el máximo valor de  $Q$  para el que las GOSs se pueden calcular utilizando la malla radial de 10,000 puntos; más allá de ese punto, la GOS suele ser muy pequeña, típicamente  $\sim 10^{-10}$  veces su valor máximo. La razón por la que utilizamos una malla logarítmica de energías de retroceso es que facilita la integración sobre  $Q$ , por ejemplo, mediante el método de Simpson.

La Figura 3.2 muestra ejemplos de la GOS (derecha) y la TGOS (izquierda) para excitaciones de la capa K ( $1s_{1/2}$ ) del neón y de la capa M1 ( $3s_{1/2}$ ) de la plata. Nótese que los valores numéricos de la GOS y la TGOS coinciden en  $Q = 0$ . En el caso de transiciones ópticamente permitidas (es decir, transiciones con una OOS diferente de cero), estas dos funciones son prácticamente constantes hasta valores de  $Q$  próximos a  $0,01E_a$ . Generalmente, para  $Q$  mayores que  $\sim 10E_a$  la TGOS es más grande que la GOS y, lo que es más importante desde el punto de vista numérico, decrece mucho más lentamente cuando  $Q$  crece.

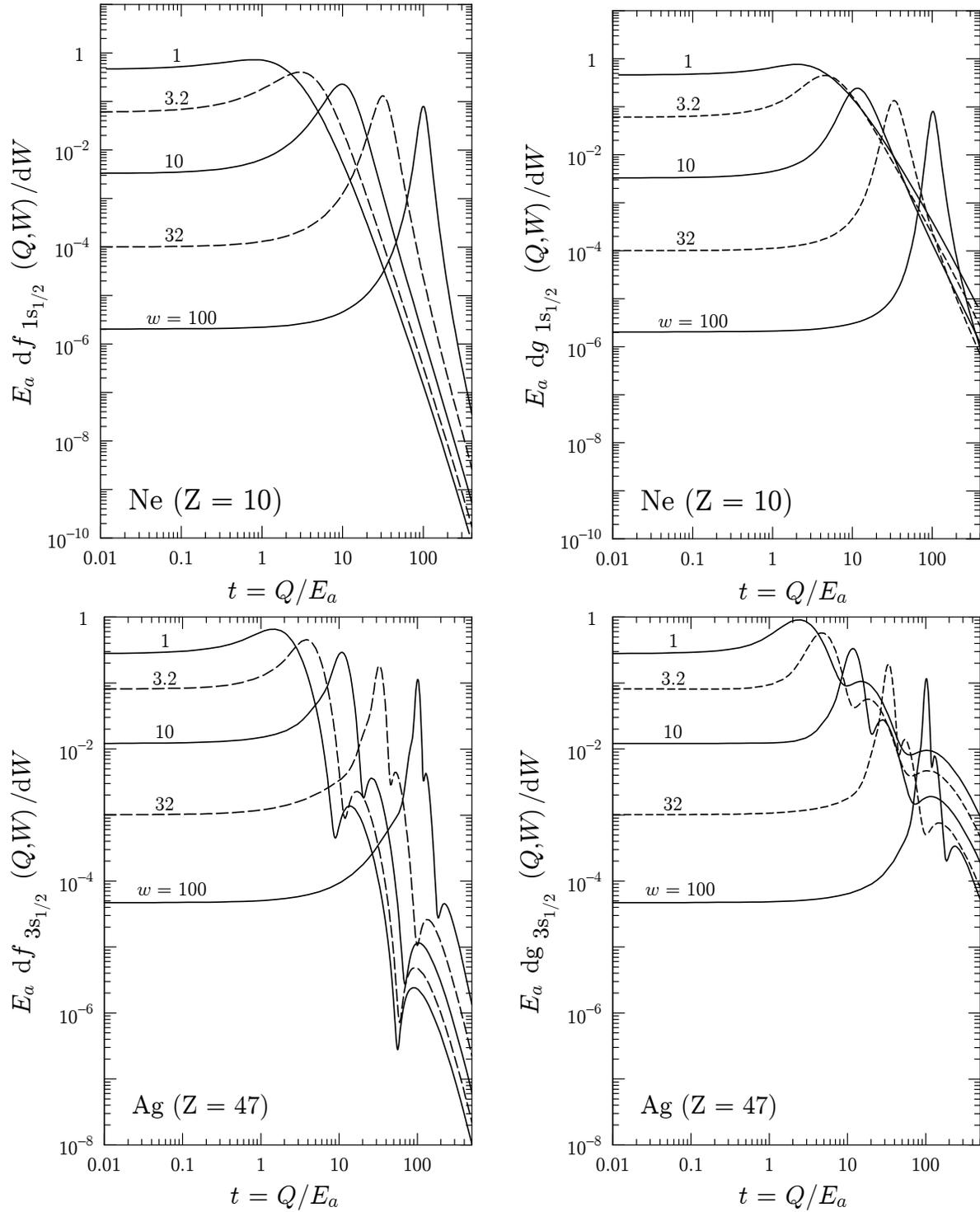
### 3.1.2. Ionización

En el caso de colisiones ionizantes, con  $W > E_a$ , el programa GOSAT calcula la GOS y la TGOS para una malla discreta de valores de las variables reducidas  $t \equiv Q/E_a$  y  $w \equiv (W/E_a) - 1$ , a partir de la cual, tanto la GOS como la TGOS deben ser evaluadas en cualquier punto arbitrario del plano  $(t, w)$ , haciendo uso de un esquema de interpolación/extrapolación adecuado. La malla de  $w$  es logarítmica, con 20 puntos por década, y se extiende desde  $10^{-5}$  hasta un valor máximo,  $w_{\text{num}}$ , del orden de 500; en este punto, los productos de las funciones radiales y las funciones Bessel oscilan tan rápidamente que resulta imposible describirlos adecuadamente con nuestra malla radial de 10,000 puntos. La malla de energías de retroceso reducidas  $t$ , se determina de manera independiente para cada valor de  $w$ , y cubre el intervalo que va desde  $10^{-4}$  hasta un valor  $t_{\text{num}} \sim 50$  (zonas II y III de la Figura 3.1), o mayor, si así lo requiere el esquema de interpolación. Para cada  $w$ , la malla de  $ts$  consiste en 150 puntos distribuidos de forma irregular (la concentración de puntos es mayor cuanto mayor es la curvatura local), para permitir la interpolación utilizando un spline cúbico en escala log-log. En la Figura 3.3 se muestran la GOS (izquierda) y TGOS (derecha) de las capas K ( $1s_{1/2}$ ) del neón y M1 ( $3s_{1/2}$ ) de la plata para algunos valores de  $w$  como funciones de  $t$ .

La Figura 2.24 muestras las superficies de Bethe de la GOS y la TGOS. Tal y como habíamos dicho en el Capítulo 2, en  $w \sim t$  (es decir, en  $W \sim Q$ ) encontramos el Bethe ridge, correspondiente a las colisiones próximas. A diferencia de la GOS, a la derecha del Bethe ridge (es decir, para  $Q > W$ ), la TGOS decrece más lentamente que la GOS. Nótese que cuando  $W$  crece, la posición del Bethe ridge se desplaza hacia valores más



**Figura 3.2:** GOSs longitudinal (izquierda) y transversal (derecha) para excitaciones de electrones de la capa K ( $1s_{1/2}$ ) del neón y de la capa M1 ( $3s_{1/2}$ ) de la plata hacia estados ligados. Cada curva representa la GOS de la transición hacia el estado final indicado por cada etiqueta, como función de la energía de retroceso reducida  $t = Q/E_a$ .



**Figura 3.3:** GOSs longitudinal (izquierda) y transversal (derecha) de la capa K ( $1s_{1/2}$ ) del neón y de la capa M1 ( $3s_{1/2}$ ) de la plata, en unidades atómicas. Cada curva representa la GOS evaluada para cada valor indicado de  $w = (W/E_a) - 1$  como función de  $t = Q/E_a$ .

grandes de  $t$ . En consecuencia, cerca del Bethe ridge tanto la GOS como la TGOS varían muy rápido en las direcciones de los dos ejes,  $w$  y  $t$ . La forma de las GOSs es una manifestación de la estructura de las funciones de onda radiales del estado inicial. Un rasgo que salta a la vista es que las GOSs puede tener mínimos a la derecha del Bethe ridge. El número de estos mínimos es igual al número de nodos de las funciones de onda radiales,  $n_r = n_a - \ell_a - 1$ , que se conoce habitualmente como número cuántico radial.

Con el fin de diseñar un esquema de interpolación eficiente, resulta provechoso introducir una transformación que asigne a la posición del máximo de la GOS, así como de los posibles mínimos, un valor prácticamente constante con  $w$ , minimizando así los efectos de la rápida variación de la GOS con  $w$ . El trabajo previo de Segui et al. (2002), en el que se relaciona la PWBA con la aproximación de impulso, muestra que la transformación de la GOS en un “perfil Compton” dependiente de  $W$ , satisface nuestras necesidades. Los perfiles Compton longitudinal (L) y transversal (T), definidos por la ec. (55) de Segui et al. (2002), son

$$J_a^L(W; p_C) = \frac{c\sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}}{(Q + m_e c^2)} \frac{Q(1 + Q/2m_e c^2)}{W(1 + W/2m_e c^2)} \frac{df_a(Q, W)}{dW}, \quad (3.5a)$$

y

$$J_a^T(W; p_C) = \frac{c\sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}}{(Q + m_e c^2)} \frac{Q(1 + Q/2m_e c^2)}{W(1 + W/2m_e c^2)} \frac{dg_a(Q, W)}{dW}, \quad (3.5b)$$

respectivamente. La variable  $p_C$ , que en la aproximación de impulso representa el momento mínimo del electrón blanco que satisface las restricciones cinemáticas impuestas por la conservación de la energía y el momento, se define por

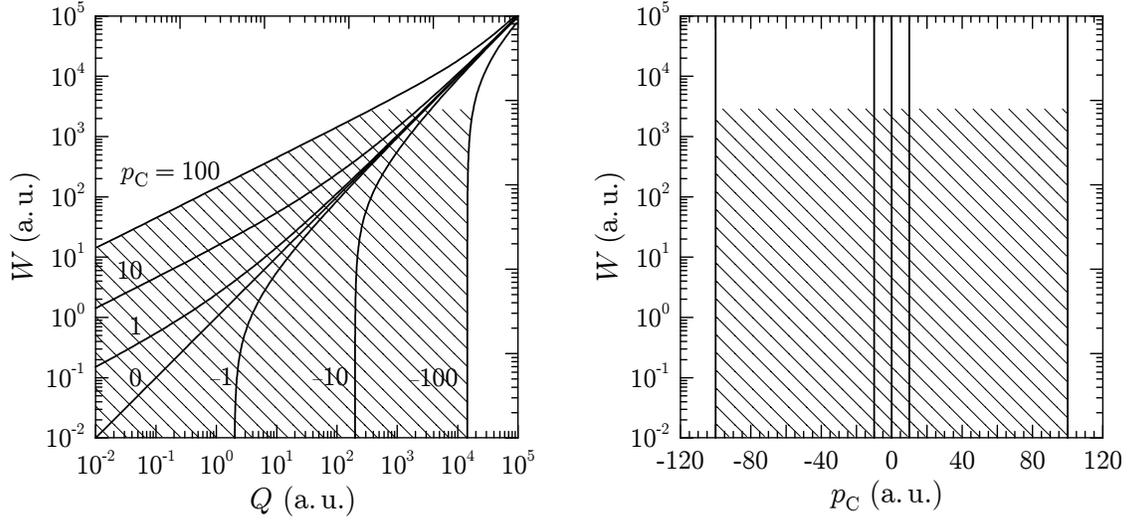
$$p_C = -\frac{1}{2c} \left( \sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)} - W \sqrt{1 + \frac{(2m_e c^2)^2}{Q(Q + 2m_e c^2) - W^2}} \right) \quad \text{si } W \leq Q \quad (3.6a)$$

y

$$p_C = \frac{2(Q + m_e c^2)(W - Q)}{2c\sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}} + \frac{[3m_e c^2(Q + m_e c^2) + Q^2](W - Q)^2}{2c\sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}(Q + 2m_e c^2)m_e c^2} \quad \text{si } W > Q. \quad (3.6b)$$

La Figura 3.4 muestra las curvas del plano  $(Q, W)$  que se corresponden con varios valores de  $p_C$ . El área rayada en el gráfico de la izquierda, limitada por las curvas  $p_C(Q, W) = -100$  y  $+100$ , se transforma en el rectángulo rayado en el plano  $(p_C, W)$  (panel de la derecha). Nótese que la diagonal  $W = Q$  del plano  $(Q, W)$  se corresponde con la línea vertical  $p_C = 0$  del plano  $(p_C, W)$ . Además, para valores relativamente grandes de  $W$ , donde el Bethe ridge domina claramente, un intervalo relativamente estrecho de  $Q$  se expande ocupando un intervalo de  $p_C$  ancho.

La Figura 3.5 muestra los perfiles de “Born-Compton” que se obtienen de las GOSs de la Figura 3.3 mediante la transformación (3.5). La variación suave de estos perfiles con  $w$



**Figura 3.4:** Diferentes curvas para  $p_C$  constantes en el plano  $(Q, W)$  (izquierda) y las rectas correspondientes en el plano  $(p_C, W)$  (derecha). El Bethe ridge,  $Q = W$ , se convierte en la línea  $p_C = 0$ . Todas las cantidades están en unidades atómicas.

resulta evidente (ver las Figuras 3.3 y 3.5). Gracias a este hecho, para  $w \in (10^{-5}, w_{\text{num}})$  y  $t \in (10^{-4}, t_{\text{num}})$  (regiones II y II' en la Figura 3.1), la interpolación de los perfiles de Born-Compton introduce errores numéricos mucho más pequeños que los que se obtienen al interpolar directamente la GOS y la TGOS. Para obtener las GOSs en un punto arbitrario del plano  $(Q, W)$ , calculamos primero el correspondiente perfil de Born-Compton interpolando según  $p_C$  mediante un spline cúbico en escala lin-log, y según  $w$  utilizando el método de Lagrange de 4 puntos en escala log-log; las GOSs se obtienen invirtiendo las transformaciones (3.5). Para que la interpolación según  $w$  sea precisa, necesitamos tabular los perfiles de Born-Compton numéricos en un rectángulo  $(p_{C,\text{min}}, p_{C,\text{num}}) \times (0, w_{\text{num}})$ , donde los límites de intervalo en  $p_C$  no dependen de  $w$  (como se muestra en el panel derecho de la Figura 3.4). Para  $w = 10^{-5}$ , las GOSs se calculan para valores de  $t$  que van desde  $t_{\text{min}} = 10^{-4}$  hasta  $t_{\text{num},0}$ . Este último valor determina el extremo izquierdo,  $p_{C,\text{min}}$ , del intervalo de  $p_C$ . Para pérdidas de energía superiores, las GOSs numéricas se calculan en el intervalo que va desde  $t_{\text{min}}(w) = 10^{-4}$  hasta un cierto valor  $t_{\text{num}}(w)$ , ligeramente superior a  $t_{\text{num},0}$ , para el cual  $p_C(Q, W)$  se hace igual a  $p_{C,\text{min}}$ . Nótese que como  $t_{\text{num}}(w)$  crece con  $w$ , el cálculo para  $t$  hasta  $t_{\text{num}}(w)$  es posible sólo para pérdidas de energía reducidas menores que un cierto valor  $w_{\text{cambio}}$ , que el programa determina de manera automática; típicamente  $w_{\text{cambio}}$  es del orden de  $2t_{\text{num},0}$ .

Para  $t \in (10^{-4}, t_{\text{num},0})$  y  $w \in (w_{\text{cambio}}, w_{\text{num}})$  [región II' en la Figura 3.1] la GOS y la TGOS son funciones suaves que crecen lentamente con  $Q$ . En esta zona, ambas funciones se evalúan directamente a partir de los valores numéricos tabulados, usando un spline cúbico log-log en  $t$  y una interpolación de Lagrange lin-log en  $w$ . En las regiones II y II', estimamos que los errores numéricos introducidos por las interpolaciones en  $t$  y en

$w$  causan variaciones en la SEDD y en la secciones eficaces integradas que son menores que el 0,01 %.

Como ya hemos mencionado, el cálculo numérico de las GOSs (tanto longitudinal como transversal) para valores de  $t$  que cubran el intervalo  $(0, t_{\text{num},0})$  sólo es posible para pérdidas de energía reducidas hasta una cierta  $w_{\text{num}}$ . Con nuestra malla radial,  $w_{\text{num}}$  habitualmente es mayor que  $1,5t_{\text{num},0}$ . Para pérdidas de energías reducidas mayores que  $w_{\text{num}}$ , el cálculo de la OOS es aún preciso, debido a que la evaluación de los elementos de matriz dipolares, ec. (2.103), es mucho más robusta que el cálculo de la GOS o la TGOS. Los resultados numéricos indican que la aproximación dipolar es aplicable cuando  $Q/W \lesssim 0,01$ , independientemente de cual sea el valor de la energía de ionización de la capa activa (ver la Figura 3.2). En consecuencia, para  $W$  mayores que  $(w_{\text{num}} + 1)E_a$ , y para  $t \in (10^{-4}, t_{\text{num},0})$ , la GOS y la TGOS se toman iguales a la OOS.

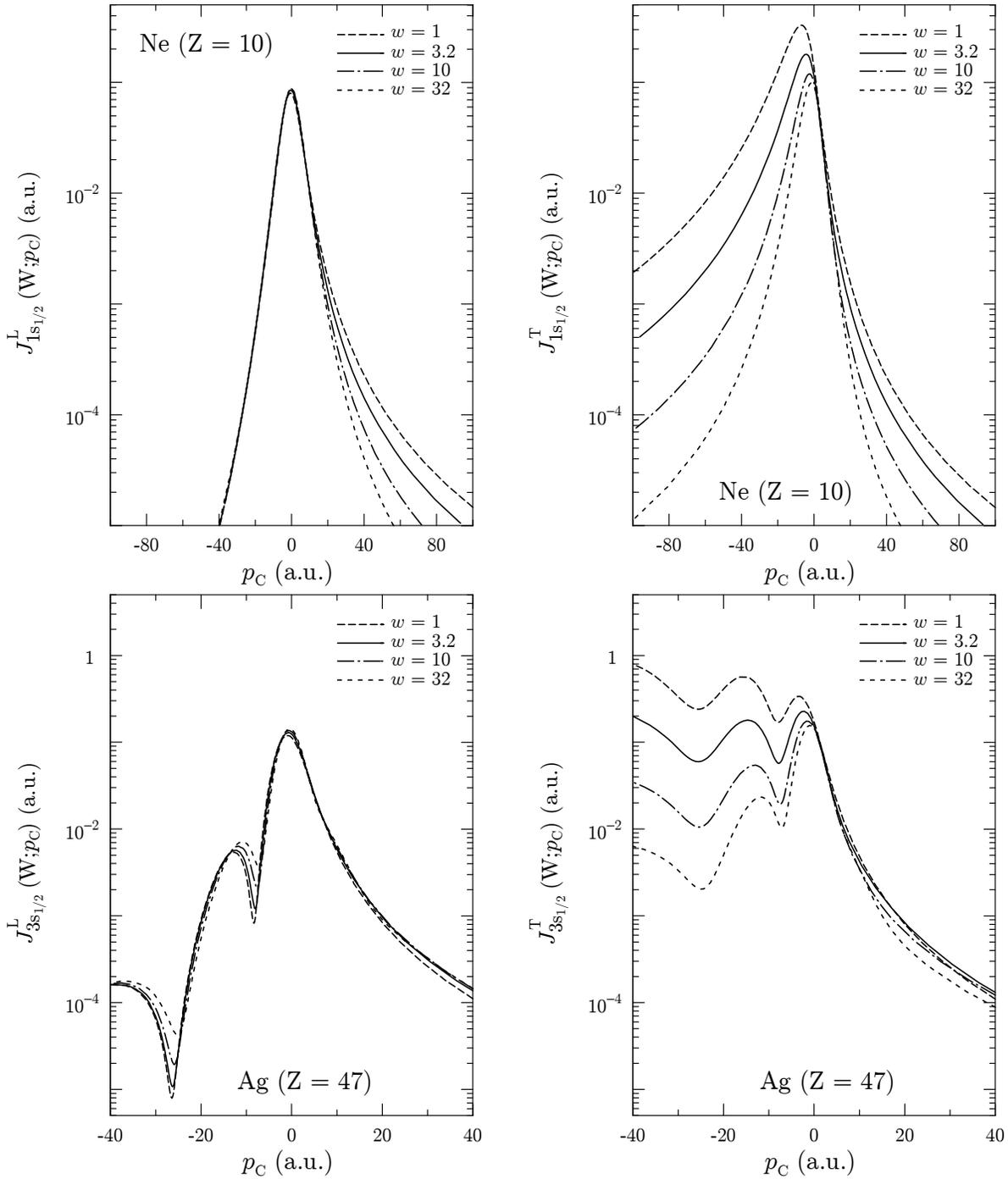
Este esquema permite el cálculo de las GOSs para  $t < t_{\text{num},0}$  y para cualquier  $W$ , excepto para un intervalo estrecho alrededor del umbral de ionización que tiene por extremos  $W_1 \simeq \epsilon_{26,\kappa_b} + E_a$  y  $W_2 = 1,00001E_a$  (región V en la Figura 3.1). La teoría de los defectos cuánticos (ver, por ejemplo, Johnson y Chen, 1979; Seaton, 1983) implica que la GOS para excitaciones hacia estados débilmente ligados (es decir, cerca del umbral de ionización) se puede aproximar por una distribución “promedio” continua, que en  $W = E_a$  empalma de manera suave con la GOS continua de ionización. Así, como la contribución de este pequeño intervalo a la regla de suma es pequeña (del orden de  $10^{-5}$  o menor), supondremos que para  $W \in (W_1, W_2)$  tanto la GOS como la TGOS son constantes con  $W$ , es decir, supondremos que  $df(Q, W)/dW = df(Q, W_2)/dW$  y análogamente para la TGOS.

## 3.2. La regla de suma de Bethe

Supondremos de manera temporal que los electrones pueden realizar transiciones desde el nivel inicial  $\epsilon_{n_a\kappa_a}$  hacia cualquier orbital mono-particular  $\epsilon_{n_b\kappa_b}$ , incluyendo los de las capas ocupadas. Como es bien sabido, en el caso no-relativista, la GOS (longitudinal) satisface la regla de suma de Bethe

$$\int \frac{df_a(Q, W)}{dW} dW = 2|\kappa_a| \quad \forall Q, \quad (3.7)$$

donde la integral se extiende sobre todas las posibles transiciones, tanto hacia niveles discretos como del continuo. Esta regla de suma juega un papel esencial en la deducción convencional de la fórmula asintótica del poder de frenado (ver, por ejemplo, Fano, 1963). Sin embargo, el estudio teórico de Cohen (2003a,b) muestra que los efectos relativistas causan desviaciones significativas de la regla de suma que, en el caso de la GOS de atómica de elementos pesados, son de hasta un 2.5 %. Estas desviaciones implican que la fórmula de Bethe para el poder de frenado debería ser modificada (ver la Sección 4.1).



**Figura 3.5:** Perfiles de Born-Compton longitudinal (L) y transversal (T), ecs. (3.5), de la capa K ( $1s_{1/2}$ ) del neón y de la capa M1 ( $3s_{1/2}$ ) de la plata, en unidades atómicas. Cada curva representa el perfil para el valor indicado de  $w = (W/U) - 1$  como función de la variable  $p_C$ , ecs. (3.6).

La generalización relativista de la integral (3.7) es la suma de Bethe

$$S_0(a; Q) \equiv \int \frac{df_a(Q, W)}{dW} dW. \quad (3.8)$$

A partir de nuestras tablas numéricas de las GOSs, podemos calcular esta suma como

$$S_0(a; Q) = \sum_{b \neq a} f_{ba}(Q) + \int_{W_1}^{\infty} \frac{df_a(Q, W)}{dW} dW, \quad (3.9)$$

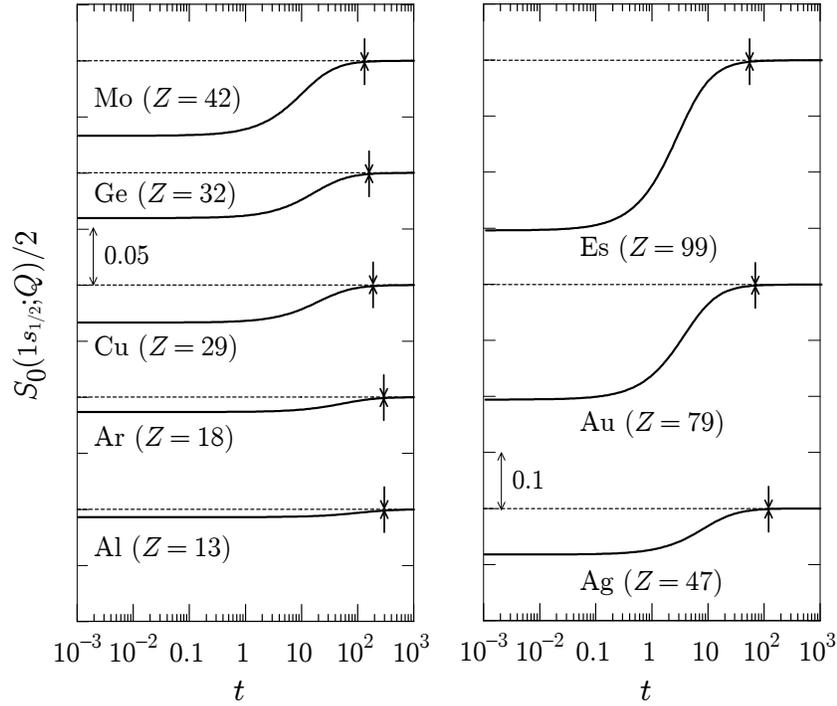
donde el sumatorio discreto es sobre las posibles transiciones hacia niveles finales ligados  $E_b \neq E_a$  con  $n_b \leq 25$ , incluyendo los ocupados; las transiciones hacia niveles ligados altamente excitados (con  $W > W_1$ ) se describen extendiendo la GOS del continuo hacia pérdidas de energía menores que  $E_a$  (ver Sección 3.1.2). Nótese que la GOS para transiciones hacia niveles por debajo de  $\epsilon_{n_a \kappa_a}$  (con  $W < 0$ ) es negativa. Para comprobar la consistencia y la precisión de nuestro cálculo de la suma de Bethe, hemos efectuado el mismo cálculo utilizando GOSs “no-relativistas”, que obtuvimos modificando el programa GOSAT sustituyendo la velocidad de la luz  $c$  por un valor 1,000 veces superior. Los resultados de este test mostraron que, para cualquier  $Q < Q_{\text{num}}$ , la diferencia relativa entre el valor calculado y el número de electrones de la capa considerada es menor que  $\sim 10^{-4}$  en todos los casos.

Resulta conveniente escribir la suma (3.8) en la forma

$$S_0(a; Q) = 2|\kappa_a| [1 - \Delta(a; Q)], \quad (3.10)$$

donde  $\Delta(a; Q)$  es la desviación relativista de la regla de suma de Bethe. En las Figura 3.6 y 3.7, respectivamente, se muestran las funciones  $S_0(a; Q)$  para algunas capas del neón ( $Z = 10$ ) y del oro ( $Z = 79$ ), calculadas a partir de las tablas numéricas de la GOS en función de  $Q$  en el intervalo que va desde 0 hasta  $Q_{\text{num}} = t_{\text{num},0} E_a$ . En el caso de la capa K ( $1s_{1/2}$ ) (Figura 3.7), la discrepancia  $\Delta(a; Q)$  crece con el número atómico  $Z$ , esto es, con la energía de ionización de la capa del electrón activo. Los resultados numéricos de la Figura 3.7 muestran que  $\Delta(a; Q)$  es mayor para la capa K ( $1s_{1/2}$ ) y decrece con el número cuántico principal de la capa activa. El caso más extremo que se muestra en las figuras es el de la capa K del einstenio ( $Z = 99$ ), en el que la desviación relativa es del orden del 30 %, es decir, a la suma (3.9) le falta más de medio electrón. Nótese que como  $S_0(a; Q)$  incluye las transiciones hacia todos los posibles orbitales monoeléctricos, la desviación observada respecto al número de electrones  $2|\kappa_a|$  se debe exclusivamente a efectos relativistas; como ya hemos dicho, un cálculo equivalente no-relativista da desviación nula.

Para  $Q > Q_{\text{num}} = t_{\text{num},0} E_a$ , donde el cálculo numérico de la GOS es demasiado exigente, la GOS longitudinal puede ser aproximada mediante el perfil de Born-Compton, tal y como se describe en la siguiente Sección. Para garantizar la consistencia del cálculo, necesitamos estimar la suma  $S_0(a; Q)$  para  $Q > Q_{\text{num}}$  para normalizar adecuadamente la GOS deducida del perfil de Born-Compton. Con este fin, tomando como punto de

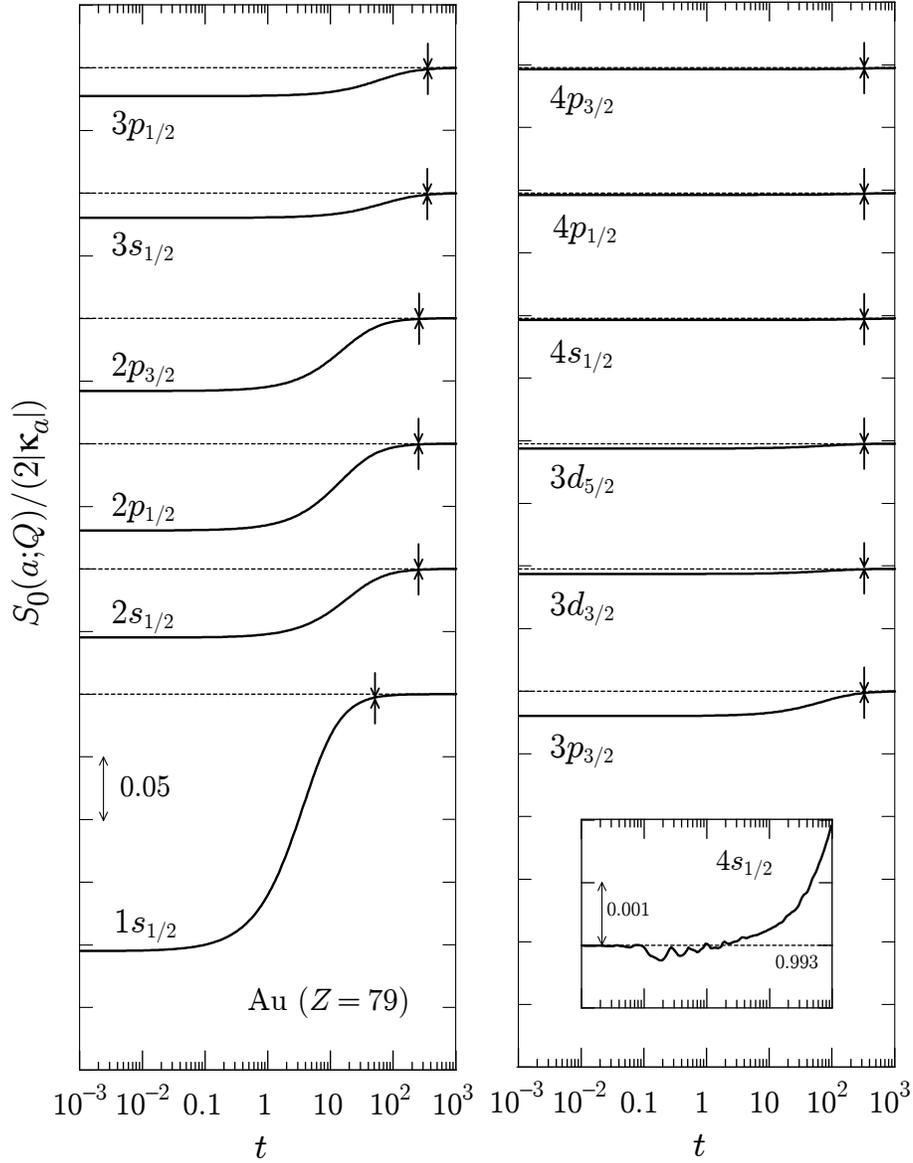


**Figura 3.6:** Sumas normalizadas  $S_0(a; Q)/2$  para la capa K ( $1s_{1/2}$ ) de los átomos indicados, como funciones de la energía reducida de retroceso  $t = Q/E_a$ . Cada curva está dibujada conjuntamente con su propio eje vertical, que está desplazado un número arbitrario de divisiones para poder acomodar en la misma gráfica varios elementos. Para mostrar la evolución de las desviaciones de la regla de suma con  $Z$ , todas las curvas están representadas con la misma escala. La longitud de cada división se indica en el interior de la figura. Las líneas punteadas señalan el valor asintótico de cada curva, que es la unidad. La flecha indica la posición de  $t = t_{\text{num},0}$ . Para  $t$  menores que este valor, las curvas han sido calculadas de manera numérica (integrando la GOS); en cambio, para  $t > t_{\text{num},0}$  la figura muestra el ajuste analítico dado por la ec. (3.11).

partida las expresiones perturbativas de Cohen, hemos encontrado que nuestros resultados numéricos para  $Q$  próximas a  $Q_{\text{num}}$  se pueden describir de manera precisa utilizando la siguiente expresión analítica,

$$S_0(a; Q) = 2|\kappa_a| \left[ 1 - \frac{a_1}{(1 + a_2 t)^2} \right], \quad t = Q/E_a. \quad (3.11)$$

Los parámetros  $a_1$  y  $a_2$ , que son característicos de cada elemento y capa, se determinan mediante un ajuste por mínimos cuadrados de esta fórmula a los valores numéricos de  $S_0(a; Q)$  en el intervalo entre  $t_{\text{num},0} - 20$  y  $t_{\text{num},0}$ . La bondad de este ajuste queda confirmada por la continuidad de las curvas en las Figuras 3.5 y 3.6, que para  $t > t_{\text{num},0}$  representan la fórmula ajustada (3.11). En lo que sigue supondremos que esta fórmula da el valor real de la suma  $S_0(a; Q)$  para  $Q > Q_{\text{num}}$ .



**Figura 3.7:** Sumas normalizadas  $S_0(a; Q)/(2|\kappa_a|)$  para varias capas atómicas del oro ( $Z = 79$ ), como función de la energía reducida de retroceso  $t = Q/E_a$ . Los detalles son los mismos que en la Figura 3.5. Esta figura pone de manifiesto que la desviación de la regla de suma de Bethe  $\Delta(a; Q) \equiv 1 - S_0(n; Q)/(2|\kappa_a|)$  decrece cuando el número cuántico principal  $n_a$  aumenta, es decir, cuando la energía de ionización decrece. El recuadro muestra la suma para la capa  $4s_{1/2}$  con la escala ampliada, para poner de manifiesto la presencia y la magnitud de los errores numéricos.

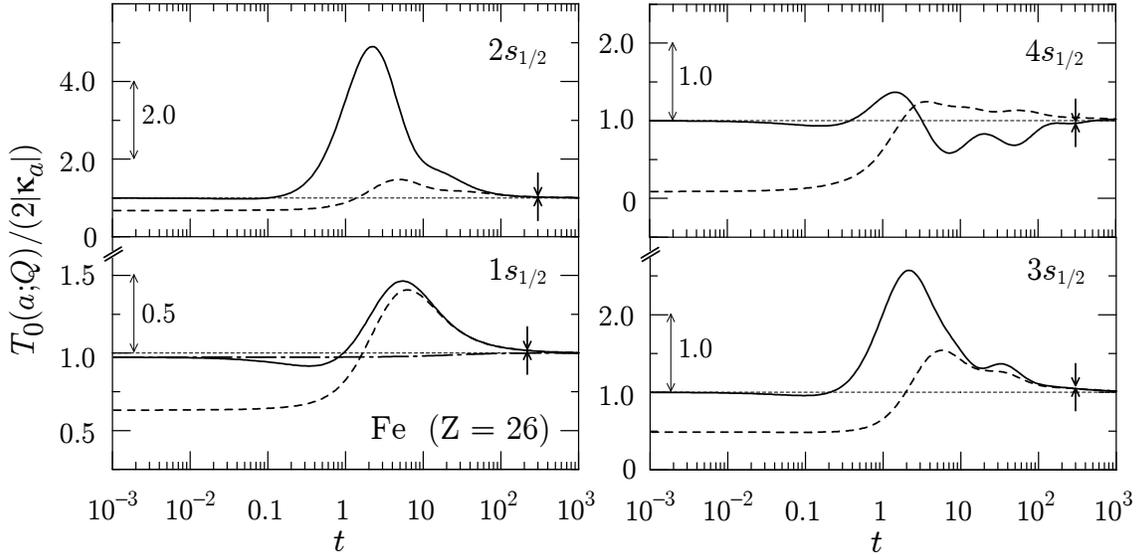
Resulta oportuno observar que cuando las curvas de las Figuras 3.6 y 3.7 se representan en una escala vertical ampliada, se observan pequeñas irregularidades en el intervalo  $t < t_{\text{num},0}$ , donde la suma  $S_0(a; Q)$  se calcula integrando la GOS tabulada (e interpolada). Estas irregularidades son el resultado de la acumulación de errores numéricos. El recuadro de la Figura 3.7, que corresponde a la capa  $4s_{1/2}$  del oro, muestra que el error relativo de la suma calculada es del orden de  $10^{-4}$ . En consecuencia, podemos esperar que las secciones eficaces que se presentan más adelante, y que se obtienen calculando integrales similares a las que nos ocupan, estén afectadas por errores de la misma magnitud.

Consideremos ahora la integral

$$\begin{aligned} T_0(a; Q) &\equiv \int_0^\infty \frac{dg_a(Q, W)}{dW} dW \\ &= \sum_{b \neq a} g_{ba}(Q) + \int_{W_1}^\infty \frac{dg_a(Q, W)}{dW} dW, \end{aligned} \quad (3.12)$$

que es análoga a la suma de Bethe, ec. (3.9), para la TGOS. Las Figuras 3.8 y 3.9 muestran esta suma (3.12) para varias capas del hierro y del oro, respectivamente, calculadas integrando la TGOS numérica. Para valores intermedios de  $Q$ ,  $T_0(a; Q)$  varía de manera un tanto descontrolada. Este comportamiento incómodo (desde el punto de vista numérico) se debe a la presencia del factor  $W$  en el denominador de la definición de la TGOS, ec. (2.68), que magnifica las contribuciones de aquellas transiciones con pérdida de energía  $W$  pequeña. Nótese que en el límite óptico,  $Q \rightarrow 0$ ,  $T_0(a; 0) = S_0(a; 0)$ . Esto es así porque en este límite los elementos de matriz al cuadrado en la ec. (2.68) son proporcionales a  $W$ . Las Figuras 3.8 y 3.9 también muestran que el comportamiento de la suma transversal varía notablemente de una capa a otra, por lo que parece difícil modelarlo de manera sencilla. Al parecer, este hecho ha pasado desapercibido en muchos cálculos de la sección eficaz total y de frenado en los que la TGOS es aproximada por la GOS (Fano, 1963). De hecho, hemos verificado numéricamente que las diferencias entre la TGOS y GOS afectan de forma manifiesta a las secciones eficaces de frenado de capas más internas de los elementos pesados. Es necesario apuntar, sin embargo, que la contribución de estas capas al poder de frenado total es mucho menor que la de las capas débilmente ligadas, por lo que la sustitución habitual de la TGOS por la GOS no afecta de manera significativa a las secciones eficaces atómicas. Como las oscilaciones bruscas de la suma transversal  $T_0(a; Q)$  se deben a transiciones hacia niveles ligados vecinos, la TGOS de ionización (es decir, excluyendo las contribuciones de las excitaciones hacia niveles ligados) varía con  $Q$  de una manera más suave, pero no monótonamente (ver las Figuras 3.7 y 3.8).

De manera completamente análoga al caso de la GOS longitudinal, para energías de retroceso  $Q$  mayores que  $Q_{\text{num}}$ , donde el cálculo numérico no es factible, obtendremos la TGOS a partir del perfil de Born-Compton, que debemos renormalizar adecuadamente. Por razones prácticas (véase Bote y Salvat, 2010), supondremos que para  $Q > Q_{\text{num}}$  la

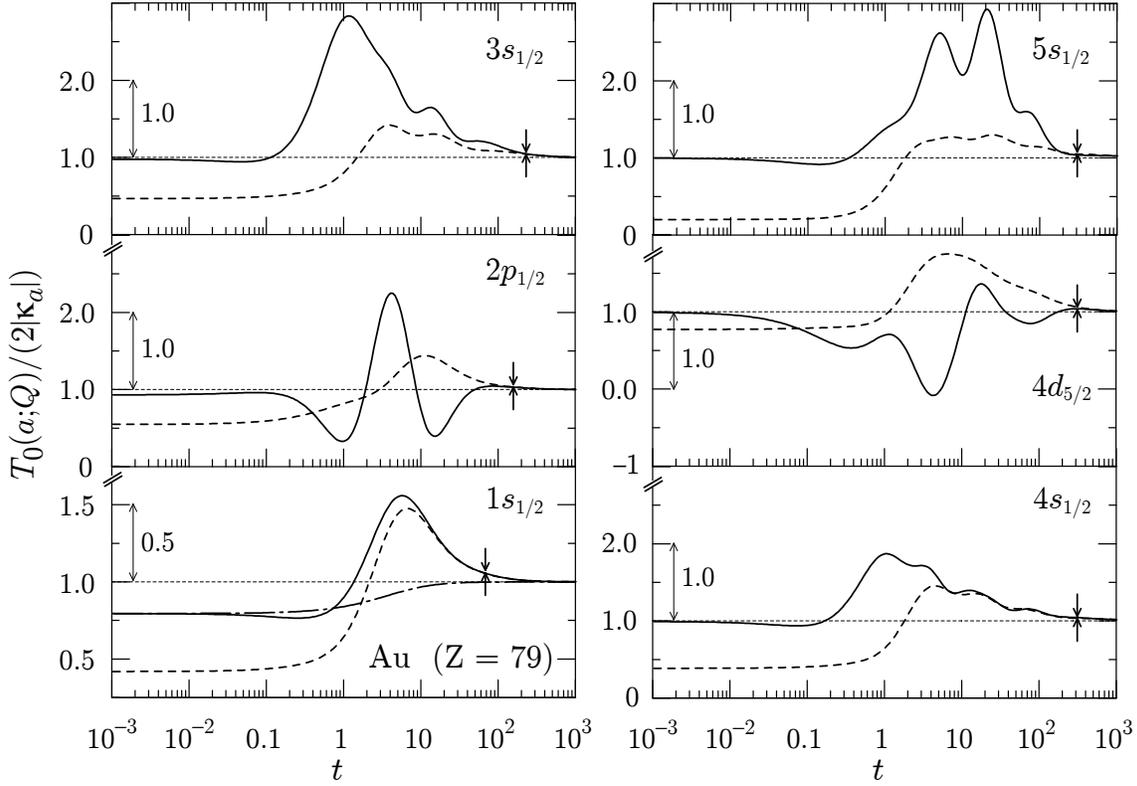


**Figura 3.8:** Sumas transversales normalizadas al número de electrones  $T_0(a; Q)/(2|\kappa_a|)$  (curvas continuas) para varias capas del hierro, como función de la energía de retroceso reducida,  $t = Q/E_a$ . La curva a trazos representa la contribución de las transiciones ionizantes (con  $W > E_a$ ). Las flechas indican el valor  $t = t_{\text{num},0}$ . Para valores más pequeños de  $t$  las curvas han sido calculadas numéricamente. Para  $t > t_{\text{num},0}$  la curva continua representa el ajuste analítico (3.13). Las líneas punteadas en el diagrama de la capa K ( $1s_{1/2}$ ) representan la suma longitudinal  $S_0(a; Q)/(2|\kappa_a|)$ , ec. (3.10).

suma transversal se puede representar en la forma

$$T_0(a; Q) = \sum_{b \neq a} g_{ba}(Q) + 2|\kappa_a| \left[ 1 - \frac{a_3}{(1 + a_4 t)^2} \right], \quad t = Q/E_a, \quad (3.13)$$

con parámetros  $a_3$  y  $a_4$  determinados mediante un ajuste por mínimos cuadrados de los valores numéricos de la función  $T_0(a; Q)$ , excluyendo la contribución de las transiciones hacia niveles ocupados con  $n_b \leq 25$ , en el intervalo  $(t_{\text{num},0} - 1, t_{\text{num},0})$ . Para capas L y más externas, la GOS y la TGOS de transiciones hacia niveles ligados de energía inferior (estados ocupados) se extienden hasta valores de  $t$  algo superiores a  $t_{\text{num},0}$ , y son negativas. La diferencia entre las curvas continuas y a trazos en las Figuras 3.8 y 3.9 se debe principalmente a esas transiciones hacia niveles inferiores. Nótese finalmente, que en el caso práctico del cálculo de secciones eficaces inelásticas, las transiciones hacia estados finales ocupados están prohibidas por el principio de exclusión y por lo tanto, la TGOS para  $t > t_{\text{num},0}$  se reduce esencialmente a la contribución de ionización.



**Figura 3.9:** Sumas transversales normalizadas (3.13)  $T_0(a; Q)/(2|\kappa_a|)$  (curvas continuas) para varias capas atómicas del oro, como funciones de la energía de retroceso reducida  $t = Q/E_a$ . Los detalles son los mismos que en la Figura 3.8.

### 3.3. La estructura del Bethe ridge

Como ya hemos indicado, el cálculo numérico de la GOS y la TGOS a partir de las ecs. (2.98) y (2.99) sólo se puede llevar a cabo para valores de  $t$  y  $w$  hasta  $t_{\text{num},0}$  y  $w_{\text{num}}$ , respectivamente (regiones II, II' y III en la Figura 3.1). Para  $t > t_{\text{num},0}$  y  $w > 10^{-5}$  (regiones IV en la Figura 3.1), la GOS y la TGOS adquieren valores significativos sólo en las proximidades del Bethe ridge ( $W \sim Q$ ). En esta región, podemos invertir las igualdades (3.5a) y (3.5b) y expresar las GOSs en la forma

$$\frac{df_a^{\text{ridge}}(Q, W)}{dW} = A_{\text{norm}}(Q) \frac{(Q + m_e c^2)}{c\sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}} \frac{W(W + 2m_e c^2)}{Q(Q + 2m_e c^2)} J_a^L(W_{\text{ref}}; p_C) \quad (3.14a)$$

y

$$\frac{dg_a^{\text{ridge}}(Q, W)}{dW} = B_{\text{norm}}(Q) \frac{(Q + m_e c^2)}{c\sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}} \frac{W(W + 2m_e c^2)}{Q(Q + 2m_e c^2)} J_a^T(W_{\text{ref}}; p_C), \quad (3.14b)$$

donde  $J_a^L(W_{\text{ref}}; p_C)$  y  $J_a^T(W_{\text{ref}}; p_C)$  son, respectivamente, los perfiles de Born-Compton longitudinal y transversal evaluados para una pérdida de energía de referencia  $W_{\text{ref}}$ , que

se toma igual a  $t_{\text{num},0}E_a$ . Como los perfiles de Born-Compton  $J^{\text{L,T}}(W; p_C)$  varían lentamente con  $W$ , al utilizar los perfiles en  $W_{\text{ref}}$  reducimos las discontinuidades del modelo compuesto de GOS y TGOS en los alrededores del punto  $W = Q = W_{\text{ref}}$ . Los perfiles  $J_a^{\text{L,T}}(W_{\text{ref}}; p_C)$  se tabulan en una malla de 256 puntos, distribuidos de manera irregular y con espaciado más denso en aquellas zonas donde la función tiene una curvatura más marcada. Los perfiles continuos se obtienen de esas tablas a partir de un spline cúbico natural en escala lin-log (es decir, la función interpolada es del estilo que se muestra en la Figura 3.5). La extrapolación hacia valores grandes de  $p_C$ , donde los perfiles decrecen monótonamente, no distorsiona los resultados. Sin embargo, nos abstendremos de extrapolar hacia valores pequeños de  $p_C$ , ya que la estructura de los perfiles a la izquierda del máximo puede no ser cubierta completamente por la tabla numérica, y la extrapolación puede dar valores descontrolados (por ejemplo, perfiles que divergen para valores negativos grandes de  $p_C$ ). En consecuencia, para valores  $p_C$  menores que el menor punto calculado, suponemos que el perfil de Born-Compton se anula. Esta modificación es equivalente a anular las GOSs para valores de  $Q$  mucho mayores que  $W$ , cosa que es aceptable porque los factores cinemáticos hacen que la SEDD sea muy pequeña en esa región.

Las cantidades  $A_{\text{norm}}(Q)$  y  $B_{\text{norm}}(Q)$  en las ecs. (3.14) son factores de normalización dependientes de  $Q$ , que se determinan de la siguiente forma. En el caso de la GOS longitudinal imponemos que, para  $Q > Q_{\text{num}}$ ,

$$\int_0^\infty \frac{df_a(Q, W)}{dW} dW = S_0(a; Q), \quad (3.15)$$

donde  $S_0(a; Q)$  es la suma de cada capa individual dada por la ec. (3.11). Esto es,

$$\int_{E_a}^\infty \frac{df_a^{\text{ridge}}(Q, W)}{dW} dW = S_0(a; Q) - \sum_{b \neq a} f_{ba}(Q). \quad (3.16)$$

Como  $Q_{\text{num}}$  es del orden de  $50E_a$  o mayor, para  $Q > Q_{\text{num}}$  sólo las transiciones hacia niveles  $\epsilon_{n_b \kappa_b}$  que están muy por debajo del nivel inicial contribuyen a la suma sobre todos los estados ligados de la derecha de la ecuación, para las cuales  $W$  es grande y negativa; las GOSs correspondientes,  $f_{ba}(Q)$ , son también negativas. En cambio, las GOSs de transiciones hacia niveles próximos o algo por encima del nivel inicial, toman valores muy pequeños para  $Q > Q_{\text{num}}$ . El requisito (3.15) es importante para garantizar la consistencia de la fórmula asintótica del poder de frenado, que deduciremos en la Sección 4.1, y de las correcciones de capas calculadas (Sección 4.3) porque garantiza el comportamiento de la de suma de Bethe.

Finalmente, consideramos el modelado de la GOS transversal para energías de retroceso mayores que  $Q_{\text{num}}$ , que es más incierto, debido a la ausencia de una expresión asintótica precisa para la suma transversal  $T_0(a; Q)$ . El factor de normalización  $B_{\text{norm}}(Q)$  para  $Q > Q_{\text{num}}$  se fija imponiendo que [ver ec. (3.12)]

$$\int_0^\infty \frac{dg_a^{\text{ridge}}(Q, W)}{dW} dW = T_0(a; Q) - \sum_{b \neq a} g_{ba}(Q), \quad (3.17)$$

donde  $T_0(a; Q)$  viene dada por la ec. (3.13). Esto es,

$$\int_0^\infty \frac{dg_a^{\text{ridge}}(Q, W)}{dW} dW = 2|\kappa_a| \left[ 1 - \frac{a_3}{(1 + a_4 t)^2} \right]. \quad (3.18)$$

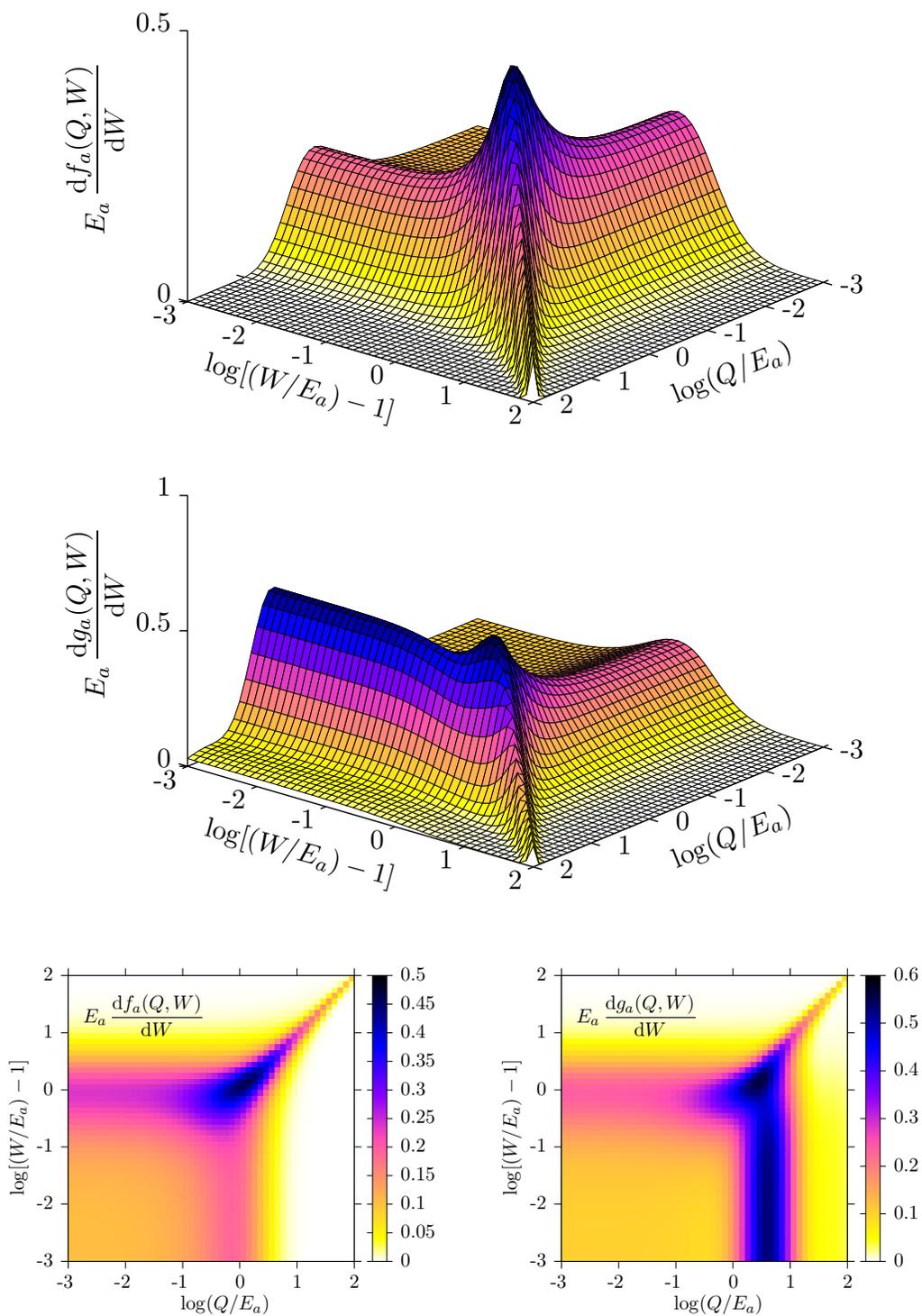
Resumiendo, para definir un modelo completo para la GOS y la TGOS, para valores arbitrarios de  $Q = tE_a$  y  $W = (w + 1)E_a$ , combinamos las tablas numéricas calculadas, que cubren los intervalos limitados  $t \in (10^{-4}, t_{\text{num},0})$  y  $w \in (10^{-5}, w_{\text{num}})$ , con modelos escalados. Específicamente, para  $w > w_{\text{num}}$  y  $t < t_{\text{num},0}$  (regiones III de la Figura 3.1), la GOS y la TGOS se toman iguales a la OOS, es decir, consideramos que no varían con  $Q$ . Esta aproximación tiene un efecto despreciable en las sumas  $S_0(a; Q)$  y  $T_0(a; Q)$ , porque tanto la GOS como la TGOS son muy pequeñas en esta región. Para  $t > t_{\text{num},0}$  (zona IV en la Figura 3.1) la GOS y la TGOS se obtienen de los perfiles de Born-Compton renormalizados, ecs. (3.14). Las GOSs y las TGOSs calculadas con este modelo compuesto para la ionización de la capa K del neón ( $Z = 10$ ) y de la capa M1 de la plata ( $Z = 47$ ) se muestran, respectivamente, en las Figuras 3.10 y 3.11.

Las aproximaciones introducidas por nuestros modelos de extrapolaciones, se han elegido con el objetivo de obtener un modelo de GOS y de TGOS continuo, excepto en las líneas  $Q = Q_{\text{num}} = t_{\text{num},0}E_a$  y  $W = (w_{\text{num}} + 1)E_a$ , y satisfacer aproximadamente las sumas de Bethe. Las GOSs extrapoladas así son más precisas que las obtenidas con otras aproximaciones que se emplean frecuentemente en cálculos de poderes de frenado tales como la sustitución del Bethe ridge por una función delta, o por perfiles de Compton simétricos calculados a partir de orbitales Hartree-Fock (ver, por ejemplo, Segui et al., 2002).

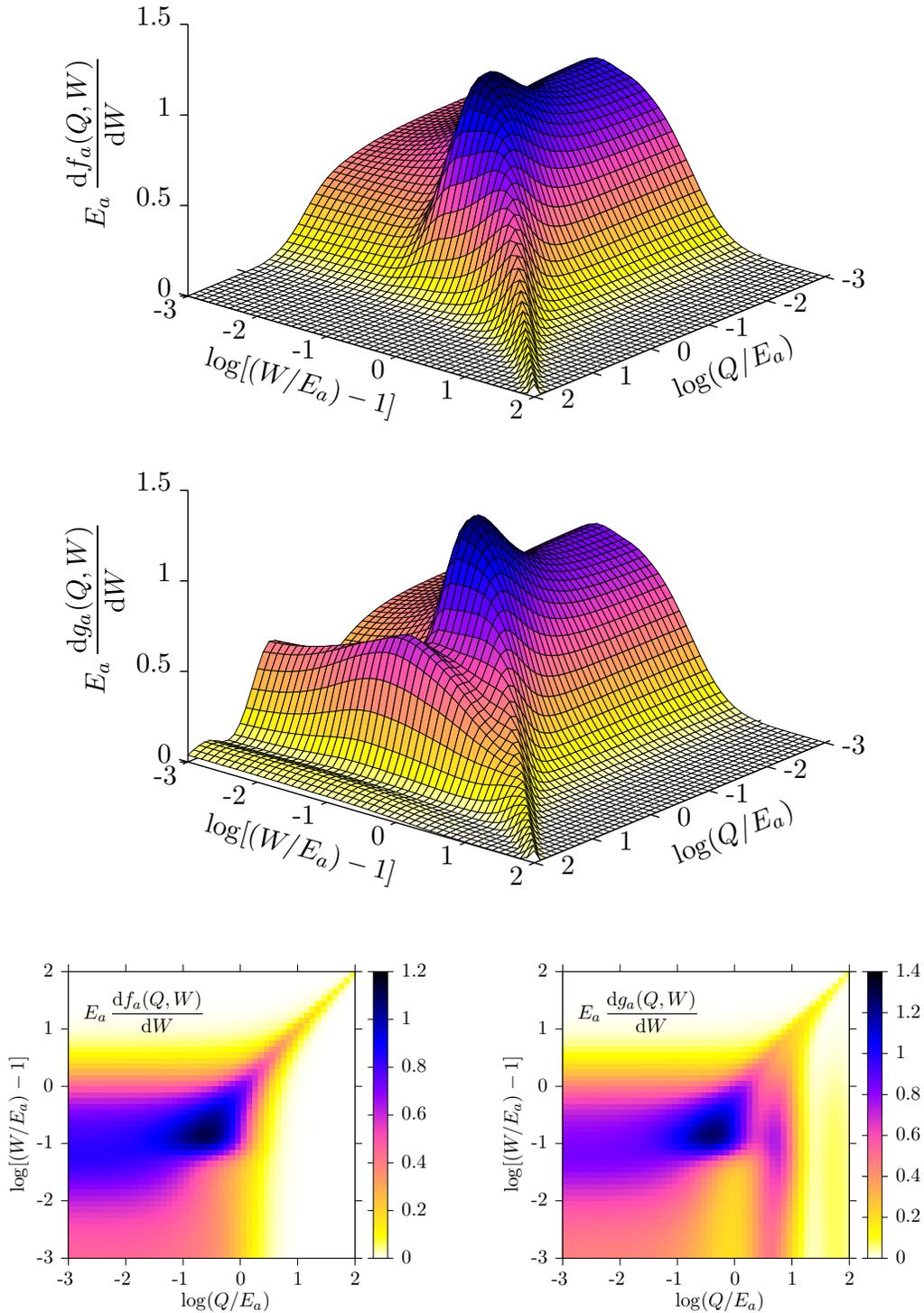
### 3.4. Programas de cálculo

La teoría que hemos esbozado en el Capítulo 2 permite el cálculo numérico de la GOS y la TGOS en rangos relativamente amplios de pérdidas de energía  $W$  y de energías de retroceso  $Q$ . La información de partida se reduce al potencial  $V_T(r)$  que “sienten” los electrones atómicos. En este trabajo utilizamos el potencial DHFS para la configuración del estado fundamental, que hemos calculado con el programa DHFXA de Salvat y Fernández-Varea (2009).

En el cálculo de las funciones de onda radiales de los estados de un electrón en el potencial central  $V_{\text{DHFS}}(r)$ , ec. (2.14), el paquete de subrutinas RADIAL (Salvat y Fernández-Varea, 2009), utiliza un algoritmo que consiste en representar el potencial como un spline cúbico natural  $\tilde{V}(r)$  que interpola los valores de una tabla  $V(r_i)$  ( $r_1 = 0 < r_2 < \dots < r_u$ ). Esto es, la función  $\tilde{V}(r)$  en cada intervalo  $[r_i, r_{i+1}]$  es un polinomio cúbico, y tiene sus derivadas primeras y segundas continuas en el intervalo completo  $[r_0, r_u]$ . Las funciones de onda radiales de Dirac en cada intervalo  $[r_i, r_{i+1}]$  se expresan como series de potencias en  $r$ , cuyos coeficientes satisfacen relaciones de recurrencia determinadas por los coeficientes del spline. Estas series se suman hasta converger con



**Figura 3.10:** GOS y TGOS para ionización de la capa K ( $1s_{1/2}$ ) del átomo de neón ( $Z = 10$ ), representadas como superficies de Bethe tridimensionales y como diagramas de color; ver la Figura 3.3.



**Figura 3.11:** GOS y TGOS para ionización de la capa M1 ( $3s_{1/2}$ ) del átomo de plata ( $Z = 47$ ), representadas como superficies de Bethe tridimensionales y como diagramas de color; ver la Figura 3.3.

la tolerancia prescrita por el usuario, lo que evita de manera efectiva los errores de redondeo. Las funciones de onda radiales se calculan para una malla radial arbitraria, diferente a la malla donde está tabulado el potencial, de hasta 10,000 puntos.

El programa GOSAT calcula la GOS y la TGOS para capas cerradas utilizando las fórmulas dadas en la Sección 2.4.1. Los elementos de matriz reducidos de los tensores de Racah,  $\langle \ell_1 \frac{1}{2} j_1 || \mathbf{C}^{(L)} || \ell_2 \frac{1}{2} j_2 \rangle$ , se calculan a partir de sus expresiones analíticas (2.79). El cálculo de las integrales radiales (2.81) y (2.92) es delicado, porque los integrandos oscilan rápidamente. Para asegurar la precisión de las integrales, la malla radial se define de modo que haya como mínimo 20 puntos en una longitud de onda de las funciones radiales y de las funciones esféricas de Bessel. De esta forma, las oscilaciones rápidas del integrando se reproducen de manera precisa cuando utilizamos una interpolación Lagrange de 6 puntos (Abramowitz y Stegun, 1974) y, en consecuencia, las integrales radiales pueden ser evaluados con precisión utilizando el método de Lagrange de 6 puntos. Para optimizar el tiempo de cálculo, para cada pérdida de energía  $W$ , las funciones de onda radiales del estado final se calculan una sola vez y se guardan en memoria. Para cada energía de retroceso  $Q$ , la tabla de valores de las funciones Bessel en los puntos de la malla se calcula de forma rápida utilizando sus relaciones de recurrencia (Abramowitz y Stegun, 1974). Nótese que el intervalo de integración se extiende desde  $r = 0$  hasta un punto  $r_N$  donde la función de onda radial del estado inicial tiene un valor despreciable. Cuando la pérdida de energía  $W$  crece, la energía  $\epsilon_b = W - E_a$  del estado final del electrón activo crece también y, por lo tanto, su longitud de onda decrece. En consecuencia, como el número de puntos en la malla radial no puede exceder de 10,000, los cálculos para un valor dado de  $Q$  no se pueden llevar a cabo más allá de una cierta pérdida de energía  $W_{\text{num}} = (w_{\text{num}} + 1)E_a$ . De manera similar, la longitud de onda de la función Bessel decrece cuando la energía de retroceso  $Q$  crece, lo que impide extender los cálculos más allá de cierta energía de retroceso  $Q_{\text{num}}(W)$ , que depende de la pérdida de energía  $W$ . Naturalmente, los valores de  $W_{\text{num}}$  y  $Q_{\text{num}}$  se pueden aumentar ampliando la malla radial, a expensas de enlentecer el cálculo. Los sumatorios de las series de ondas parciales (2.98) y (2.99) se evalúan sumando términos con valores crecientes de  $|\kappa_b|$  y  $\lambda$ ; la suma se detiene en el momento que la contribución relativa de los seis últimos términos añadidos es menor que  $10^{-9}$ . En el caso de transiciones ionizantes, el programa permite el cálculo de funciones de onda radiales del estado final con valores de  $|\kappa_b|$  de hasta 300, valor que puede ser modificado cambiando la dimensión de los vectores y matrices en el código fuente. Como la convergencia de la serie de ondas parciales empeora cuando  $Q$  crece, fijado el número de términos de la serie, ésta converge para energías de retroceso hasta a un cierto valor, que es determinado de manera automática por el programa.

Como ya hemos indicado (ver la Sección 3.1), en el caso de ionización GOSAT genera tablas de la GOS y de la TGOS en una malla logarítmica en la pérdida de energía reducida,  $w = (W/E_a) - 1$ , y para una malla no-uniforme de energías de retroceso reducidas  $t = Q/E_a$  que se extiende desde  $t = 10^{-4}$  hasta un valor máximo  $t_{\text{num}}(w)$ , determinado por el espaciado y la dimensión de la malla radial. El programa también genera una tabla de valores de la OOS para la misma malla de pérdidas de energía

reducidas, pero que se extiende hasta valores superiores de  $W$ , así como tablas de los perfiles de Born-Compton longitudinal y transversal para  $W_{\text{ref}} = t_{\text{num},0}E_a$  y para una malla de valores de  $p_C$  suficientemente densa como para permitir la interpolación del logaritmo del perfil utilizando un spline cúbico. Estos perfiles se utilizan para calcular la GOS y la TGOS para  $W > t_{\text{num},0}E_a$  (ver la Sección 3.3). El programa GOSAT genera también la GOS y la TGOS para transiciones discretas desde la capa  $n_a\kappa_a$  hacia niveles ligados  $\epsilon_{n_b\kappa_b}$  con  $\epsilon_b \neq \epsilon_a$  y  $n \leq 25$ , incluyendo los niveles que están ocupados, que se necesitan para calcular las sumas de Bethe  $S_0(a; Q)$  y  $T_0(a; Q)$ , ecs. (3.8) y (3.12).

Hemos escrito un segundo programa Fortran, llamado PWACS, que calcula la SED en pérdida de energía, así como las secciones eficaces integradas  $\sigma^{(k)}$  (ver la Sección 2.4.2) para partículas cargadas a partir de las tablas numéricas de las GOSs generadas por el programa GOSAT. PWACS calcula la sección eficaz de cada capa electrónica  $n_a\kappa_a$ , y suma los resultados para obtener la sección eficaz atómica. Las excitaciones hacia niveles discretos corresponden a resonancias con energías de excitación bien definidas,  $W_{ba} = \epsilon_{n_b\kappa_b} - \epsilon_{n_a\kappa_a}$ . La sección eficaz total para excitación de una capa cerrada hacia un niveles ligados vacíos o parcialmente llenos  $\epsilon_{n_b\kappa_b}$  con  $n_b \leq 25$  se calcula como

$$\sigma_{ba}^{\text{exc}} = \frac{2|\kappa_b| - q_b}{2|\kappa_b|} \int_{Q_-}^{Q_+} \frac{d\sigma_{ba}^{\text{exc}}}{dQ} dQ, \quad (3.19)$$

donde  $q_b$  es el número de electrones en el nivel ( $= 0$  para un nivel vacío), y la SED  $d\sigma_{ba}^{\text{exc}}/dQ$  se obtiene integrando respecto de  $W$  la expresión general (2.65) con las GOSs correspondientes a transiciones discretas, ecs. (3.1) a (3.4). Los límites  $Q_-$  y  $Q_+$  de intervalo cinemáticamente permitido de energías de retroceso vienen dados por la ec. (2.105). Nótese que la SED en pérdida de energía para excitaciones a niveles ligados se puede expresar como

$$\frac{d\sigma_{ba}^{\text{exc}}}{dW} = \sigma_{ba}^{\text{exc}} \delta(W - \epsilon_{n_b\kappa_b} + \epsilon_{n_a\kappa_a}). \quad (3.20)$$

La SED en pérdida de energía para excitaciones de la capa cerrada  $n_a\kappa_a$  para pérdidas de energía mayores que el umbral efectivo  $W_1 = \epsilon_{26,\kappa_b} + E_a$  (ver Sección 3.1.2) se obtiene utilizando las GOSs continuas, que se evalúan a partir de las tablas numéricas generadas por GOSAT utilizando los métodos de interpolación/extrapolación descritos en las Secciones 3.1 y 3.3. La SED en la pérdida de energía se obtiene como

$$\frac{d\sigma_a^{\text{cont}}}{dW} = \int_{Q_-}^{Q_+} \frac{d^2\sigma_a}{dWdQ} dQ. \quad (3.21)$$

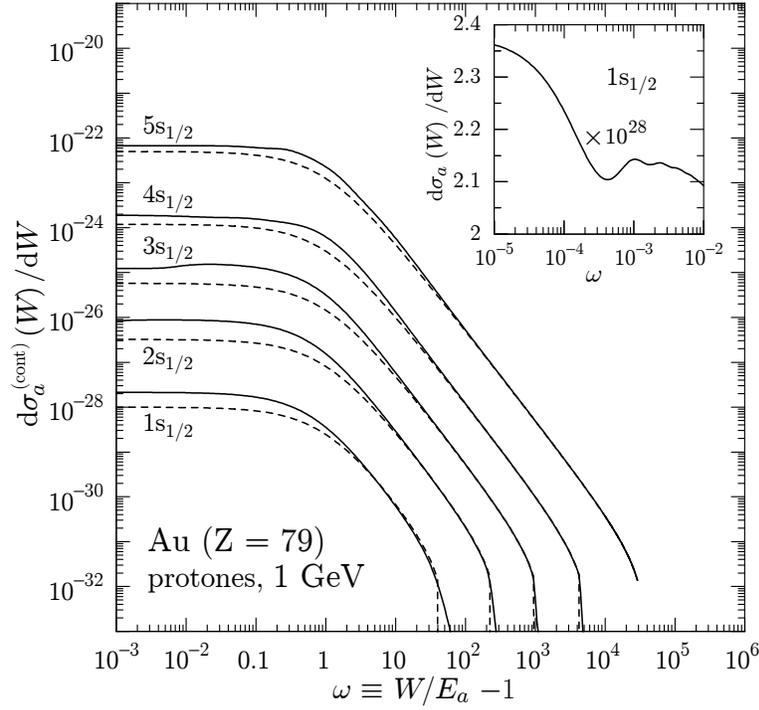
El cálculo de las integrales sobre la energía de retroceso no es trivial debido a la rápida variación de la SED transversal para  $Q$ s cercanas al límite inferior  $Q_-$ . Para asegurar la precisión del cálculo de la integral, dividimos el intervalo de integración en como mínimo dos partes. En primer lugar, consideramos la contribución del intervalo que va desde  $Q_-$  hasta  $Q_{\text{num}} = t_{\text{num},0}E_a$ , donde las GOSs se calculan interpolando las tablas numéricas que genera GOSAT. En segundo lugar, evaluamos la contribución del intervalo que va desde  $Q_{\text{num}}$  hasta  $Q_+$ , donde las GOSs se representan en términos del

los perfiles de Born-Compton (ver la Sección 3.3). Cada una de estas dos contribuciones se calcula utilizando un algoritmo adaptativo, que combina la fórmula de cuadratura de Gauss de 20 puntos con una estrategia de bisección para estimar y reducir el error numérico. Este algoritmo permite calcular integrales de funciones continuas con una precisión fijada a priori (ver Salvat et al., 2009); pero se bloquea cuando el integrando o su primera derivada tiene discontinuidades (que no pueden ser aproximadas por un polinomio). Dividiendo el intervalo de integración en  $Q_{\text{num}}$ , donde nuestra GOS numérica es discontinua, nos aseguramos de que sólo entramos funciones suaves a la subrutina de integración. Finalmente, para  $W > W_a$  supondremos que los electrones blanco pueden tratarse como electrones libres y en reposo, y que las GOSs se pueden representar como  $2|\kappa_a| \delta(W - Q)$ , de tal forma que la SED en pérdida de energía viene dada por expresiones analíticas simples (Bote y Salvat, 2010). Éstas dan valores que difieren ligeramente de los obtenidos numéricamente para  $W \lesssim W_a$ , debido a la anchura finita del Bethe ridge. Para dar cuenta (y corregir) de manera parcial este efecto para  $W > W_a$ , y evitar la discontinuidad de la SED en  $W_a$ , hacemos

$$\frac{d\sigma_{a,W>W_a}^{\text{cont}}}{dW} = \frac{W}{W + \delta} \frac{d\sigma_{a,W>W_a}^{\text{free}}}{dW}, \quad (3.22)$$

donde el último factor de la derecha es la SED en pérdida de energía para colisiones con electrones libres y en reposo (Bote y Salvat, 2010), y el parámetro  $\delta$  se fija para que esta fórmula reproduzca el valor de la SED en pérdida de energía en  $W \sim 0,75W_a$  que se obtiene numéricamente. En el caso de colisiones de electrones o positrones, la SED contiene un factor adicional que da cuenta aproximadamente de los efectos de intercambio; este factor presenta una discontinuidad en  $Q = E_a$ , lo que complica ligeramente los cálculos (para detalles, ver Bote y Salvat, 2010).

La Figura 3.12 muestra las SEDs en pérdida de energía de diferentes capas del oro para protones con energía cinética de 1 GeV. Las curvas continuas representan SEDs numéricas, calculadas a partir de las ecs. (3.21) y (3.22), y las curvas a trazos son las SEDs en pérdida de energía para colisiones con  $2|\kappa_a|$  electrones libres y en reposo. Para transferencias de energía cerca del umbral de ionización, la variación de las SEDs numéricas no es monótona, y sus fluctuaciones ponen de manifiesto la estructura de la GOS. Para asegurar una interpolación precisa, y la posterior integración sobre  $W$ , consideramos la SED en pérdida de energía como función de la pérdida de energía reducida,  $w = (W/E_a) - 1$ , y utilizamos una malla logarítmica de  $w$  que permite reproducir correctamente las rápidas variaciones de la SED cerca del umbral. Es interesante notar que la SED correspondiente a electrones libres, se acerca de manera notable al resultado numérico para pérdidas de energía mayores que  $\sim 20E_a$ . Además, para  $W$ s pequeñas, la SED de electrones libres es siempre menor que la SED numérica, porque la primera no da cuenta de las interacciones distantes. Esta peculiaridad se puede utilizar para diseñar un modelo de interacción simplificado (pero aún realista) útil para la simulación Monte Carlo del transporte de partículas cargadas.



**Figura 3.12:** SED en pérdida de energía para la ionización de capas del átomo de oro por impacto de protones de 1 GeV, como función de la pérdida de energía reducida  $w = (W/E_a) - 1$ . Las curvas continuas representan las SEDs que se obtienen de integrar numéricamente la SEDD; las curvas a trazos son las SEDs en pérdidas de energía para colisiones con  $2|\kappa_a|$  electrones libres y en reposo. El recuadro muestra la estructura compleja de la SED numérica de la capa K ( $1s_{1/2}$ ) cerca del umbral de ionización.

La SED en pérdida de energía del átomo completo se obtiene como

$$\frac{d\sigma}{dW} = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} \left[ \frac{d\sigma_a^{\text{cont}}}{dW} + \sum_{b \neq a} \sigma_{ba}^{\text{exc}} \delta(W - \epsilon_{n_b \kappa_b} + \epsilon_{n_a \kappa_a}) \right], \quad (3.23)$$

donde el sumatorio se extiende sobre las capas ocupadas, y  $q_a$  es el número de electrones en la capa  $n_a \kappa_a$ . La sección eficaz integrada  $\sigma^{(k)}$ , ec. (2.110), viene dada por

$$\sigma^{(k)} = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} \left[ [\sigma_a^{\text{cont}}]^{(k)} + \sum_{b \neq a} \sigma_{ba}^{\text{exc}} (E_a + \epsilon_{n_b \kappa_b})^k \right]. \quad (3.24)$$

con

$$[\sigma_a^{\text{cont}}]^{(k)} = \int_{W_1}^{W_{\text{max}}} W^k \frac{d\sigma_a^{\text{cont}}}{dW} dW. \quad (3.25)$$

Para calcular esta última integral, la SED en pérdida de energía  $d\sigma_a^{\text{cont}}/dW$  se tabula en una malla logarítmica de pérdidas de energía reducidas  $w = W/E_a - 1$ , que incluye los

puntos de malla  $w_i$  donde las GOSs numéricas han sido tabuladas. El cálculo de la SED en los puntos de malla  $w_i$  es más rápido y preciso, porque no requiere interpolar en  $w$ . Nótese que, en caso de haberlos, los errores de interpolación se pondrían de manifiesto al representar gráficamente la tabla de la SED; los resultados numéricos no muestran indicios de este tipo de error. Las integrales (3.25) se evalúan mediante la regla de Simpson (Abramowitz y Stegun, 1974) después del cambio de variable  $W \rightarrow \ln w$ , que multiplica el integrando por un factor  $wE_a$ .

Como ya hemos comentado, el primer término a la derecha de la ec. (3.23) da cuenta tanto de la ionización ( $W > E_a$ ) como de la excitación al cuasi-continuo de niveles altamente excitados  $\epsilon_{n_b, \kappa_b}$  con  $n_b > 25$  (región V en la Figura 3.1), que empieza en la pérdida de energía  $W_1 = \epsilon_{26, \kappa_b} + E_a$ . Para obtener secciones eficaces de ionización (que corresponden a pérdidas de energía  $W$  estrictamente mayores  $E_a$ ) el límite inferior  $W_1$  de la integral debe sustituirse por  $E_a$ . Esto es,

$$[\sigma^{\text{ion}}]^{(k)} = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} [\sigma_a^{\text{ion}}]^{(k)} \quad (3.26)$$

con

$$[\sigma_a^{\text{ion}}]^{(k)} = \int_{E_a}^{W_{\text{max}}} W^k \frac{d\sigma_a^{\text{cont}}}{dW} dW. \quad (3.27)$$

El código PWACS calcula tablas de secciones eficaces integradas  $\sigma^{(k)}$  con  $k = 0, 1$  y  $2$  para distintos tipos de proyectiles (protones, muones, electrones y positrones) como funciones de su energía cinética  $E$ . El programa también determina las correcciones de capas  $\mathcal{C}^{(k)}$  (ver la Sección 4.3) para cada energía. De manera opcional, PWACS proporciona la SED en pérdida de energía del átomo o ion, o de las capas atómicas individuales.

Para ejecutar PWACS para un átomo o ion dado, necesitamos haber precalculado las correspondientes GOSs, OOSs y perfiles de Born-Compton. Estas funciones se generan con el programa GOSAT, que a su vez, necesita los potenciales DHFS que calcula el programa DHFXA. El paquete de códigos incluye archivos de texto con los potenciales DHFS para los átomos neutros con  $Z = 1$  (hidrógeno) hasta  $Z = 99$  (einsteinio). El programa GOSAT ha sido ejecutado con estos potenciales para generar la GOS, la TGOS, la OOS y los perfiles de Born-Compton de todas las capas de la configuración del estado fundamental de estos elementos. Con esta información en la mano, el programa PWACS permite calcular las secciones eficaces integradas de una capa cualquiera en un tiempo asequible, del orden de 10 segundos para cada energía cinética del proyectil y cada capa.

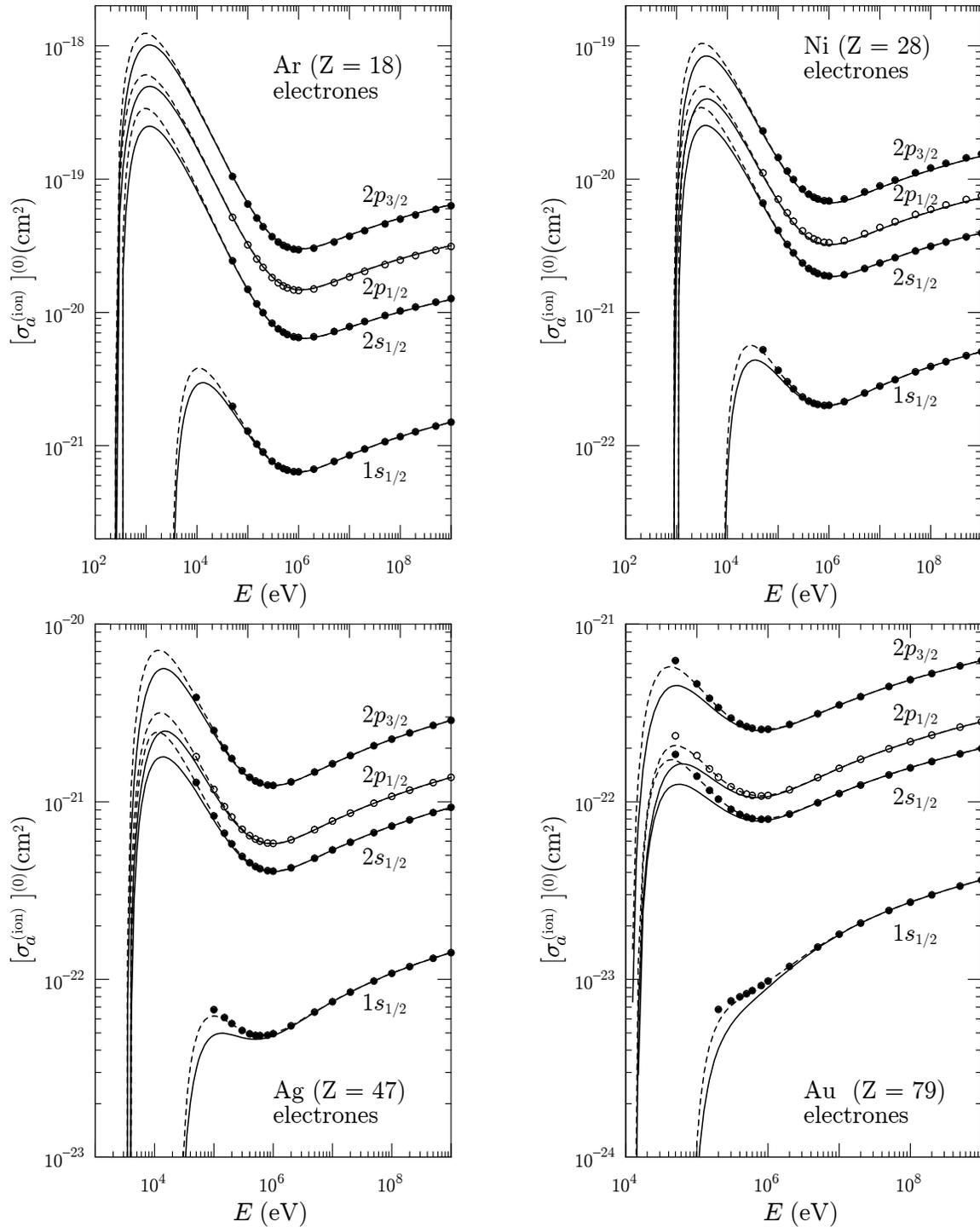
Para finalizar esta sección, presentamos algunos ejemplos del cálculo numérico. La Figura 3.13 muestra la sección eficaz total de ionización para las capas K y L de átomos de argón, níquel, plata y oro por impacto de electrones, tratados estos como partículas distinguibles de los electrones atómicos. Nuestras secciones eficaces de ionización están en buen acuerdo con las calculadas por Scofield (1978), quien, recordemos, empleó la PWBA formulada en el gauge de Lorenz, excepto para proyectiles con una energía cinética menor que aproximadamente  $20E_a$ , probablemente debido a diferencias en los métodos de interpolación e integración adoptados en cada uno de los dos cálculos. Las

curvas continuas en la Figura 3.13 representan las secciones eficaces calculadas teniendo en cuenta los efectos de intercambio (ver la Sección 6.1 de Bote y Salvat, 2010). El efecto del intercambio representa una reducción de la sección eficaz total, apreciable sólo para energías cinéticas menores que aproximadamente  $30E_a$ .

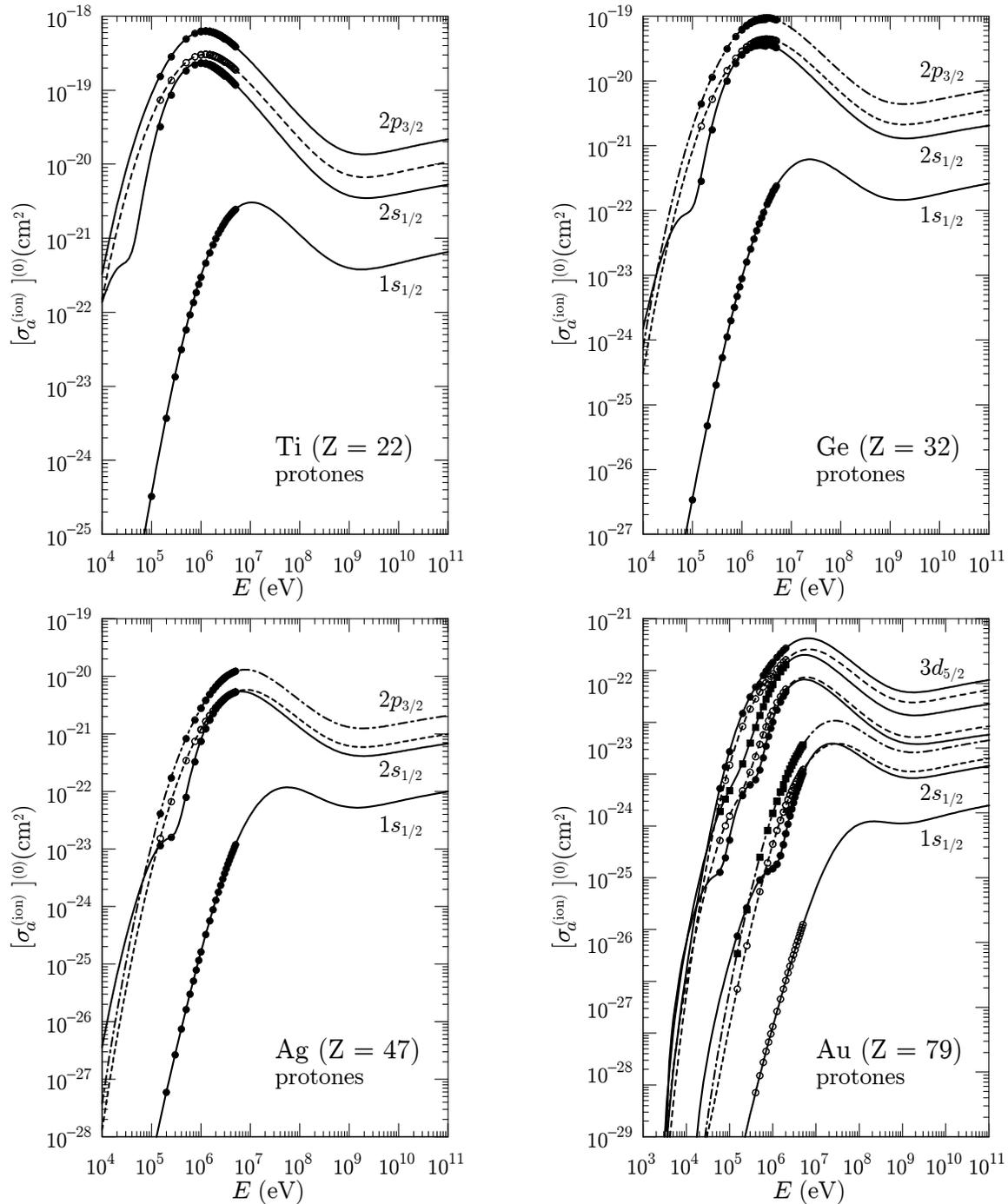
Chen y Crasemann (1985, 1989) calcularon secciones eficaces de ionización para las capas K y L de 28 elementos por impacto de protones con energías comprendidas entre 0.1 y 5 MeV, y para capas M de 15 elementos y protones con energías entre 0.06 y 2 MeV, utilizando la PWBA con un potencial DHFS. En estos cálculos se ignoró la interacción transversal, que a estas energías tiene una contribución despreciable (ver más abajo). En la Figura 3.14 comparamos los resultados obtenidos a partir de nuestro código PWACS con los valores PWBA de Chen y Crasemann (1985, 1989) para los elementos titanio, germanio, plata y oro. Nótese que ambos cálculos se realizaron con el mismo potencial, por lo que es de suponer que las pequeñas discrepancias se deben a diferencias en los algoritmos de cálculo.

La información detallada que genera el programa PWACS nos permite ilustrar aspectos básicos de la interacción. Así, por ejemplo, la Figura 3.15 muestra las secciones eficaces integradas para colisiones inelásticas de protones y electrones con átomos de oro como función de la energía cinética del proyectil. La Figura muestra también la contribución de las interacciones longitudinal y transversal. Resulta interesante observar que la contribución de la interacción transversal crece monótonamente con la energía, y se hace apreciable para energías del orden de 500 keV para electrones y de 1 GeV para protones. En general, para proyectiles de masa  $M$ , el efecto de la interacción transversal es despreciable cuando sus energías cinéticas son menores que  $\sim Mc^2$ . La dependencia en la energía de la interacción transversal (intercambio de fotones virtuales) es similar a la de otro proceso relacionado, la emisión de bremsstrahlung (ver, por ejemplo, Salvat et al., 2009).

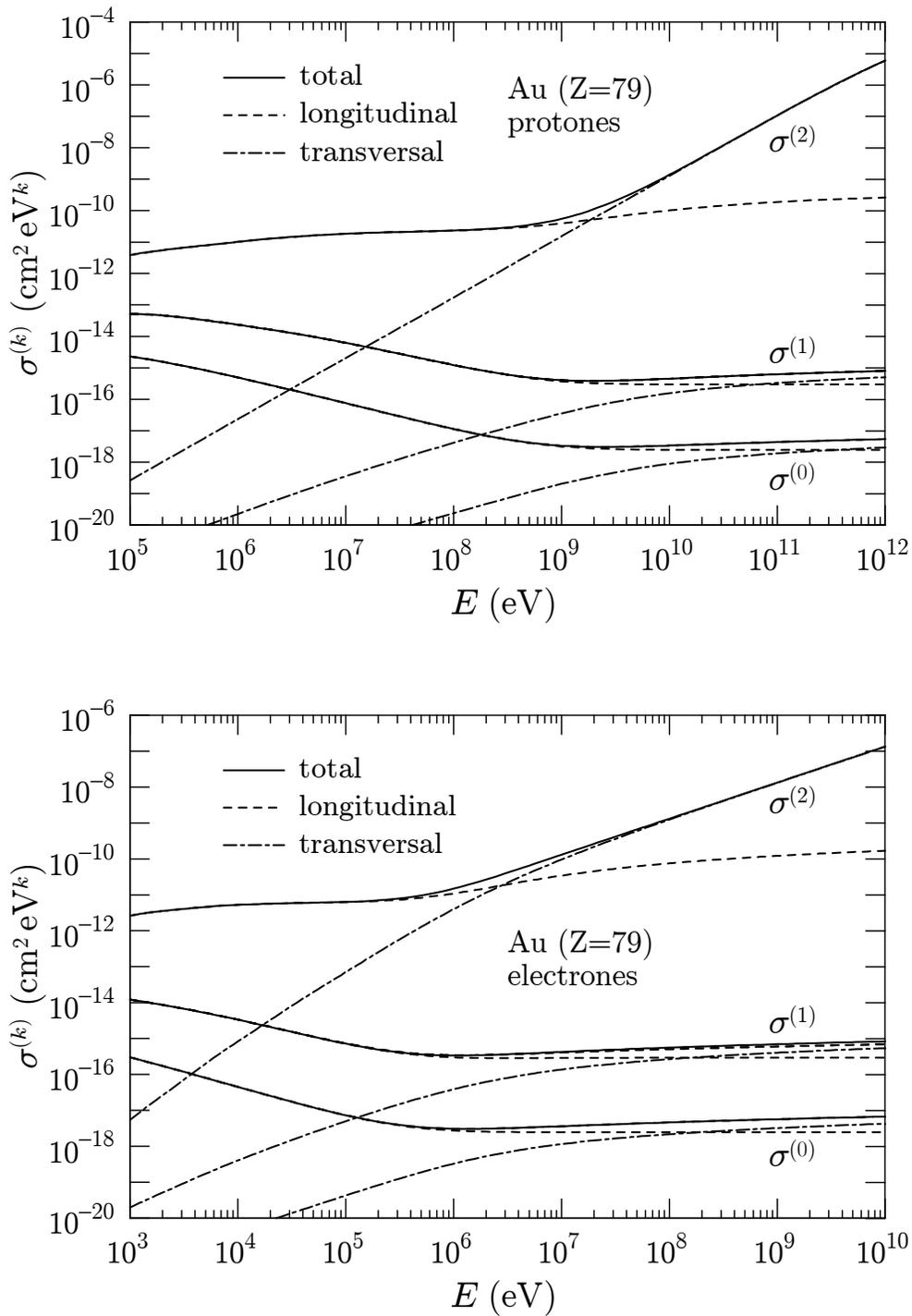
Como último ejemplo de resultados numéricos, la Figura 3.16 muestra secciones eficaces integradas para colisiones inelásticas de electrones y positrones con átomos de los gases nobles, como funciones de la energía cinética  $E$  del proyectil. La sección eficaz total,  $\sigma^{(0)}$ , para los dos tipos de partículas son prácticamente iguales para energías mayores que 1 keV. Por otro lado, para energías de hasta aproximadamente 0.5 MeV, la sección eficaz de frenado y la de dispersión de energía para positrones son mayores que para electrones. Estas diferencias se deben principalmente a que, en las colisiones ionizantes de electrones, consideramos como “proyectil” al más rápido de los dos electrones después de la colisión. Tomemos por ejemplo, el caso de una colisión próxima de un electrón con una electrón ligado distinguible, con energía de ionización  $E_a$ , que involucra una transferencia de energía  $W$  mayor que  $(E + E_a)/2$ . Después de la colisión, tenemos dos electrones con energías cinéticas  $E - W$  y  $W - E_a$ . En una colisión con la misma transferencia de energía entre dos electrones indistinguibles, llamaremos primario al electrón con la energía mayor,  $W - E_a$ , y consideraremos que la pérdida de energía es  $E - (W - E_a)$ , que es menor que  $W$ . Por lo tanto, seleccionando el más rápido de los dos electrones, reducimos de manera efectiva la pérdida de energía en las colisiones próximas, lo que afecta principalmente a las secciones eficaces integradas  $\sigma^{(1)}$  y  $\sigma^{(2)}$ .



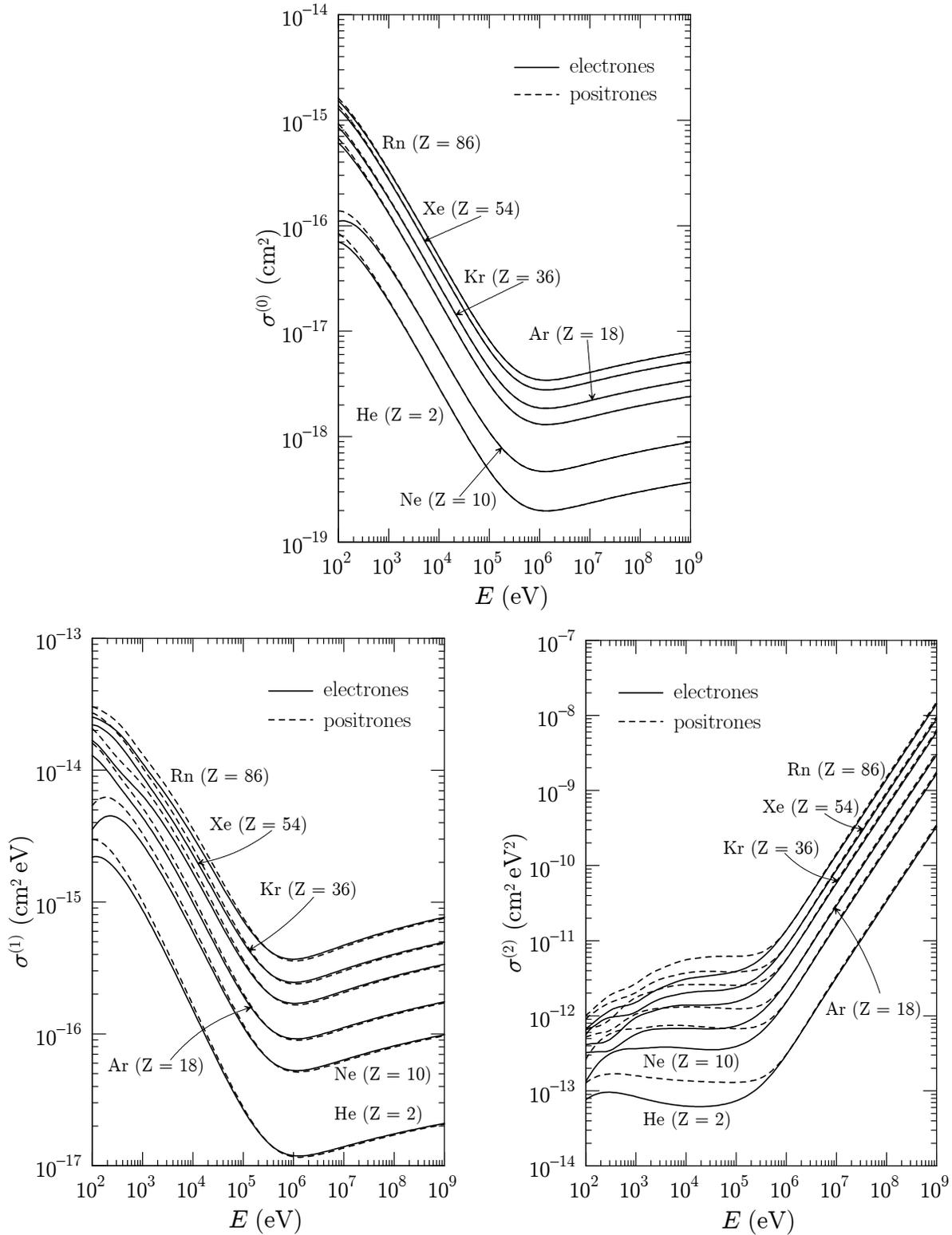
**Figura 3.13:** Secciones eficaces totales de ionización para las capas K y L del argón, el níquel, la plata y el oro por impacto de electrones como función de la energía cinética del proyectil. Las curvas continuas se han generado con el código PWACS a partir de la SEDD por impacto de electrones descrita en la Sección 2.4. Las curvas de trazos fueron calculadas considerando los electrones proyectil como distinguibles de los electrones blanco; los círculos denotan los resultados de la versión de la PWBA relativista de Scofield (1978), quien los obtuvo imponiendo condiciones similares.



**Figura 3.14:** Sección eficaz total de ionización para las capas indicadas (K, L y M) del titanio, el germanio, la plata y el oro por impacto de protones como función de la energía cinética del proyectil. Las curvas han sido generadas por el código PWACS. Los círculos se corresponden con los resultados de la versión de la PWBA de Chen y Crasemann (1985, 1989) utilizando un potencial DHFS y despreciando la contribución de la interacción transversal.



**Figura 3.15:** Secciones eficaces integradas  $\sigma^{(k)}$  para colisiones inelásticas de protones y electrones con átomos de oro como funciones de la energía cinética del proyectil. La curva a trazos y la de punto-trazo representan, respectivamente, la contribución longitudinal y transversal de la interacción.



**Figura 3.16:** Secciones eficaces integradas para colisiones inelásticas por impacto de electrones (curva continua) y positrones (curva a trazos) con átomos de gases nobles, en función de la energía cinética del proyectil.

# Capítulo 4

## Fórmulas asintóticas de Bethe

En los años treinta Bethe dedujo dos fórmulas analíticas, sencillas pero precisas, para el poder de frenado y para la sección eficaz total, que son posiblemente las fórmulas más útiles de la física de radiaciones. Su utilidad reside en el hecho de que sólo contienen, respectivamente, uno y dos parámetros, que son característicos de cada elemento o material. Estos parámetros se pueden inferir a partir de medidas experimentales precisas del poder de frenado y de la sección eficaz total. Así, las fórmulas de Bethe, con parámetros determinados de manera experimental proporcionan valores realistas de estas dos secciones eficaces para diferentes tipos de partículas cargadas, y en un amplio rango de energías, para moléculas y medios materiales para los que no se dispone de cálculos de primeros principios. A pesar de que las fórmulas de Bethe tienen un carácter asintótico (es decir, son válidas sólo para proyectiles con energías muy altas), proporcionan valores bastante realistas incluso para proyectiles con energías moderadamente bajas. El límite inferior de validez crece con el número atómico. Para el oro ( $Z = 79$ ) y elementos más pesados, las fórmulas de Bethe son aplicables para energías mayores que unos 10 keV para electrones y positrones, mayores que unos 2 MeV para muones, y por encima de 20 MeV para protones. Tradicionalmente, se ha dedicado un esfuerzo importante a determinar correcciones y a extender el rango de validez de estas fórmulas (ver, por ejemplo, Fano, 1963; Inokuti, 1971; Ahlen, 1980).

Las fórmulas asintóticas proporcionan los términos de orden más bajo de los desarrollos de  $\sigma^{(n)}(E)$  en potencias de  $E^{-1}$ . Conviene notar que para energías intermedias y bajas, pueden ser menos precisas que otras fórmulas semiempíricas alternativas; sin embargo, la ventaja de las fórmulas asintóticas es que se pueden mejorar de manera sistemática (es decir, ser extendidas a energías más bajas) añadiendo términos de orden superior en  $E^{-1}$  (ver, por ejemplo, Kim e Inokuti, 1970). En esta sección, deduciremos las fórmulas asintóticas para  $\sigma^{(k)}$  ( $k = 0, 1$  y  $2$ ) utilizando un método similar al que adoptó Fano (1963). En nuestra deducción, sin embargo, evitamos el uso de la regla de suma de Bethe, es decir,  $S_0(Q)$  no se iguala a  $Z$ . Por simplicidad, derivaremos primero las fórmulas asintóticas para excitaciones de una capa  $n_a\kappa_a$  por impacto de partículas pesadas ( $M \gg m_e$ ) que se mueven con energía cinética  $E$  mucho mayor que la energía de ionización  $E_a$ , y posteriormente el caso de colisiones con electrones y positrones.

## 4.1. Deducción de las fórmulas asintóticas

Partimos de la SEDD dada por las ecs. (2.65). Para proyectiles con  $E \gg E_a$ , las contribuciones longitudinal y transversal se expresan como

$$\frac{d^2\sigma_a^L}{dW dQ} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \frac{2m_e c^2}{WQ(Q + 2m_e c^2)} \frac{df_a(Q, W)}{dW} \quad (4.1)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_a^T}{dW dQ} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \frac{2m_e c^2 W}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} \\ &\times \left( \beta^2 - \frac{W^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \right) \frac{dg_a(Q, W)}{dW}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

respectivamente, donde hemos despreciado términos proporcionales a  $(E + Mc^2)^{-1}$ , que no contribuyen en el límite asintótico. Además, cuando  $W \ll E$ , la energía de retroceso mínima  $Q_-$  está dada por [viene de la ec. (A.14)]

$$Q_-(Q_- + 2m_e c^2) = W^2/\beta^2, \quad (4.3)$$

donde hemos despreciado los términos que contienen factores  $W/E$ . Con la misma aproximación, para pérdidas de energías pequeñas y moderadas, la máxima  $W$  permitida es [ver ec. (A.17)]

$$W_m(Q) = \beta \sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}. \quad (4.4)$$

Cuando la energía del proyectil aumenta, la energía de retroceso mínima  $Q_-$  tiende a la línea de fotones en vacío, ec. (A.22). La energía de retroceso en esta línea es

$$\begin{aligned} Q_0(W) &= m_e c^2 \left[ \sqrt{1 + \left( \frac{W}{m_e c^2} \right)^2} - 1 \right] \\ &\simeq \frac{W^2}{2m_e c^2} \left[ 1 - \left( \frac{W}{2m_e c^2} \right)^2 + 2 \left( \frac{W}{2m_e c^2} \right)^4 - \dots \right]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

En otras palabras, las colisiones inelásticas con energía de retroceso menor que  $Q_0(W)$  no son posibles. En las excitaciones más probables,  $W$  es mucho menor que  $2m_e c^2$  y  $Q_0(W) \simeq W^2/2m_e c^2$ .

### 4.1.1. Aproximación dipolar-impulso

Para deducir las fórmulas asintóticas consideramos un modelo de GOS simple en el cual las colisiones con energías de retroceso  $Q$  menores que  $E_a$  se describen utilizando la aproximación dipolar,

$$\frac{df_a(Q, W)}{dW} \approx 2|\kappa_a| \frac{df_a(W)}{dW} \quad \text{y} \quad \frac{dg_a(Q, W)}{dW} \approx 2|\kappa_a| \frac{df_a(W)}{dW}, \quad (4.6)$$

y las colisiones con  $Q > E_a$  se consideran como colisiones binarias con electrones libres y en reposo (aproximación de impulso). La aproximación “dipolar-impulso” describe correctamente las colisiones que tienen energías de retroceso muy grandes o muy pequeñas y conduce a fórmulas asintóticas sencillas para las secciones eficaces integradas. Más adelante corregiremos dichas fórmulas para dar cuenta de las diferencias entre la SEDD real (numérica) y la que resulta de la aproximación dipolar-impulso.

#### • Colisiones distantes

Cuando las energías de retroceso son menores que (aproximadamente)  $0,01 W$ , la GOS y la TGOS coinciden prácticamente con la OOS, es decir, podemos aplicar la aproximación dipolar. En este rango de  $Q$ s pequeñas, la GOS y la TGOS son prácticamente constantes con  $Q$ , por lo que podemos escribir las SEDDs de las interacciones longitudinal y transversal como

$$\frac{d^2\sigma_a^{L,d}}{dW dQ} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \frac{1}{WQ} \frac{2m_e c^2}{Q + 2m_e c^2} \frac{df_a(W)}{dW} \quad (4.7a)$$

y

$$\frac{d^2\sigma_a^{T,d}}{dW dQ} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \frac{2m_e c^2 W}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} \left( \beta^2 - \frac{W^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \right) \frac{df_a(W)}{dW}, \quad (4.7b)$$

respectivamente. Para simplificar las fórmulas finales, es conveniente multiplicar estas expresiones por los factores  $(Q + 2m_e c^2)/2m_e c^2$  y  $(Q + m_e c^2)/m_e c^2$ , respectivamente. Esto es,

$$\frac{d^2\sigma_a^{L,d}}{dW dQ} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \frac{1}{WQ} \frac{df_a(W)}{dW} \quad (4.8a)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_a^{T,d}}{dW dQ} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \frac{2(Q + m_e c^2)W}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} \\ &\times \left( \beta^2 - \frac{W^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \right) \frac{df_a(W)}{dW}. \end{aligned} \quad (4.8b)$$

Nótese que en el dominio de validez de la aproximación dipolar ( $Q$ s pequeñas), los factores introducidos son prácticamente iguales a la unidad. La ventaja de introducir estos factores consiste en que las integrales sobre  $Q$  de las expresiones (4.8) se pueden realizar de manera analítica.

Para evaluar la integral sobre  $Q$  en (4.8b), Fano (1963) considera el ángulo  $\vartheta_r$  definido por

$$\cos^2 \vartheta_r \equiv \frac{W^2/\beta^2}{Q(Q + 2m_e c^2)}. \quad (4.9)$$

Para  $Q$  pequeñas,  $\vartheta_r$  tiende al ángulo de retroceso  $\theta_r$  [ver la ec. (A.9)], que es el ángulo entre los vectores  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{q}$ . Como

$$\frac{d(\cos^2 \vartheta_r)}{dQ} = - \frac{2(Q + m_e c^2)W^2/\beta^2}{[Q(Q + 2m_e c^2)]^2} \quad (4.10)$$

tenemos que

$$\frac{d^2\sigma_a^{\text{T,d}}}{dW dQ} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ - \left\{ \frac{\beta^4 (1 - \cos^2 \vartheta_r)}{(1 - \beta^2 \cos^2 \vartheta_r)^2} \right\} \frac{d(\cos^2 \vartheta_r)}{dQ} \right] \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW}. \quad (4.11)$$

La función entre llaves es igual a 1 cuando  $\cos^2 \vartheta_r = 0$ , que corresponde a valores de  $Q$  grandes, y se anula  $\cos^2 \vartheta_r(Q_-) = 1$ . Esta función tiene un máximo en  $\cos^2 \vartheta_r = 2 - \beta^{-2}$ , cuya anchura decrece cuando la velocidad de la partícula aumenta. Para energías altas, el pico se hace tan estrecho que el cálculo numérico de la integral sobre  $Q$  de la SEDD transversal se hace difícil. Con la aproximación dipolar, eliminamos la dependencia en  $Q$  de la GOS y la TGOS, y esta integral es analítica.

Supongamos ahora que la aproximación dipolar es aplicable para energías de retroceso entre 0 y  $E_a$ . Por supuesto, esta aproximación es válida sólo para  $Q$ s pequeñas, y tendremos que corregir la SED en pérdida de energía que obtengamos para dar cuenta de la variación real de las GOSs con  $Q$ . La SED en pérdida de energía en la aproximación dipolar para excitaciones con  $Q < E_a$  se escribe como

$$\frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{d}}}{dW} = \int_{Q_-}^{E_a} \left( \frac{d^2\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{L,d}}}{dW dQ} + \frac{d^2\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{T,d}}}{dW dQ} \right) dQ = \frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{L,d}}}{dW} + \frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{T,d}}}{dW}, \quad (4.12)$$

siendo

$$\frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{L,d}}}{dW} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ \ln Q \right]_{Q_-}^{E_a} \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW} \Theta(E_a - Q_-) \quad (4.13a)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{T,d}}}{dW} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ -\frac{\beta^2 - 1}{1 - \beta^2 \cos^2 \vartheta_r} + \ln(1 - \beta^2 \cos^2 \vartheta_r) \right]_{Q_-}^{E_a} \\ &\times \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW} \Theta(E_a - Q_-) \end{aligned} \quad (4.13b)$$

las contribuciones de las interacciones longitudinal y transversal, respectivamente. La función escalón  $\Theta(E_a - Q_-)$  indica que para  $Q_- > E_a$  la SED es cero. Observamos que, para proyectiles suficientemente energéticos,  $Q_-$  es mucho menor que  $2m_e c^2$  y podemos sustituir el límite inferior de las integrales por  $Q_- \simeq W^2 / (2m_e c^2 \beta^2)$ . Además, podemos suponer  $Q_- \ll E_a$  y tomar  $\cos^2 \vartheta_r(E_a) \simeq 0$ . Estas modificaciones sólo son válidas para pérdidas de energía mucho más pequeñas que  $W_m(E_a)$ ; para  $W$ s mayores, equivalen a extender la integral para valores de  $Q$  mayores que  $E_a$ . Con esto, las expresiones (4.13) se reducen a

$$\frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{L,d}}}{dW} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \ln \left( \frac{2m_e c^2 \beta^2 E_a}{W^2} \right) \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW} \quad (4.14a)$$

y

$$\frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^{\text{T,d}}}{dW} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} [-\beta^2 - \ln(1 - \beta^2)] \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW}. \quad (4.14b)$$

La SED en pérdida de energía para interacciones distantes ( $Q < E_a$ ) viene dada por

$$\frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^d}{dW} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ \ln \left( \frac{2m_e c^2 E_a}{W^2} \right) + \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW} \Theta(E_a - Q_-). \quad (4.15)$$

Las secciones eficaces integradas para colisiones distantes, con  $Q < E_a$ , que se obtiene de la aproximación dipolar es

$$\begin{aligned} [\sigma_{a,Q < E_a}^d]^{(k)} &= \int_0^E \frac{d\sigma_{a,Q < E_a}^d}{dW} dW \\ &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ \ln (2m_e c^2 E_a) + \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] \int_0^{W_m(E_a)} W^{k-1} \frac{df_a(W)}{dW} dW \\ &\quad - \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2 \int_0^{W_m(E_a)} W^{k-1} \ln W \frac{df_a(W)}{dW} dW, \end{aligned} \quad (4.16)$$

donde  $W_m(E_a)$  es la máxima pérdida de energía permitida para  $Q = E_a$  [ec. (2.106)]. Para proyectiles muy energéticos,  $W_m(E_a)$  se hace muy grande. Como el integrando es despreciable para  $W$ s mayores que este valor, podemos sustituir el límite superior de la integral por infinito. Esta modificación sólo es lícita para los momentos de orden  $k = 0, 1$  y  $2$ ; para  $k > 2$ , el integrando puede divergir.

Por lo tanto, la sección eficaz de frenado para colisiones distantes en la aproximación dipolar vale

$$\begin{aligned} [\sigma_{a,Q < E_a}^d]^{(1)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ \ln (2m_e c^2 E_a) + \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] \int_0^\infty \frac{df_a(W)}{dW} dW \\ &\quad - \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2 \int_0^\infty \ln W \frac{df_a(W)}{dW} dW. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Utilizando la suma dipolar,

$$S_0(a; 0) = \int_0^\infty \frac{df_a(W)}{dW} dW,$$

e introduciendo el *potencial medio de excitación*,  $I_a$ , definido como

$$\ln I_a \equiv \frac{1}{S_0(a; 0)} \int_0^\infty \ln W \frac{df_a(W)}{dW} dW = \frac{L_0(a)}{S_0(a; 0)}, \quad (4.18)$$

obtenemos

$$[\sigma_{a,Q < E_a}^d]^{(1)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} S_0(a; 0) \left\{ \ln \left( \frac{2m_e c^2 E_a}{I_a^2} \right) + \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right\}. \quad (4.19)$$

La sección eficaz total para las excitaciones distantes es

$$\begin{aligned} [\sigma_{a,Q < E_a}^d]^{(0)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ \ln (2m_e c^2 E_a) + \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] \int_0^\infty \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW} dW \\ &\quad - \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2 \int_0^\infty \frac{1}{W} \ln W \frac{df(W)}{dW} dW. \end{aligned}$$

La cantidad

$$S_{-1}(a; 0) \equiv \int_0^\infty \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW} dW \quad (4.20)$$

es la integral del cuadrado del elemento de matriz dipolar [viende de la ec. (2.70)]. Introduciendo la suma (ver Inokuti, 1971)

$$L_{-1}(a) \equiv \int_0^\infty \frac{1}{W} \ln W \frac{df_a(W)}{dW} dW, \quad (4.21)$$

podemos escribir

$$[\sigma_{a,Q < E_a}^d]^{(0)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} S_{-1}(a; 0) \left\{ \ln(2m_e c^2 E_a) - 2 \frac{L_{-1}(a)}{S_{-1}(a; 0)} + \ln\left(\frac{\beta^2}{1 - \beta^2}\right) - \beta^2 \right\}. \quad (4.22)$$

De manera similar, la sección eficaz de dispersión de energía para las colisiones distantes, descritas con la aproximación dipolar, es

$$\begin{aligned} [\sigma_{a,Q < E_a}^d]^{(2)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left[ \ln(2m_e c^2 E_a) + \ln\left(\frac{\beta^2}{1 - \beta^2}\right) - \beta^2 \right] \int_0^\infty W \frac{df_a(W)}{dW} dW \\ &\quad - \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2 \int_0^\infty W \ln W \frac{df_a(W)}{dW} dW. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Introduciendo la cantidad

$$S_1(a; 0) = \int_0^\infty W \frac{df_a(W)}{dW} dW, \quad (4.24)$$

y la suma

$$L_1(a) \equiv \int_0^\infty W \ln W \frac{df_a(W)}{dW} dW, \quad (4.25)$$

a sección eficaz de dispersión de energía se puede expresar como

$$[\sigma_{a,Q < E_a}^d]^{(2)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} S_1(a; 0) \left\{ \ln(2m_e c^2 E_a) - 2 \frac{L_1(a)}{S_1(a; 0)} + \ln\left(\frac{\beta^2}{1 - \beta^2}\right) - \beta^2 \right\}. \quad (4.26)$$

### • Colisiones próximas

Para describir las interacciones con  $Q > E_a$  utilizaremos la aproximación de impulso, es decir, las trataremos como colisiones con electrones libres y en reposo. La SED para este tipo de colisiones se obtiene a partir de las ecs. (4.1) y (4.2) reemplazando la GOS y la TGOS por la función delta,  $2|\kappa_a| \delta(W - Q)$ . Integrando de manera trivial sobre  $Q$  obtenemos

$$\frac{d\sigma_{a,Q > E_a}^i}{dW} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left( \frac{1}{W^2} - \frac{(1 - \beta^2)}{2m_e c^2 W} \right) \Theta(W_{\text{ridge}} - E_a), \quad (4.27)$$

La máxima pérdida de energía permitida viene dada por,

$$W_{\text{ridge}} = \frac{2m_e c^2 \beta^2}{1 - \beta^2} R \quad \text{con} \quad R \equiv \left[ 1 + \left( \frac{m_e}{M} \right)^2 + \frac{2}{\sqrt{1 - \beta^2}} \frac{m_e}{M} \right]^{-1}. \quad (4.28)$$

Nótese que, cuando  $M = m_e$ ,  $W_{\text{ridge}} = E$ . Además, en el límite de alta energía,  $E \gg Mc^2$ ,  $W_{\text{ridge}}$  tiende a  $E$ , independientemente del valor de  $M$ . Para partículas pesadas ( $M \gg m_e$ ) con energías mucho menores que su energía en reposo  $Mc^2$ ,  $R \sim 1$  y entonces

$$W_{\text{ridge}} \simeq \frac{2m_e c^2 \beta^2}{1 - \beta^2}. \quad (4.29)$$

Por supuesto, para energías del orden de  $Mc^2$  o mayores, debemos usar la expresión completa (4.28).

La contribución de las colisiones próximas al poder de frenado es

$$\begin{aligned} [\sigma_{a,Q>E_a}^i]^{(1)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ \ln W - \frac{(1 - \beta^2) W}{2m_e c^2} \right]_{E_a}^{W_{\text{ridge}}} \\ &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ \ln \left( \frac{W_{\text{ridge}}}{E_a} \right) - \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} (W_{\text{ridge}} - E_a) \right]. \end{aligned} \quad (4.30a)$$

Para colisiones binarias con  $Q \in (E_a, W_{\text{ridge}})$ , la sección eficaz total es

$$\begin{aligned} [\sigma_{a,Q>E_a}^i]^{(0)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ -\frac{1}{W} - \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} \ln W \right]_{E_a}^{W_{\text{ridge}}} \\ &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left\{ \frac{1}{E_a} - \frac{1}{W_{\text{ridge}}} - \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} \ln \left( \frac{W_{\text{ridge}}}{E_a} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.30b)$$

Finalmente, la contribución de las colisiones próximas a la sección eficaz de dispersión es

$$\begin{aligned} [\sigma_{a,Q>E_a}^i]^{(2)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ W - \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} \frac{W^2}{2} \right]_{E_a}^{W_{\text{ridge}}} \\ &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left\{ W_{\text{ridge}} - E_a - \frac{1 - \beta^2}{4m_e c^2} [W_{\text{ridge}}^2 - E_a^2] \right\}. \end{aligned} \quad (4.30c)$$

### • Aproximación dipolar-impulso

Finalmente, si sumamos las contribuciones de las interacciones distantes y próximas, obtenemos la secciones eficaces integradas en la aproximación dipolar-impulso,

$$[\sigma_a^{\text{di}}]^{(k)} = [\sigma_{a,Q<E_a}^{\text{d}}]^{(k)} + [\sigma_{a,Q>E_a}^{\text{i}}]^{(k)}. \quad (4.31)$$

Así, tenemos

$$\begin{aligned} [\sigma_a^{\text{di}}]^{(0)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} S_{-1}(a; 0) \left\{ \ln(2m_e c^2 E_a) - 2, \frac{L_{-1}(a)}{S_{-1}(a; 0)} + \ln\left(\frac{\beta^2}{1 - \beta^2}\right) - \beta^2 \right\} \\ &+ \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left\{ \frac{1}{E_a} - \frac{1}{W_{\text{ridge}}} - \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} \ln\left(\frac{W_{\text{ridge}}}{E_a}\right) \right\}, \end{aligned} \quad (4.32a)$$

$$\begin{aligned} [\sigma_a^{\text{di}}]^{(1)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} S_0(a; 0) \left\{ \ln\left(\frac{2m_e c^2 E_a}{I_a^2}\right) + \ln\left(\frac{\beta^2}{1 - \beta^2}\right) - \beta^2 \right\} \\ &+ \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left\{ \ln\left(\frac{W_{\text{ridge}}}{E_a}\right) - \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} (W_{\text{ridge}} - E_a) \right\}, \end{aligned} \quad (4.32b)$$

y

$$\begin{aligned} [\sigma_a^{\text{di}}]^{(2)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} S_1(a; 0) \left\{ \ln(2m_e c^2 E_a) - 2 \frac{L_1(a)}{S_1(a; 0)} + \ln\left(\frac{\beta^2}{1 - \beta^2}\right) - \beta^2 \right\} \\ &+ \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left\{ W_{\text{ridge}} - E_a - \frac{1 - \beta^2}{4m_e c^2} [W_{\text{ridge}}^2 - E_a^2] \right\}. \end{aligned} \quad (4.32c)$$

Estas expresiones son las fórmulas asintóticas para las secciones eficaces integradas en la aproximación dipolar-impulso. Nótese que la SEDD correspondiente a esta aproximación es

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma_a^{\text{di}}}{dW dQ} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \frac{2m_e c^2}{WQ(Q + 2m_e c^2)} \\ &\times \left\{ \frac{Q + 2m_e c^2}{2m_e c^2} \frac{df_a(W)}{dW} \Theta(E_a - Q) + 2|\kappa_a| \delta(W - Q) \Theta(Q - E_a) \right\} \\ &+ \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \frac{2m_e c^2 W}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} \left( \beta^2 - \frac{W^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \right) \\ &\times \left\{ \frac{Q + m_e c^2}{m_e c^2} \frac{df_a(W)}{dW} + 2|\kappa_a| \delta(W - Q) \Theta(Q - E_a) \right\}, \end{aligned} \quad (4.33)$$

donde los factores que multiplican a la OOS son los que hemos introducido en las ecs. (4.8) para llegar a las fórmulas analíticas (4.15). Nótese además que en el término transversal hemos eliminado la función escalón para dar cuenta de que hemos reemplazado  $\cos^2 \vartheta_r(E_a)$  por 0. Por supuesto, si integramos la SEDD (4.33) suponiendo que la OOS es despreciable para  $W > W_m(E_a)$  y utilizando la expresión  $Q_- = W^2/(2m_e c^2 \beta^2)$  para la energía de retroceso mínima, obtenemos las expresiones (4.32).

### 4.1.2. Fórmulas asintóticas para GOSs realistas

En vez de intentar obtener las fórmulas asintóticas integrando directamente las expresiones (4.1) y (4.2), partiremos de las fórmulas (4.32) obtenidas con la aproximación

dipolar y de impulso y calcularemos las correcciones correspondientes a la diferencia entre la SEDD “real”, ecs. (4.1) y (4.2), y la de dicha aproximación, ec. (4.33). Es decir, tenemos que calcular integrales sobre el dominio cinemáticamente permitido del plano  $(Q, W)$  de la diferencia entre estas SEDDs,

$$\frac{d^2 \Delta \sigma_a}{dW dQ} = \frac{d^2 \sigma_a}{dW dQ} - \frac{d^2 \sigma_a^{\text{di}}}{dW dQ}. \quad (4.34)$$

Las secciones eficaces integradas  $\sigma_a^{(k)}$  para colisiones inelásticas de proyectiles de alta energía con los electrones de la capa activa se pueden obtener

$$\sigma_a^{(k)} = [\sigma_a^{\text{di}}]^{(k)} + \Delta \sigma_a^{(k)} \quad (4.35)$$

con

$$\Delta \sigma_a^{(k)} = \int_0^E dW W^k \int_{Q_-}^{Q_+} dQ \frac{d^2 \Delta \sigma_a}{dW dQ}. \quad (4.36)$$

Podemos escribir estas correcciones en la forma

$$\Delta \sigma_a^{(k)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} (\Delta \mathcal{X}_a^{(k)} + \mathcal{Y}_a^{(k)}), \quad (4.37)$$

donde

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{X}_a^{(k)} = & \int_0^E dW W^{k-1} \int_{Q_-}^{Q_+} dQ \frac{2m_e c^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \left\{ \frac{df_a(Q, W)}{dW} \right. \\ & \left. - \frac{Q + 2m_e c^2}{2m_e c^2} \frac{df_a(W)}{dW} \Theta(E_a - Q) - 2|\kappa_a| \delta(W - Q) \Theta(Q - E_a) \right\} \end{aligned} \quad (4.38a)$$

y

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_a^{(k)} = & \int_0^E dW W^{k-1} \int_{Q_-}^{Q_+} dQ \frac{2m_e c^2 W^2}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} \left( \beta^2 - \frac{W^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \right) \\ & \times \left\{ \frac{dg_a(Q, W)}{dW} - \frac{Q + m_e c^2}{m_e c^2} \frac{df_a(W)}{dW} - 2|\kappa_a| \delta(W - Q) \Theta(Q - E_a) \right\}. \end{aligned} \quad (4.38b)$$

Si el proyectil es suficientemente energético, podemos reemplazar el límite superior  $Q_+$  de la integral más interna por infinito, ya que dada una  $W$  dada y  $Q$ s grandes, el integrando decrece rápidamente con  $Q$ . Además, como tanto la GOS como la TGOS se reducen a una delta  $[2|\kappa_a| \delta(W - Q)]$  para  $Q$ s grandes, el límite superior de la integral sobre la pérdida de energía puede ser reemplazado por infinito. Con esto, las cantidades (4.38) ahora sólo dependen de la energía del proyectil a través del límite inferior  $Q_-$  de la integral sobre la energía de retroceso.

En la ec. (4.38a),  $Q_-$  puede sustituirse por su límite asintótico  $Q_0(W)$ , porque el integrando se mantiene finito cerca de  $Q_0(W)$ . De hecho, cuando  $W$  es pequeña, aplica la aproximación dipolar, por lo que la cantidad entre llaves en la expresión (4.38a) tiende

a cero cuando  $Q \gtrsim Q_0(W)$ ; en este caso, al reducir el límite inferior  $Q_-$  no alteramos el valor de la integral. Es decir, podemos escribir

$$\Delta \mathcal{X}_a^{(k)} = \int_0^\infty dW W^{k-1} \int_{Q_0(W)}^\infty dQ \frac{2m_e c^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \left\{ \frac{df_a(Q, W)}{dW} - \frac{Q + 2m_e c^2}{2m_e c^2} \frac{df_a(W)}{dW} \Theta(E_a - Q) - 2|\kappa_a| \delta(W - Q) \Theta(Q - E_a) \right\}. \quad (4.39a)$$

Vemos que, para proyectiles suficientemente energéticos,  $\mathcal{X}_a^{(k)}$  es una cantidad integrada característica de la GOS, independiente de la energía del proyectil. Desafortunadamente, el integrando de la ec. (4.38b),

$$\mathcal{Y}_a^{(k)} = \int_0^\infty dW W^{k-1} \int_{Q_-}^\infty dQ \frac{2m_e c^2 W^2}{[Q(Q + 2m_e c^2) - W^2]^2} \left( \beta^2 - \frac{W^2}{Q(Q + 2m_e c^2)} \right) \times \left\{ \frac{dg_a(Q, W)}{dW} - \frac{Q + m_e c^2}{m_e c^2} \frac{df_a(W)}{dW} - 2|\kappa_a| \delta(W - Q) \Theta(Q - E_a) \right\}, \quad (4.39b)$$

diverge en  $Q_0(W)$  y, además, la dependencia en  $\beta$  a través de  $Q_-$  no se puede eliminar. Fano (1954, 1963) derivó fórmulas asintóticas para  $\sigma^{(0)}$  y  $\sigma^{(1)}$  utilizando la aproximación dipolar para las interacciones transversales distantes, lo que equivale a despreciar las cantidades  $\mathcal{Y}_a^{(k)}$ . En lo que sigue, con el fin de obtener fórmulas asintóticas compatibles con las existentes en la literatura, ignoraremos estas cantidades, considerando que forman parte de las correcciones de capas (ver la Sección 4.3). Nótese que, para las capas que más contribuyen a la SED en pérdida de energía (capas débilmente ligadas), es válida la aproximación dipolar y, por lo tanto, las cantidades  $\mathcal{Y}_a^{(k)}$  son pequeñas. Por otro lado, en el caso de proyectiles no relativistas, con  $\beta \sim 0$ , no se dan interacciones transversales, y entonces,  $\mathcal{Y}_a^{(k)} = 0$ .

Ahora las fórmulas asintóticas para  $\sigma_a^{(k)}$  se pueden obtener sumando las cantidades (4.37) (con  $\mathcal{Y}_a^{(k)} = 0$ ) a las expresiones (4.32). Esto es,

$$\sigma_a^{(0)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ S_{-1}(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] + \mathcal{X}_a^{(0)} \right\}, \quad (4.40a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_a^{(1)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ 2S_0(a; 0) \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I_a} \right) + S_0(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + 2|\kappa_a| \left[ \ln \left( \frac{W_{\text{ridge}}}{2m_e c^2} \right) - \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} W_{\text{ridge}} \right] + \mathcal{X}_a^{(1)} \right\} \\ &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ 2S_0(a; 0) \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I_a} \right) + [S_0(a; 0) + 2|\kappa_a|] \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + 2|\kappa_a| \left[ \ln R + \beta^2(1 - R) \right] + \mathcal{X}_a^{(1)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.40b)$$

y

$$\begin{aligned}\sigma_a^{(2)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ S_1(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] + 2|\kappa_a| \left[ W_{\text{ridge}} - \frac{1 - \beta^2}{4m_e c^2} W_{\text{ridge}}^2 \right] + \mathcal{X}_a^{(2)} \right\} \\ &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ S_1(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] + 2|\kappa_a| \frac{m_e c^2 \beta^2}{1 - \beta^2} R (2 - \beta^2 R) + \mathcal{X}_a^{(2)} \right\}, \quad (4.40c)\end{aligned}$$

donde  $R$  está definida por la ec. (4.28), y

$$\begin{aligned}\mathcal{X}_a^{(0)} &= S_{-1}(a; 0) \ln (2m_e c^2 E_a) - 2L_{-1}(a) + 2|\kappa_a| \frac{1}{E_a} + \Delta\mathcal{X}_a^{(0)} \\ &\quad - 2|\kappa_a| \left[ \frac{1}{W_{\text{ridge}}} + \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} \ln \left( \frac{W_{\text{ridge}}}{E_a} \right) \right], \quad (4.41a)\end{aligned}$$

$$\mathcal{X}_a^{(1)} = S_0(a; 0) \ln \left( \frac{E_a}{2m_e c^2} \right) + 2|\kappa_a| \ln \left( \frac{2m_e c^2}{E_a} \right) + \Delta\mathcal{X}_a^{(1)} + 2|\kappa_a| \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} E_a, \quad (4.41b)$$

y

$$\mathcal{X}_a^{(2)} = S_1(a; 0) \ln (2m_e c^2 E_a) - 2L_1(a) - 2|\kappa_a| E_a + \Delta\mathcal{X}_a^{(2)} + 2|\kappa_a| \frac{1 - \beta^2}{4m_e c^2} E_a^2. \quad (4.41c)$$

Las cantidades  $S_{k-1}(a; 0)$ ,  $L_{k-1}(a)$  ( $k = 0, 1, \text{ y } 2$ ) y  $I_a$  en estas fórmulas son constantes, es decir, independientes de la energía del proyectil. En el límite de alta energía, los términos proporcionales a  $(1 - \beta^2)$  se pueden despreciar, porque son del orden de  $(E + Mc^2)^{-1}$ , con lo que las cantidades (4.41) también se vuelven independientes de  $E$ ,

$$\mathcal{X}_a^{(0)} = S_{-1}(a; 0) \ln (2m_e c^2 E_a) - 2L_{-1}(a) + 2|\kappa_a| \frac{1}{E_a} + \Delta\mathcal{X}_a^{(0)}, \quad (4.42a)$$

$$\mathcal{X}_a^{(1)} = \left[ S_0(a; 0) - 2|\kappa_a| \right] \ln \left( \frac{E_a}{2m_e c^2} \right) + \Delta\mathcal{X}_a^{(1)}, \quad (4.42b)$$

y

$$\mathcal{X}_a^{(2)} = S_1(a; 0) \ln (2m_e c^2 E_a) - 2L_1(a) - 2|\kappa_a| E_a + \Delta\mathcal{X}_a^{(2)}. \quad (4.42c)$$

De nuevo, los términos que hemos despreciado pasan a formar parte de la corrección de capas (ver Sección 4.3).

Las ecuaciones (4.40) y (4.42) contienen términos que provienen tanto de las colisiones distantes como de las próximas; estos términos son proporcionales a  $S_{k-1}(a; 0)$  o  $L_{k-1}(a)$  y a  $2|\kappa_a|$ , respectivamente. En la deducción convencional de la fórmula de Bethe para el poder de frenado (Fano, 1963), se hace uso explícito de la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn,  $S_0(a; 0) = 2|\kappa_a|$ . Supongamos, por un momento, que esta regla de suma se cumple (las desviaciones son pequeñas, excepto para las capas más internas

de elementos pesados), y consideremos proyectiles pesados con velocidades moderadamente altas, tales que  $E \ll Mc^2$ , para los que  $R \sim 1$ . En estas circunstancias, la ec. (4.40b) toma la forma como

$$\sigma_a^{(1)} \simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ 2S_0(a; 0) \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I_a} \right) + [S_0(a; 0) + 2|\kappa_a|] \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] + \mathcal{X}_a^{(1)} \right\}. \quad (4.43)$$

El segundo término de la derecha contiene toda la dependencia en la energía de la expresión entre llaves. Es claro que las colisiones distantes y las colisiones binarias (próximas) contribuyen de igual modo a este término, y tienen, por lo tanto, el mismo poder de frenado. Esta coincidencia se conoce como la “regla de equipartición”, y sólo aplica cuando los proyectiles son partículas cargadas mucho más pesadas que el electrón (ver la siguiente Sección). La regla de equipartición tampoco se cumple en el caso de sólidos, debido principalmente a que el efecto de densidad de Fermi inhibe las interacciones distantes de proyectiles relativistas.

### 4.1.3. Fórmulas asintóticas para proyectiles con masas moderadas

En la deducción de las fórmulas (4.42) hemos supuesto que las ecs. (4.1) y (4.2) describen la totalidad de las interacciones. Sin embargo, estas fórmulas no llevan a la SED en  $W$  correcta para colisiones próximas con  $Q$ s muy grandes. La expresión exacta de la SED para colisiones con electrones libres y en reposo es (consultar la Sección 5 de Bote y Salvat, 2010)

$$\frac{d\sigma_{\text{free}}}{dW} \simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \frac{1}{W^2} F_{\text{rel}}(W) \quad (4.44)$$

con

$$F_{\text{rel}}(W) = 1 - \left( \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} + \frac{\sqrt{1 - \beta^2}}{Mc^2} \right) W + \frac{1 - \beta^2}{2M^2 c^4} W^2. \quad (4.45)$$

La expresión (4.27) sólo concuerda con este resultado cuando  $m_e/M \sim 0$ . Es decir, las fórmulas (4.42) sólo son válidas para proyectiles mucho más pesados que el electrón, siempre que la energía cinética del proyectil  $E$  no sea mucho mayor que la energía en reposo,  $Mc^2$ . Para corregir este hecho, debemos sustituir las secciones eficaces integradas,  $\sigma_{a, Q > E_a}^{(k)}$ , por las que resultan de la SED (4.44), que son un poco más complicadas (Bote y Salvat, 2010). En el límite de alta energía, cuando  $W_{\text{ridge}} \gg E_a$  y  $\beta^2 \sim 1$ , tenemos que

$$\begin{aligned} \sigma_{a, Q > E_a}^{(0)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ -\frac{1}{W} - \left( \frac{1 - \beta^2}{2m_e c^2} + \frac{\sqrt{1 - \beta^2}}{Mc^2} \right) \ln W + \frac{1 - \beta^2}{2M^2 c^4} W \right]_{E_a}^{W_{\text{ridge}}} \\ &\simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left\{ \frac{1}{E_a} + \frac{\beta^2}{m_e c^2} \frac{m_e^2}{M^2} R \right\}, \end{aligned} \quad (4.46a)$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{a,Q>E_a}^{(1)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ \ln W - \left( \frac{1-\beta^2}{2m_e c^2} + \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{M c^2} \right) W + \frac{1-\beta^2}{2M^2 c^4} \frac{W^2}{2} \right]_{E_a}^{W_{\text{ridge}}} \\
&\simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left\{ \ln \left( \frac{2m_e c^2 \beta^2}{(1-\beta^2)E_a} R \right) - \beta^2 R \right. \\
&\quad \left. - \frac{2\beta^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \frac{m_e}{M} R + \frac{\beta^4}{1-\beta^2} \frac{m_e^2}{M^2} R^2 \right\} \quad (4.46b)
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
\sigma_{a,Q>E_a}^{(2)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ W - \left( \frac{1-\beta^2}{2m_e c^2} + \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{M c^2} \right) \frac{W^2}{2} + \frac{1-\beta^2}{2M^2 c^4} \frac{W^3}{3} \right]_{E_a}^{W_{\text{ridge}}} \\
&\simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left\{ \frac{1-\beta^2}{4m_e c^2} E_a^2 - E_a + \frac{m_e c^2 \beta^2}{1-\beta^2} R(2-\beta^2 R) \right. \\
&\quad \left. - m_e c^2 \frac{2\beta^4}{(1-\beta^2)^{3/2}} \frac{m_e}{M} R^2 + m_e c^2 \frac{4\beta^6}{3(1-\beta^2)^2} \frac{m_e^2}{M^2} R^3 \right\} \quad (4.46c)
\end{aligned}$$

Para dar cuenta de la corrección debida a la masa finita del proyectil, basta sumar a las fórmulas asintóticas (4.40) las diferencias entre las expresiones (4.46) y las que se obtienen de las (4.30) en el límite de muy alta energía. Estas diferencias se reducen a los términos que contienen el factor  $M^{-1}$  en (4.46). Sumando estos términos a las expresiones (4.40), obtenemos las siguientes fórmulas asintóticas,

$$\sigma_a^{(0)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ S_{-1}(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 \right] + 2|\kappa_a| \frac{\beta^2}{m_e c^2} \frac{m_e^2}{M^2} R + \mathcal{X}_a^{(0)} \right\}, \quad (4.47a)$$

$$\begin{aligned}
\sigma_a^{(1)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ 2S_0(a; 0) \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I_a} \right) + [S_0(a; 0) + 2|\kappa_a|] \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 \right] \right. \\
&\quad \left. + 2|\kappa_a| \left[ \ln R + \beta^2(1-R) - \frac{2\beta^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \frac{m_e}{M} R + \frac{\beta^4}{1-\beta^2} \frac{m_e^2}{M^2} R^2 \right] + \mathcal{X}_a^{(1)} \right\}, \quad (4.47b)
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
\sigma_a^{(2)} &= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ S_1(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 \right] + 2|\kappa_a| m_e c^2 \left[ \frac{\beta^2}{1-\beta^2} R(2-\beta^2 R) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{2\beta^4}{(1-\beta^2)^{3/2}} \frac{m_e}{M} R^2 + \frac{4\beta^6}{3(1-\beta^2)^2} \frac{m_e^2}{M^2} R^3 \right] + \mathcal{X}_a^{(2)} \right\}. \quad (4.47c)
\end{aligned}$$

Estas fórmulas son válidas para proyectiles con masa  $M$  arbitraria. Nótese que, a excepción del electrón y del positrón,  $M \gg m_e$  y la corrección de masa finita a la sección

eficaz total (4.47a) es despreciable. En el caso del poder de frenado, y de la dispersión de energía, la corrección es apreciable sólo para proyectiles con energías cinéticas mucho mayores que su energía en reposo,  $Mc^2$ .

#### 4.1.4. Fórmulas asintóticas para electrones

Para describir las interacciones de electrones debemos tener en cuenta los efectos de intercambio, que resultan de la indistinguibilidad del proyectil y los electrones atómicos. En el marco de la PWBA, es difícil dar cuenta de estos efectos, porque las ondas planas del proyectil no son ortogonales a los orbitales atómicos (para un estudio más detallado, véase Bote y Salvat, 2010). Siguiendo la práctica habitual, (ver, por ejemplo, Rohrlich y Carlson, 1954) consideramos que, para electrones de alta energía, las interacciones distantes no son sensibles a los efectos de intercambio. Las SED en pérdida de energía para las colisiones próximas (aproximación de impulso) viene dada por la fórmula de Møller (1932),

$$\frac{d\sigma_{\text{Møller}}}{dW} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} F_{\text{Møller}}(W), \quad (4.48)$$

donde

$$F_{\text{Møller}}(W) = 1 + \left( \frac{W}{E - W} \right)^2 - \frac{(1 - b_0)W}{E - W} + \frac{b_0 W^2}{E^2} \quad (4.49)$$

con

$$b_0 = \left( \frac{E}{E + m_e c^2} \right)^2 = \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 = \left( 1 - \sqrt{1 - \beta^2} \right)^2. \quad (4.50)$$

siendo  $\gamma$  la energía total del electrón proyectil en unidades de su energía en reposo, ec. (A.3).

Las contribuciones de las colisiones próximas a las secciones eficaces integradas  $\sigma_{a,Q>E_a}^{(k)}(e^-)$  se obtienen integrando la SED de Møller. Para energías tales que  $E_a \ll W_{\text{max}} \simeq E/1$ , resulta que

$$\begin{aligned} \sigma_{a,Q>E_a}^{(0)}(e^-) &= \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ -\frac{1}{W} + \frac{1}{E - W} + \frac{1 - b_0}{E} \ln \left( \frac{E - W}{W} \right) + \frac{b_0 W}{(E)^2} \right]_{E_a}^{E/2} \\ &\simeq \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \frac{1}{E_a}, \end{aligned} \quad (4.51a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{a,Q>E_a}^{(1)}(e^-) &= \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ \ln W + \frac{E}{E - W} + (2 - b_0) \ln(E - W) + \frac{b_0 W^2}{2(E)^2} \right]_{E_a}^{E/2} \\ &\simeq \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ \ln \left( \frac{E}{2E_a} \right) + 1 - (2 - b_0) \ln 2 + \frac{b_0}{8} \right] \end{aligned} \quad (4.51b)$$

y

$$\begin{aligned}\sigma_{a,Q>E_a}^{(2)}(e^-) &= \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ (3-b_0)W + \frac{E^2}{E-W} + (3-b_0)E \ln(E-W) + \frac{b_0 W^3}{3E^2} \right]_{E_a}^{E/2} \\ &\simeq \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| E \left[ \frac{5}{2} - (3-b_0) \ln 2 - \frac{11b_0}{24} \right].\end{aligned}\quad (4.51c)$$

Sumando las contribuciones de las colisiones distantes y de las próximas, obtenemos las secciones eficaces integradas para electrones en la aproximación dipolar-impulso. El siguiente paso consiste en calcular las correcciones que resulten de considerar una GOS realista, y de tener en cuenta los efectos de intercambio, para energías de retroceso  $Q$  intermediadas. Un cálculo similar al de la Sección 4.1.2 conduce a las siguientes fórmulas asintóticas,

$$\sigma_a^{(0)}(e^-) = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \left\{ S_{-1}(a; Q) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 \right] + \mathcal{X}_a^{(0)} \right\}, \quad (4.52a)$$

$$\begin{aligned}\sigma_a^{(1)}(e^-) &= \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \left\{ 2S_0(a; 0) \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I_a} \right) + S_0(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + 2|\kappa_a| \left[ \ln \left( \frac{E}{2m_e c^2} \right) + 1 - (3-b_0) \ln 2 + \frac{b_0}{8} \right] + \mathcal{X}_a^{(1)} \right\},\end{aligned}\quad (4.52b)$$

y

$$\begin{aligned}\sigma_a^{(2)}(e^-) &= \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \left\{ S_1(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 \right] + 2|\kappa_a| E \left[ \frac{5}{2} - (3-b_0) \ln 2 - \frac{11b_0}{24} \right] \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{X}_a^{(2)} \right\}.\end{aligned}\quad (4.52c)$$

Las cantidades  $\mathcal{X}_a^{(k)}$  vienen dadas por las mismas expresiones (4.42) que en el caso de partículas pesadas, pero con las cantidades  $\Delta\mathcal{X}_a^{(k)}$  reemplazadas por [viene de las ecs. (4.34) a (4.37)]

$$\Delta\mathcal{X}_a^{(k)}(e^-) = \left( \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \right)^{-1} \lim_{E \rightarrow \infty} \int_0^{W_{\max}} dW W^k \int_{Q_-}^{Q_+} \left[ \frac{d^2 \sigma_a(e^-)}{dQ dW} - \frac{d^2 \sigma_a^{\text{di}}(e^-)}{dQ dW} \right], \quad (4.53)$$

donde el factor entre corchetes es la diferencia entre la SEDD para electrones (ver la Sección 6 de Bote y Salvat, 2010) y la que resulta de la aproximación dipolar-impulso (para electrones). Como las integrales (4.53) son difíciles de calcular, y las cantidades  $\Delta\mathcal{X}_a^{(k)}(e^-)$  son relativamente pequeñas, en adelante utilizaremos los valores  $\Delta\mathcal{X}_a^{(k)}$  que obtuvimos para partículas pasadas, y consideraremos las diferencias entre éstas últimas y las reales, como parte de las correcciones de capas (ver la Sección 4.3).

### 4.1.5. Fórmulas asintóticas para positrones

En el caso de colisiones con positrones, seguiremos un esquema de cálculo completamente análogo al que hemos utilizado con los electrones. En la aproximación de impulso, la SED en pérdida de energía correcta para las interacciones próximas con  $Q > E_a$  viene dada por la fórmula de Bhabha (1936),

$$\frac{d\sigma_{\text{Bhabha}}}{dW} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \frac{1}{W^2} F_{\text{Bhabha}}(W), \quad (4.54)$$

donde

$$F_{\text{Bhabha}}(W) = 1 - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \left(\frac{W}{E}\right)^2 - b_3 \left(\frac{W}{E}\right)^3 + b_4 \left(\frac{W}{E}\right)^4, \quad (4.55)$$

con

$$\begin{aligned} b_1 &= \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \frac{2(\gamma+1)^2-1}{\gamma^2-1}, \\ b_2 &= \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \frac{3(\gamma+1)^2+1}{(\gamma+1)^2}, \\ b_3 &= \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \frac{2\gamma(\gamma-1)}{(\gamma+1)^2}, \\ b_4 &= \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \frac{(\gamma-1)^2}{(\gamma+1)^2}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Las contribuciones de las colisiones proximas a las secciones eficaces integradas para proyectiles de alta energía (para los que  $E_a \ll W_{\text{max}} = E$ ) se expresan

$$\begin{aligned} \sigma_{a,Q>E_a}^{(0)} &= \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ -\frac{1}{W} - b_1 \frac{\ln W}{E} + b_2 \frac{W}{E^2} - b_3 \frac{W^2}{2E^3} + b_4 \frac{W^3}{3E^4} \right]_{E_a}^E \\ &\simeq \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \frac{1}{E_a}, \end{aligned} \quad (4.57a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{a,Q>E_a}^{(1)} &= \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ \ln W - b_1 \frac{W}{E} + b_2 \frac{W^2}{2E^2} - b_3 \frac{W^3}{3E^3} + b_4 \frac{W^4}{4E^4} \right]_{E_a}^E \\ &\simeq \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ \ln \left(\frac{E}{E_a}\right) - b_1 + \frac{b_2}{2} - \frac{b_3}{3} + \frac{b_4}{4} \right], \end{aligned} \quad (4.57b)$$

y

$$\begin{aligned} \sigma_{a,Q>E_a}^{(2)} &= \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| \left[ W - b_1 \frac{W^2}{2E} + b_2 \frac{W^3}{3E^2} - b_3 \frac{W^4}{4E^3} + b_4 \frac{W^5}{5E^4} \right]_{E_a}^E \\ &\simeq \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} 2|\kappa_a| E \left[ 1 - \frac{b_1}{2} + \frac{b_2}{3} - \frac{b_3}{4} + \frac{b_4}{5} \right]. \end{aligned} \quad (4.57c)$$

Utilizando estos resultados, obtenemos las siguientes fórmulas asintóticas para positrones,

$$\sigma_{a,+}^{(0)} = \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \left\{ S_{-1}(a; Q) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] + \mathcal{X}_a^{(0)} \right\}, \quad (4.58a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{a,+}^{(1)} = & \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \left\{ 2S_0(a; 0) \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I_{a,1}} \right) + S_0(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] \right. \\ & \left. + 2|\kappa_a| \left[ \ln \left( \frac{E}{2m_e c^2} \right) - b_1 + \frac{b_2}{2} - \frac{b_3}{3} + \frac{b_4}{4} \right] + \mathcal{X}_a^{(1)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.58b)$$

y

$$\begin{aligned} \sigma_{a,+}^{(2)} = & \frac{2\pi e^4}{m_e v^2} \left\{ S_1(a; 0) \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] + 2|\kappa_a| E \left[ 1 - \frac{b_1}{2} + \frac{b_2}{3} - \frac{b_3}{4} + \frac{b_4}{5} \right] \right. \\ & \left. + \mathcal{X}_a^{(2)} \right\}. \end{aligned} \quad (4.58c)$$

Finalmente, como en el caso de electrones, supondremos que los parámetros  $\mathcal{X}_a^{(k)}$  son los mismos que para las partículas pesadas, y consideraremos cualquier diferencia entre ambos como parte de las correcciones de capas.

## 4.2. Compendio de fórmulas asintóticas

Las secciones eficaces integradas para átomos o iones se obtienen sumando la contribución de cada capa electrónica individual [ver ec. (3.24)],

$$\sigma^{(k)} = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} \left[ [\sigma_a^{\text{cont}}]^{(k)} + \sum_{b \neq a} \sigma_{ba}^{\text{exc}} (E_a + \epsilon_{n_b \kappa_b})^k \right]. \quad (4.59)$$

Para facilitar su uso, y clarificar su contenido físico, a continuación resumiremos las fórmulas asintóticas que acabamos de deducir. Expresaremos las fórmulas finales de forma lo más parecida posible a las fórmulas “convencionales” utilizadas en la literatura, para facilitar la comparación y poner de manifiesto las diferencias.

### 4.2.1. Sección eficaz total

La fórmula asintótica para la sección eficaz total es

$$\sigma^{(0)} \simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ M_{\text{tot}}^2 \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] + C_{\text{tot}} \right\}$$

$$= \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left\{ M_{\text{tot}}^2 \left[ \ln(\gamma^2 - 1) - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \right] + C_{\text{tot}} \right\}, \quad (4.60)$$

donde

$$M_{\text{tot}}^2 = \sum \frac{q_a}{2|\kappa_a|} S_{-1}(a; 0) = \int_0^\infty \frac{dW}{W} \frac{df(W)}{dW} \quad (4.61)$$

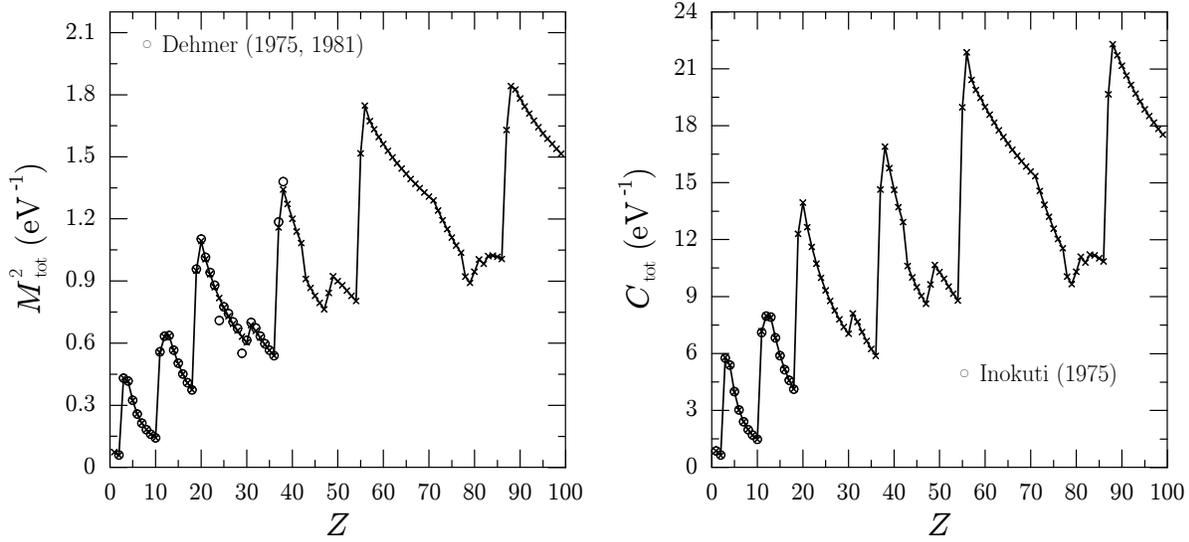
es el cuadrado del elemento de matriz dipolar del átomo (Inokuti, 1971), y

$$C_{\text{tot}} = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} \mathcal{X}_a^{(0)}. \quad (4.62)$$

Vemos que la sección eficaz total  $\sigma^{(0)}$  depende sólo de la velocidad y de la carga del proyectil, pero no de su masa. Así, protones, antiprotones, electrones y positrones moviéndose con la misma velocidad tienen la misma sección eficaz total. No sucede lo mismo para el poder de frenado y la dispersión de energía, que son distintos para partículas diferentes con la misma velocidad. Los parámetros  $M_{\text{tot}}^2$  y  $C_{\text{tot}}$  son constantes independientes de la energía y características de cada átomo o ion. La Figura 4.1 muestra los valores de estos parámetros para átomos libres, calculados a partir de nuestras GOSs numéricas. En la misma figura también se indican los valores de Dehmer et al. (1971) e Inokuti et al. (1971) obtenidos de un cálculo no-relativista utilizando un potencial de tipo Hartree-Slater para los elementos entre el hidrógeno ( $Z = 1$ ) y el estroncio ( $Z = 38$ ). El acuerdo entre ambos cálculos es bueno, porque para estos elementos los efectos relativistas son poco importantes. De todas formas, conviene recordar que modelo de estructura atómica que hemos adoptado (electrones independientes en el potencial DHFS) es demasiado simple como para esperar que la fórmula asintótica con estas constantes dé secciones eficaces totales realistas. Aunque la sección eficaz total es muy sensible al estado de agregación, la fórmula (4.60), con los valores apropiados para los parámetros  $M_{\text{tot}}^2$  y  $C_{\text{tot}}$ , es válida también para moléculas y sólidos (ver, por ejemplo, Fernández-Varea et al., 1992).

La Figura 4.2 muestra la dependencia en la energía de los diferentes factores que aparecen en la ec. (4.60) como función de la energía cinética reducida del proyectil  $\gamma - 1 = E/Mc^2$ . Observamos que mientras que el factor entre corchetes,  $\ln(\gamma^2 - 1) - (\gamma^2 - 1)/\gamma^2$ , crece monótonamente con la energía  $\gamma$ ,  $\beta^{-2}$  decrece monótonamente hasta saturar en uno. Por lo tanto, para  $\gamma \geq 10$ , la variación de la sección eficaz total con la energía se debe de manera casi exclusiva al término entre corchetes.

La fórmula (4.60) es análoga a la deducida por Fano en su trabajo de 1954, en el cual encuentra una expresión asintótica para colisiones ionizantes utilizando una GOS no-relativista para describir las interacciones longitudinales, y la aproximación dipolar para las interacciones distantes. En 1930 Bethe obtuvo también una fórmula asintótica análoga a la nuestra, aunque en este caso completamente no-relativista, para el átomo de hidrógeno. Como indica Fano, si representamos la sección eficaz total como una función de la cantidad  $\ln[\beta^2/(1 - \beta^2)] - \beta^2$ , obtenemos una línea recta, la pendiente de la cual es  $M_{\text{tot}}^2$  y su ordenada en el origen  $C_{\text{tot}}$ . Esta manera de representar la sección eficaz total, conocida como “Fano plot” se ha empleado frecuentemente tanto para contrastar



**Figura 4.1:** Parámetros de la fórmula asintótica (4.60) para la sección eficaz total de colisiones inelásticas con átomos, calculados a partir de las GOSs numéricas (cruces). Los círculos representan valores calculados por Dehmer et al. (1975), Inokuti et al. (1981), e Inokuti et al. (1975), utilizando un modelo atómico similar.

la validez de la PWBA, como para estudiar la consistencia de datos experimentales (ver, por ejemplo, Inokuti, 1971).

Finalmente, y para completar nuestro estudio de la sección eficaz total, vamos a proceder a obtener el límite no-relativista de la expresión (4.60), que ha sido estudiado por Platzman, Inokuti y otros autores (ver, por ejemplo, Inokuti et al., 1967; Inokuti, 1971). El límite no relativista de la expresión entre corchetes es  $\ln(2E/m_e c^2)$ , y por lo tanto

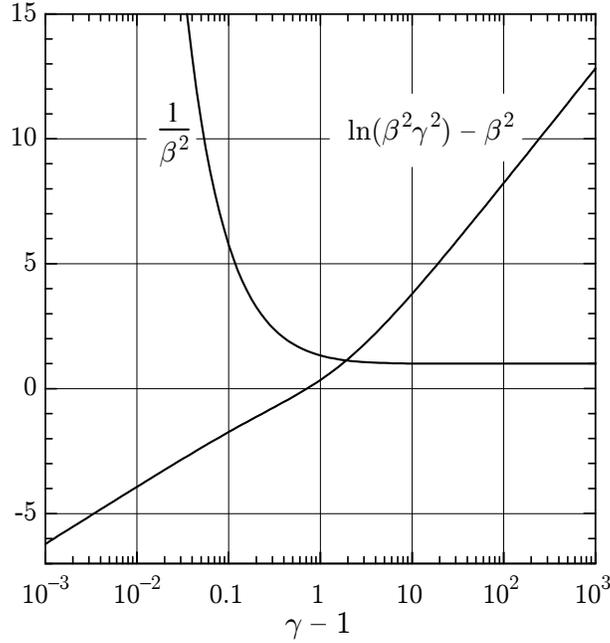
$$\sigma_{\text{non-rel.}}^{(0)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ M_{\text{tot}}^2 \ln \left( \frac{2E}{m_e c^2} \right) + C_{\text{tot}} \right\}. \quad (4.63)$$

Para reducir esta expresión a la forma habitual (Inokuti et al., 1967), introducimos la constante  $c_{\text{tot}}$ , definida como

$$C_{\text{tot}} = M_{\text{tot}}^2 \ln \left( \frac{c_{\text{tot}} 2m_e c^2}{\text{Ry}} \right), \quad (4.64)$$

donde  $\text{Ry} = m_e e^4 / 2\hbar^2 = 13,606 \text{ eV}$  es la energía de Rydberg. Obtenemos así la familiar expresión de la sección eficaz total inelástica no relativista,

$$\sigma_{\text{non-rel.}}^{(0)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} M_{\text{tot}}^2 \ln \left( \frac{4E c_{\text{tot}}}{\text{Ry}} \right). \quad (4.65)$$



**Figura 4.2:** Dependencia en la energía de los factores que aparecen en la fórmula asintótica para la sección eficaz total, ec. (4.60). La cantidad  $\gamma - 1$  es la energía cinética del proyectil en unidades de su energía en reposo.

### 4.2.2. Sección eficaz de frenado

La sección eficaz de frenado se puede escribir como

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} \simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left\{ 2S_0(0) \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I} \right) + Z f(\gamma) \right. \\ \left. + [S_0(0) - Z] \left[ \ln(\gamma^2 - 1) - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \right] + \Delta D_1 \right\}, \end{aligned} \quad (4.66)$$

donde  $I$  es el potencial medio de excitación, definido como

$$S_0(0) \ln I = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} S_0(a; 0) \ln I_a = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} L_0(a) = \int_0^\infty \ln W \frac{df(W)}{dW} dW, \quad (4.67)$$

y

$$\Delta D_1 = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} \mathcal{X}_a^{(1)}. \quad (4.68)$$

La función dependiente de la energía  $f(\gamma)$  es característica de cada tipo de proyectil.

Tenemos que

$$\begin{aligned}
f(\gamma) &= 2 \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 \right] + \left[ \ln R + \beta^2(1-R) - \frac{2\beta^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \frac{m_e}{M} R + \frac{\beta^4}{1-\beta^2} \frac{m_e^2}{M^2} R^2 \right] \\
&= 2 \left[ \ln(\gamma^2 - 1) - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \right] \\
&\quad + \left[ \ln R + \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} (1-R) - 2 \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} \frac{m_e}{M} R + \left( \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} \right)^2 \frac{m_e^2}{M^2} R^2 \right] \quad (4.69a)
\end{aligned}$$

para partículas pesadas,

$$\begin{aligned}
f(\gamma) &= \ln \left( \frac{E}{2m_e c^2} \right) + \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 + 1 - (3 - b_0) \ln 2 + \frac{b_0}{8} \\
&= \ln [(\gamma - 1)(\gamma^2 - 1)] + \frac{1 - 2\gamma - 3\gamma^2}{\gamma^2} \ln 2 + \frac{1}{8} \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 + \frac{1}{\gamma^2} \quad (4.69b)
\end{aligned}$$

para electrones, y

$$\begin{aligned}
f(\gamma) &= \ln \left( \frac{E}{2m_e c^2} \right) + \ln \left( \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \right) - \beta^2 - b_1 + \frac{b_2}{2} - \frac{b_3}{3} + \frac{b_4}{4} \\
&= \ln [(\gamma - 1)(\gamma^2 - 1)] - \ln 2 - \frac{\gamma^2 - 1}{12\gamma^2} \left( 23 + \frac{14}{\gamma + 1} + \frac{10}{(\gamma + 1)^2} + \frac{4}{(\gamma + 1)^3} \right) \quad (4.69c)
\end{aligned}$$

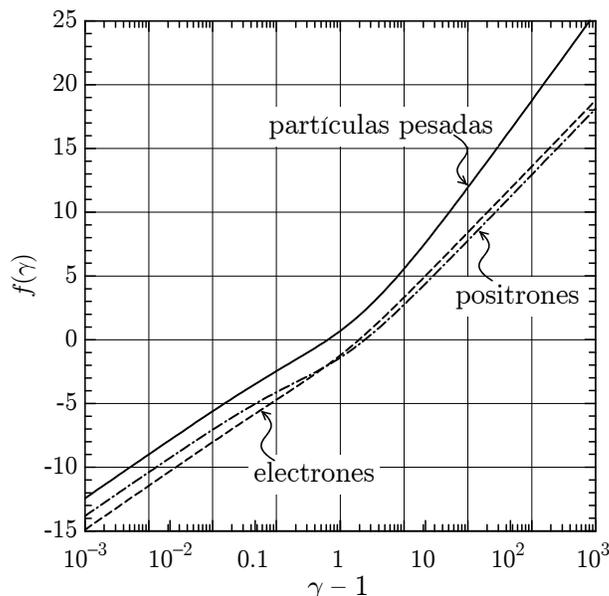
para positrones. La cantidad [ver ec. (4.28)]

$$R = \left[ 1 + \left( \frac{m_e}{M} \right)^2 + 2\gamma \frac{m_e}{M} \right]^{-1}, \quad (4.70)$$

que sólo aparece para partículas pesadas, difiere ligeramente de la unidad si  $E \lesssim Mc^2$ . La Figura 4.3 muestra las funciones  $f(\gamma)$  para partículas pesadas, electrones, y positrones, en función de su energía cinética reducida  $\gamma - 1 = E/Mc^2$ . Nótese que como la función  $f(\gamma)$  es diferente para cada tipo de partícula, proyectiles diferentes pero con la misma carga, tienen poderes de frenado diferentes aunque tengan la misma velocidad.

Los parámetros  $S_0(0)/Z$  e  $I$  calculados a partir de nuestra GOS numérica para átomos neutros aislados se muestran en la Figura 4.4. Dado que las desviaciones de la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn se deben en gran medida a las capas internas (ver la Sección 3.2), el valor de  $S_0(0)$  es bastante independiente del estado de agregación del átomo blanco. Además, como la aproximación de campo central proporciona una descripción realista de las excitaciones de capas internas, cabe esperar que nuestro cálculo de  $S_0(0)$  sea también válido para átomos ligados en moléculas o en sólidos. Como el valor de  $S_0(0)$  varía suavemente con  $Z$ , podemos parametrizarlo con un polinomio

$$S_0(0) = Z \left( 1 - \sum_{i=1}^5 d_i Z^i \right). \quad (4.71)$$



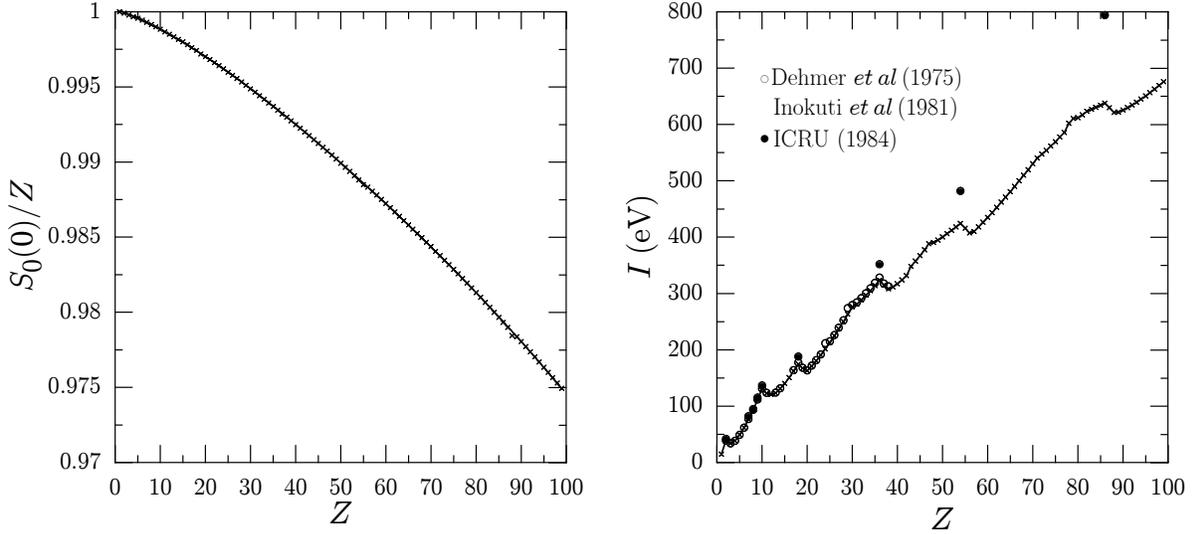
**Figura 4.3:** Dependencia en la energía de la función  $f(\gamma)$  que aparece en la fórmula asintótica de la sección eficaz de frenado, ecs. (4.69). Por simplicidad, en el caso de proyectiles pesados hemos tomado  $R = 1$  y  $m_e/M = 0$ .

La curva mostrada en la Figura 4.4 representa esta función con los coeficientes

$$\begin{aligned} d_1 &= 7,0799\text{E}-5, & d_2 &= 5,2953\text{E}-6, & d_3 &= -8,5658\text{E}-8, \\ d_4 &= 7,6954\text{E}-10, & d_5 &= -2,5952\text{E}-12, \end{aligned} \quad (4.72)$$

que han sido obtenidos mediante un ajuste por mínimos cuadrados de los valores numéricos. En la Figura 4.4 (panel derecho), se compara el potencial medio de excitación  $I$  obtenido partir de nuestras OOSs con los valores no-relativistas calculados por Dehmer et al. (1975) e Inokuti et al. (1981). Estos autores emplearon un potencial Hartree-Slater y sólo consideraron los elementos con  $Z \leq 38$ , para los que los efectos relativistas no son muy importantes. Por otro lado, el potencial medio de excitación depende fuertemente de los detalles del espectro de excitaciones y, por lo tanto, no esperamos que el modelo de partículas independientes que estamos utilizando proporcione valores muy realistas para  $I$ , incluso en el caso de átomos libres. Para dar una idea de las posibles discrepancias, en la Figura 4.4 hemos incluido los valores de  $I$  recomendados por la ICRU (1984) para los gases nobles. Para  $Z \leq 36$  nuestros valores coinciden prácticamente con los de la ICRU, pero aparecen diferencias importantes en el caso del xenón y del radón ( $Z = 56$  y  $86$ ). Más adelante daremos una explicación parcial de estas discrepancias. En cualquier caso, la fórmula asintótica (4.66) describe de manera precisa el poder de frenado de partículas pesadas en medios materiales, y disponemos de valores empíricos del potencial medio de excitación para un gran número de materiales (ICRU, 1984).

El parámetro  $\Delta D_1$  en la ec. (4.66), que no aparece en la fórmula tradicional del



**Figura 4.4:** Parámetros de la fórmula asintótica (4.66) de la sección eficaz de frenado para colisiones inelásticas con átomos neutros, calculados a partir de la GOS numérica (cruces). Los círculos abiertos son valores no-relativistas calculados por Dehmer et al. (1975) e Inokuti et al. (1981) utilizando un potencial de tipo Hartree-Slater. Los círculos sólidos son los potenciales medios de excitación de los gases nobles recomendados por la ICRU en su Report 37 (1984).

poder de frenado, prácticamente no afecta al valor calculado de la sección eficaz de frenado. Este hecho se muestra en la Figura 4.5, donde comparamos los valores de  $\Delta D_1$ , calculados a partir de nuestras GOSs numéricas, con el primer término de la derecha de la ec. (4.66). Vemos que  $\Delta D_1$  es unos tres órdenes de magnitud menor que el primer término. Para escribir la ec. (4.66) en la forma convencional, podemos expresar la suma  $2S_0(0) \ln(2m_e c^2/I) + \Delta D_1$  como un único término independiente de la energía, en la forma  $2S_0(0) \ln(2m_e c^2/I')$ , donde hemos introducido el potencial medio de excitación modificado  $I'$  dado por

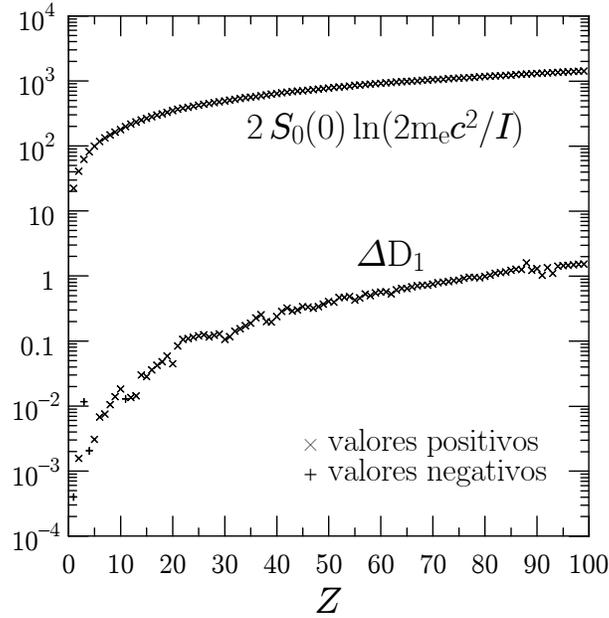
$$I' = I \exp[-\Delta D_1/2S_0(0)], \quad (4.73)$$

donde el exponente  $\Delta D_1/2S_0(0)$  varía entre  $\sim 10^{-2}$  y  $\sim 10^{-3}$  (comparar con la Figura 4.5). Estos es,  $I'$  difiere de  $I$  en menos de un 1%; esta diferencia es menor que la incertidumbre experimental relativa de la mayoría de potenciales medios de excitación de que disponemos en la actualidad (ver ICRU, 1984). En consecuencia, para la mayoría de aplicaciones prácticas el parámetro  $\Delta D_1$  se puede despreciar.

Continuando con nuestro estudio del poder de frenado, es interesante notar que cuando la OOS satisface la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn,  $S_0(0) = Z$ , y despreciamos el parámetro  $\Delta D_1$ , la fórmula (4.66) se simplifica para dar

$$\sigma_{\text{Bethe}}^{(1)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ 2Z \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I} \right) + Z f(\gamma) \right\}, \quad (4.74)$$

que no es sino la famosa fórmula de Bethe para la sección eficaz de frenado; en el



**Figura 4.5:** Parámetro  $\Delta D_1$  de la fórmula asintótica (4.66), comparado con el término  $2S_0(0)\ln(2m_e c^2/I)$ , para los elementos comprendidos entre  $Z = 1$  y 99.

artículo de revisión de Fano de 1963 podemos encontrar una deducción de esta fórmula. Comparando ambas expresiones, la de Bethe y la nuestra, ec. (4.66), vemos que la complejidad adicional de nuestra fórmula se debe a las desviaciones relativistas de la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn. Nótese que esta diferencia puede jugar un papel relevante en la interpretación de los experimentos de poderes de frenado. Como el único parámetro no trivial en la fórmula de Bethe es el potencial medio de excitación  $I$ , el valor de esta cantidad se suele inferir ajustando (la fórmula de Bethe) a los resultados de medidas precisas de poder de frenado  $S$ , ec. (2.115), de partículas cargadas. En consecuencia, las desviaciones de la regla de suma de Bethe pueden haber introducido errores sistemáticos en los valores empíricos del potencial medio de excitación.

La expresión no-relativista de la fórmula del poder de frenado se puede obtener tomando el límite no-relativista de la expresión (4.66). En este límite, suponiendo que  $R \simeq 1$ , las funciones  $f(\gamma)$  se reducen a

$$\begin{aligned}
 f(\gamma) &\simeq 2 \ln \left( \frac{2E}{Mc^2} \right) && \text{para partículas pesadas } (R \simeq 1), \\
 &\simeq 2 \ln \left( \frac{E}{m_e c^2} \sqrt{\frac{e}{8}} \right) && \text{para electrones,} \\
 &\simeq 2 \ln \left( \frac{E}{m_e c^2} \right) && \text{para positrones.}
 \end{aligned} \tag{4.75}$$

Teniendo en cuenta que en el caso no-relativista la energía cinética se escribe como

$E = Mv^2/2$ , y que se cumple la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn [es decir,  $S_0(Q) = Z$ ], podemos escribir

$$\sigma_{\text{non-rel}}^{(1)} \simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ 2Z \ln \left( a \frac{m_e v^2}{I} \right) - \Delta D_1 \right\}, \quad (4.76)$$

con

$$a = \begin{cases} 2 & \text{para partículas pesadas,} \\ \sqrt{e/8} & \text{para electrones,} \\ 1 & \text{para positrones.} \end{cases} \quad (4.77)$$

Las secciones eficaces de frenado para electrones y positrones difieren sólo en el factor  $a = \sqrt{e/8} = 0,58291$  dentro del logaritmo de la ec. (4.76), que resulta de los efectos de intercambio en las colisiones de electrones.

### 4.2.3. Sección eficaz de dispersión de energía

La sección eficaz de dispersión de energía para proyectiles muy energéticos viene dada por la siguiente fórmula asintótica

$$\begin{aligned} \sigma^{(2)} &\simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ A_{\text{tot}} \left[ \ln \left( \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 \right] + Z m_e c^2 g(\gamma) + \Delta D_2 \right\} \\ &\simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left\{ A_{\text{tot}} \left[ \ln (\gamma^2 - 1) - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \right] + Z m_e c^2 g(\gamma) + \Delta D_2 \right\}, \end{aligned} \quad (4.78)$$

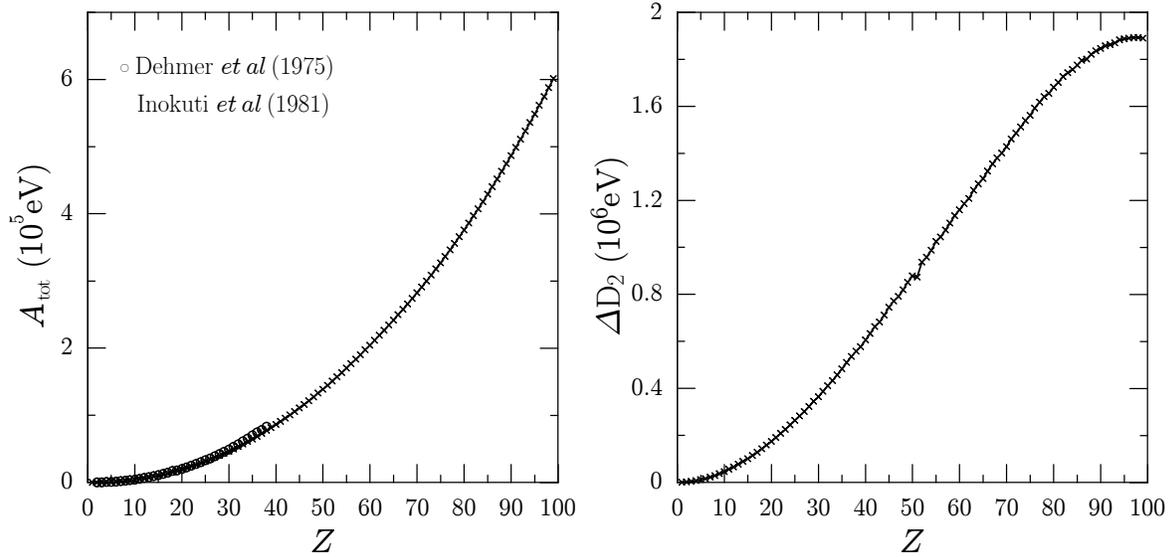
donde

$$A_{\text{tot}} = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} S_1(a; 0) = \int_0^\infty dW W \frac{df(W)}{dW} \quad (4.79)$$

es una constante independiente de la energía y

$$\Delta D_2 = \sum_a \frac{q_a}{2|\kappa_a|} \mathcal{X}_a^{(2)}. \quad (4.80)$$

El panel izquierdo de la Figura 4.6 muestra los valores del parámetro  $A_{\text{tot}}$  para átomos neutros libres, calculados a partir de nuestra OOS numérica. La Figura 4.6 incluye los valores obtenidos por Dehmer et al. (1975) e Inokuti et al. (1981) mediante un cálculo no-relativista con un potencial de tipo Hartree-Slater para los elementos  $Z = 1$  a 38. La diferencia entre los dos conjuntos de datos crece de manera gradual con el número atómico, lo que probablemente se debe a la importancia cada vez mayor de los efectos relativistas. En el panel de la derecha de la Figura (4.64) se muestran los valores calculados de  $\Delta D_2$ . Los parámetros  $A_{\text{tot}}$  y  $\Delta D_2$  dependen fuertemente de los detalles del espectro de excitaciones, que en nuestro modelo de potencial central no podemos esperar que esté bien descrito. Sin embargo, la fórmula asintótica (4.78) es válida tanto



**Figura 4.6:** Parámetros de  $A_{\text{tot}}$  y  $\Delta D_2$  de la fórmula asintótica (4.78) para la sección eficaz de dispersión de energía de átomos neutros libres, calculados a partir de la GOS numérica (cruces). Los círculos representan los valores obtenidos por Dehmer et al. (1975) e Inokuti et al. (1981) mediante un cálculo no-relativista utilizando un potencial Hartree-Slater.

para moléculas como para sólidos, a pesar de que los parámetros sean sensibles a los estados de agregación y deban ser determinados empíricamente para cada material.

La función  $g(\gamma)$  depende del tipo de proyectil:

$$\begin{aligned} g(\gamma) &= \frac{\beta^2}{1-\beta^2} R (2 - \beta^2 R) - \frac{2\beta^4}{(1-\beta^2)^{3/2}} \frac{m_e}{M} R^2 + \frac{4\beta^6}{3(1-\beta^2)^2} \frac{m_e^2}{M^2} R^3 \\ &= (\gamma^2 - 1)R \left( 2 - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} R \right) - 2 \frac{(\gamma^2 - 1)^2}{\gamma} \frac{m_e}{M} R^2 + \frac{4}{3} \frac{(\gamma^2 - 1)^3}{\gamma^2} \frac{m_e^2}{M^2} R^3 \end{aligned} \quad (4.81a)$$

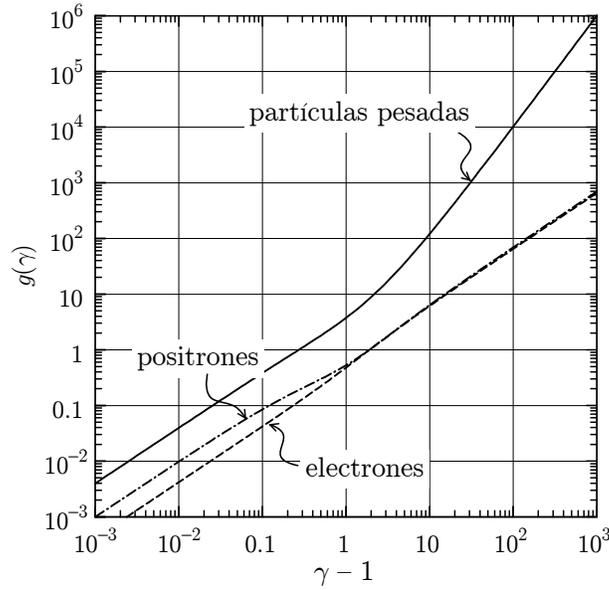
para partículas pesadas,

$$\begin{aligned} g(\gamma) &= \frac{E}{m_e c^2} \left[ \frac{5}{2} - (3 - b_0) \ln 2 - \frac{11b_0}{24} \right] \\ &= (\gamma - 1) \left[ \frac{5}{2} + \frac{1 - 2\gamma - 2\gamma^2}{\gamma^2} \ln 2 - \frac{11}{24} \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.81b)$$

para electrones, y

$$\begin{aligned} g(\gamma) &= \frac{E}{m_e c^2} \left[ 1 - \frac{b_1}{2} + \frac{b_2}{3} - \frac{b_3}{4} + \frac{b_4}{5} \right] \\ &= (\gamma - 1) \left[ 1 - \frac{\gamma^2 - 1}{30\gamma^2} \left( 9 + \frac{21}{\gamma + 1} + \frac{23}{(\gamma + 1)^2} + \frac{8}{(\gamma + 1)^3} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.81c)$$

para positrones. La dependencia en la energía de la sección eficaz de dispersión de energía, ec. (4.78), la determina el factor global  $\beta^{-2}$ , la cantidad entre corchetes  $\ln(\gamma^2 - 1) - (\gamma^2 - 1)/\gamma^2$ , y la función  $g(\gamma)$ . Las dos primeras están representadas en la Figura 4.2, y la última se muestra en la Figura 4.7. Nótese que  $g(\gamma)$  crece con la energía mucho más rápido que el primer término de la expresión (4.78) y que, por lo tanto, el comportamiento a altas energías de  $\sigma^{(2)}$  está determinado por  $g(\gamma)$ . Esto es, la sección eficaz de dispersión de energía está dominada por las colisiones binarias con transferencias de momento muy grandes (Lindhard y Scharff, 1953; Besenbacher et al. 1980)



**Figura 4.7:** La función  $g(\gamma)$  dependiente de la energía que aparece en la fórmula asintótica de la sección eficaz de dispersión de energía, ec. (4.78). Por simplicidad, en el caso de partículas pesadas, hemos fijado  $R = 1$  y  $m_e/m = 0$ .

En el límite no-relativista,  $\ln(\gamma^2 - 1) - (\gamma^2 - 1)/\gamma^2$  se reduce a  $\ln(2E/Mc^2)$  y

$$\begin{aligned}
 g(\gamma) &= \frac{4E}{Mc^2} && \text{para partículas pesadas } (R \simeq 1), \\
 &= \frac{E}{m_e c^2} \left[ \frac{5}{2} - 3 \ln 2 \right] && \text{para electrones,} \\
 &= \frac{E}{m_e c^2} && \text{para positrones.}
 \end{aligned} \tag{4.82}$$

Así, obtenemos las siguientes fórmulas no-relativistas,

$$\sigma_{\text{non-rel}}^{(2)} \simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ A_{\text{tot}} \ln \left( \frac{2E}{Mc^2} \right) + Z \frac{m_e}{M} 4E + \Delta D_2 \right\} \tag{4.83a}$$

para partículas pesadas,

$$\sigma_{\text{non-rel}}^{(2)} \simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ A_{\text{tot}} \ln \left( \frac{2E}{m_e c^2} \right) + Z E \left[ \frac{5}{2} - 3 \ln 2 \right] + \Delta D_2 \right\} \quad (4.83b)$$

para electrones, y

$$\sigma_{\text{non-rel}}^{(2)} \simeq \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ A_{\text{tot}} \ln \left( \frac{2E}{m_e c^2} \right) + Z E + \Delta D_2 \right\} \quad (4.83c)$$

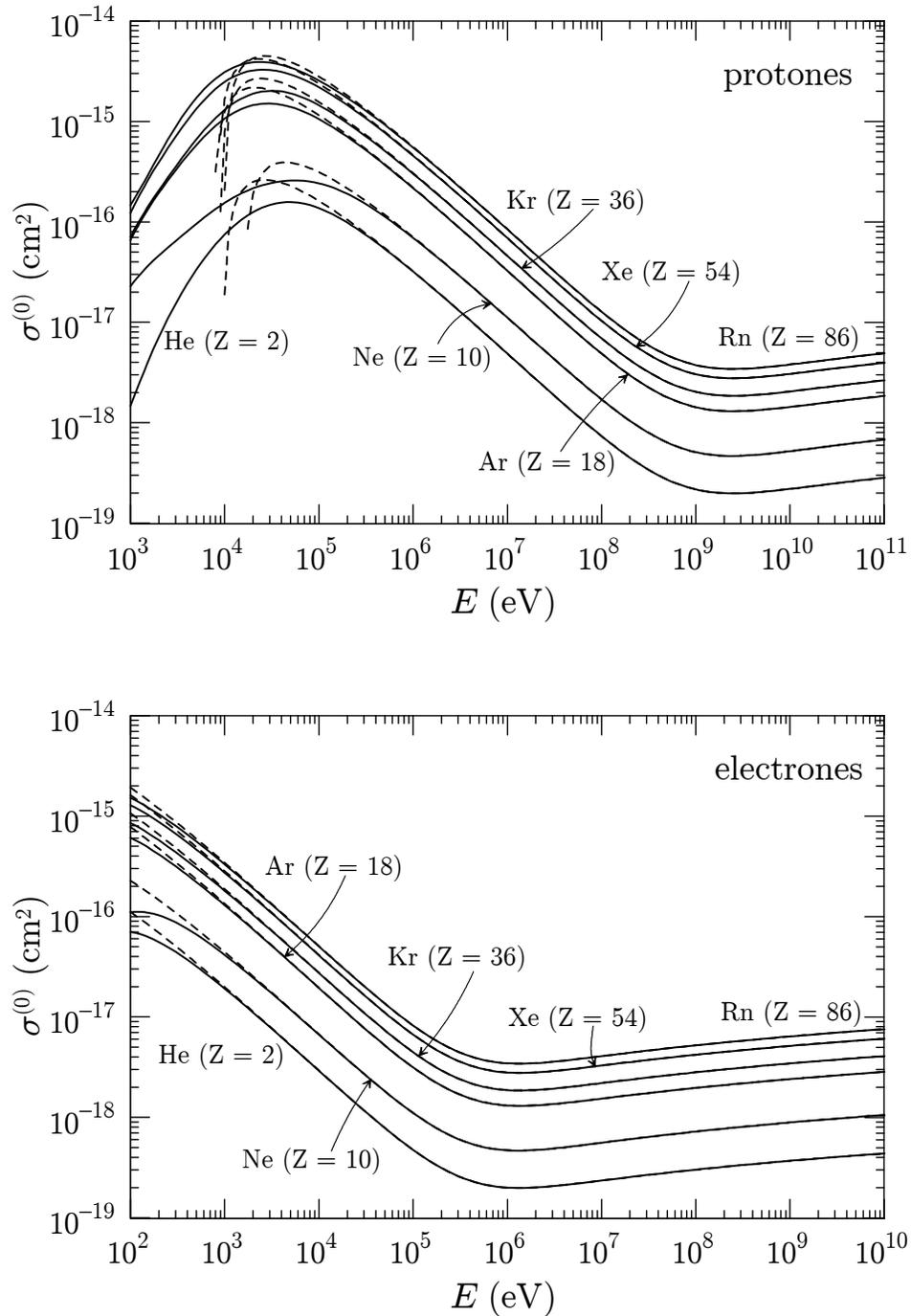
para positrones.

#### 4.2.4. Ejemplos de resultados numéricos

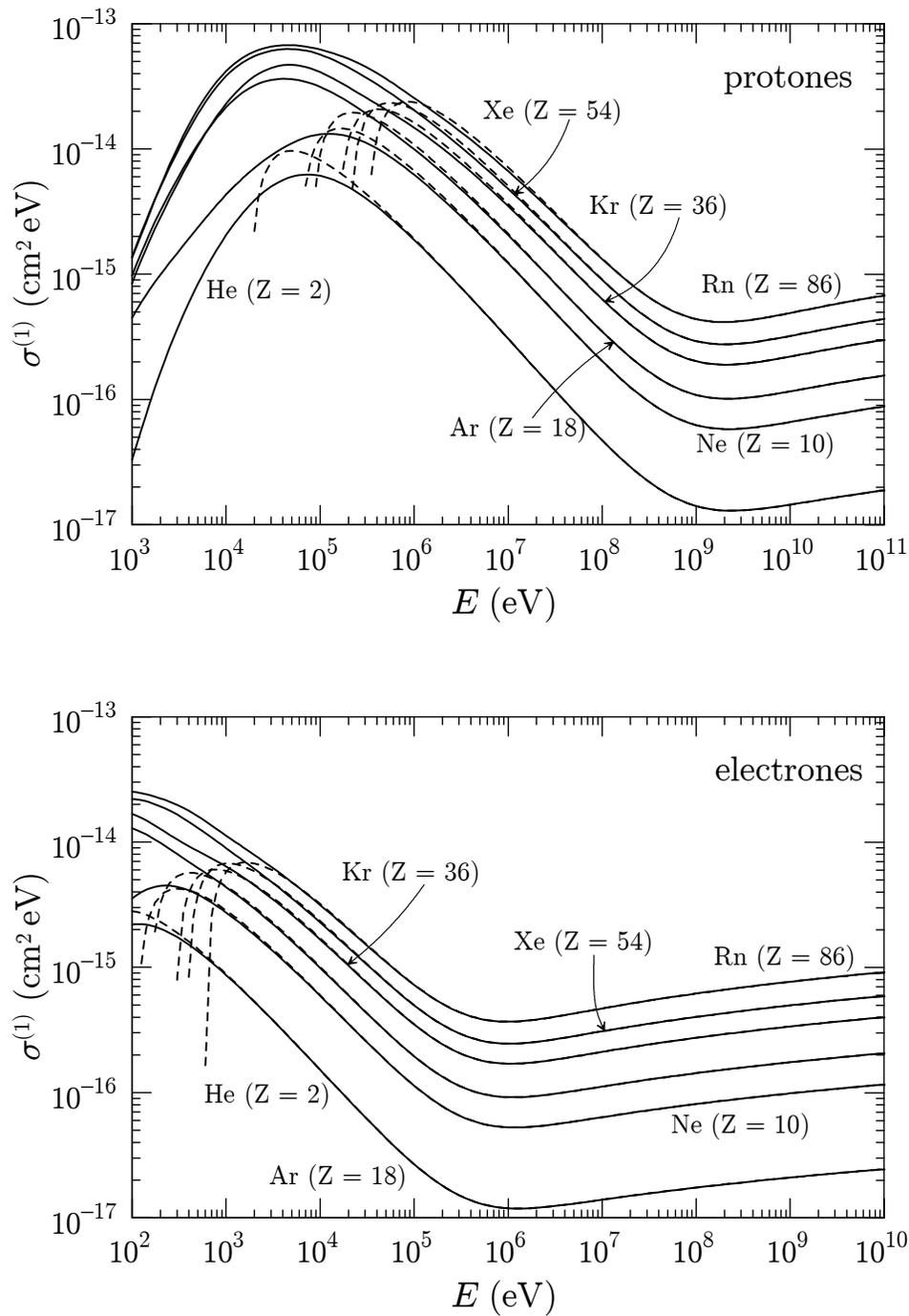
Podemos determinar la precisión de las fórmulas asintóticas deducidas arriba comparando directamente sus valores con los de las secciones eficaces integradas  $\sigma^{(k)}$  calculadas numéricamente. En adelante, consideraremos el caso concreto de colisiones con átomos de gases nobles, para los cuales esperamos que la aproximación de potencial central sea más realista. Las Figuras 4.8, 4.9 y 4.10 muestran la sección eficaz total, la sección eficaz de frenado y la sección eficaz de dispersión de energía para colisiones inelásticas de protones y electrones, como función de la energía cinética del proyectil. Observamos que, como es de esperar, las diferencias entre las secciones eficaces numéricas y las fórmulas asintóticas decrecen de manera suave cuando la energía del proyectil crece. Para la sección eficaz total, las diferencias se vuelven imperceptibles en la escala de las figuras, para energías mayores que aproximadamente 1 MeV y 1 keV, respectivamente, para protones y electrones. De manera similar, las curvas de las fórmulas asintóticas y los valores numéricos de la sección eficaz de frenado convergen para 10 MeV y 10 keV respectivamente para protones y electrones. La fórmula asintótica para la sección eficaz de dispersión de energía concuerda con los valores numéricos calculados para energías mayores que 100 MeV para protones y 100 keV para electrones. Es oportuno indicar que, cuanto mayor es el orden  $k$  de la sección eficaz integrada  $\sigma^{(k)}$ , mayor es la energía a partir de la cual la fórmula asintótica da valores correctos, debido a la importancia creciente de las interacciones con  $W$ s grandes, que se originan las excitaciones de los electrones de las capas más internas. Por lo tanto, la corrección de capas, es mayor para el poder de frenado que para la sección eficaz, y es aún mayor para la sección eficaz de dispersión de energía.

El excelente acuerdo, a muy altas energías, entre los valores integrados numéricamente y las fórmulas asintóticas, indica que nuestros algoritmos numéricos de integración son confiables hasta energías de  $10^{11}$  eV. Por lo tanto, es de esperar que los potenciales medios de excitación  $I$  para los gases nobles concuerden en buena medida con los valores experimentales. Sin embargo, la Figura 4.4 muestra desviaciones sistemáticas preocupantes, que crecen con el número atómico. Al final de esta sección volveremos sobre este tema, y trataremos de identificar una posible causa de estas desviaciones.

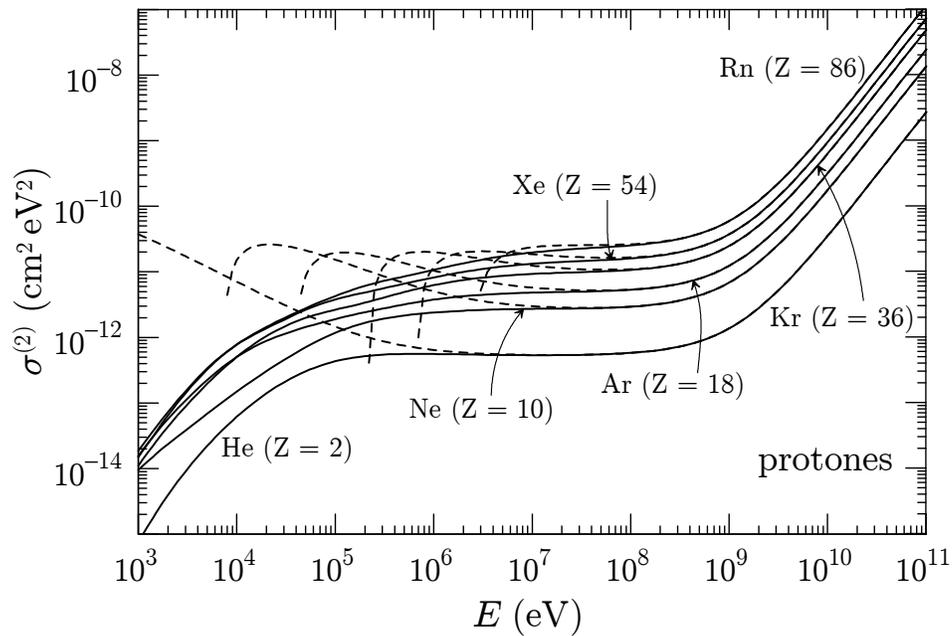
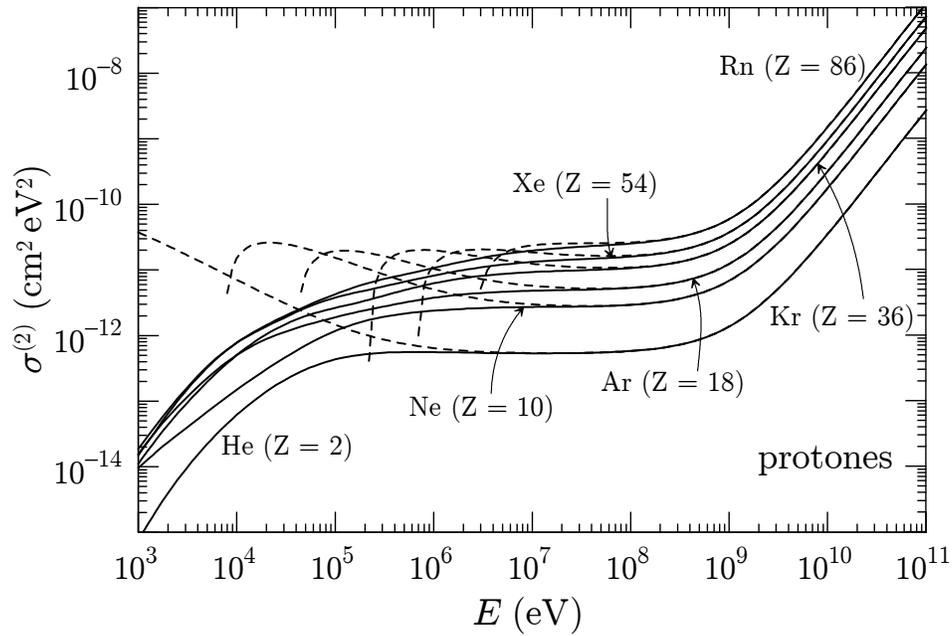
El potencial medio de excitación  $I$  ha sido medido para múltiples materiales utilizando diferentes técnicas (ver Ahlen, 1980; ICRU, 1984). Un experimento ideal consis-



**Figura 4.8:** Sección eficaz total,  $\sigma^{(0)}$ , para colisiones inelásticas de protones y electrones con átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil. Las curvas sólidas representan los resultados numéricos calculados con el programa PWACS. Las curvas de trazos muestran las predicciones de la fórmula asintótica (4.60). Nótese que esta fórmula proporciona secciones eficaces totales idénticas para protones y electrones con la misma velocidad.



**Figura 4.9:** Sección eficaz de frenado,  $\sigma^{(1)}$ , para colisiones inelásticas de protones y electrones con átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil. Las curvas continuas se corresponden con los resultados numéricos obtenidos con el programa PWACS. Las curvas de trazos muestran las predicciones de la fórmula asintótica (4.66).



**Figura 4.10:** Sección eficaz de dispersión de energía,  $\sigma^{(2)}$ , para colisiones inelásticas de protones y electrones con átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil. Las curvas continuas se corresponden con los resultados numéricos obtenidos con el programa PWACS. Las curvas de trazos muestran las predicciones de la fórmula asintótica (4.78).

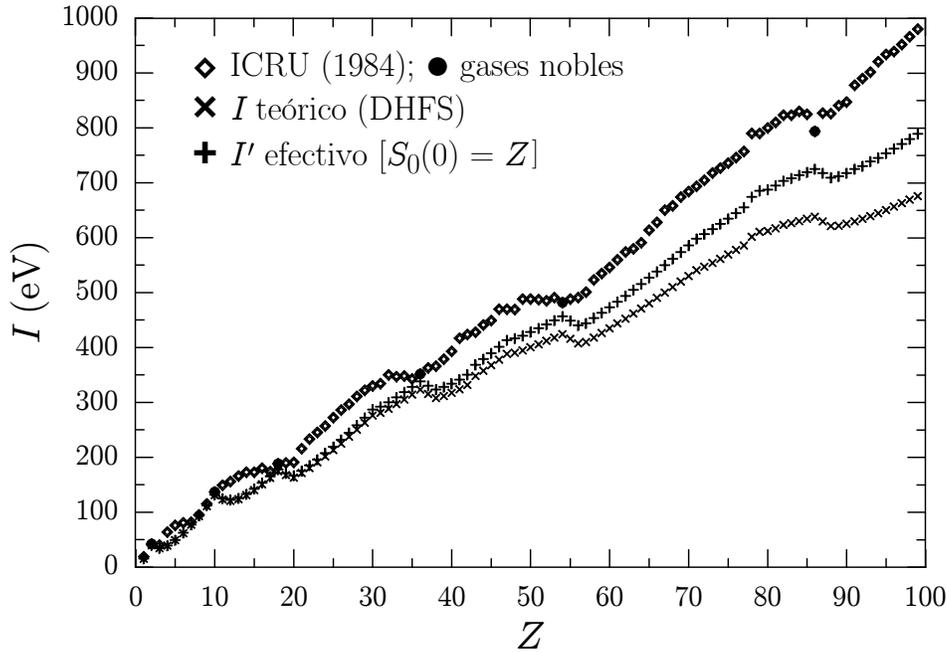
tiría en medir el promedio de la pérdida de energía  $\langle \Delta E \rangle$  de protones con una energía cinética inicial  $E$  grande, transmitidos a través de una fina lámina del material estudiado. La razón entre  $\langle \Delta E \rangle$  y el grosor de la lámina proporciona el poder de frenado,  $S(E) = \mathcal{N}\sigma^{(1)}$ , a partir del cual podemos determinar el potencial medio de excitación con la ayuda de la ec. (4.66). En los experimentos de este tipo, tradicionalmente se ha utilizado la fórmula convencional (4.74), lo que, como ya hemos indicado, puede haber introducido errores sistemáticos en los potenciales medios de excitación “medidos”. Para dar una estimación de la magnitud de estos errores, supongamos temporalmente que la ec. (4.66), con los parámetros calculados para átomos libres con un potencial DHFS (Figura 4.4), proporciona las secciones eficaces de frenado correctas. Así, procediendo como en un experimento ideal, podemos determinar el potencial medio de excitación efectivo  $I'$  utilizando la fórmula convencional (4.74),

$$\sigma^{(1)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e v^2} \left\{ 2Z \ln \left( \frac{2m_e c^2}{I'} \right) + Z f(\gamma) \right\}, \quad (4.84)$$

que supone que  $S_0(0) = Z$ . Hemos calculado la sección eficaz de frenado para protones con una energía cinética de 400 MeV (para la cual esperamos que la fórmula asintótica sea correcta, como se muestra en la Figura 4.11), para todos los elementos comprendidos entre  $Z = 1$  y 99, y obtenido  $I'$  resolviendo la ec. (4.84). Los resultados se muestran en la Figura (4.69), conjuntamente con el valor teórico de  $I$  calculado a partir del potencial DHFS, y con los valores empíricos de los potenciales medios de excitación recomendados por la ICRU en su Report 37 (ICRU, 1984). Observamos que, como consecuencia de no tener en cuenta las desviaciones relativas de la regla de suma de Bethe, el potencial medio de excitación “efectivo”  $I'$  es sistemáticamente más grande que los valores teóricos de  $I$ . Como era de esperar, las diferencias crecen gradualmente con  $Z$  y adquieren su valor máximo, 17%, para  $Z = 99$ . Como  $I$  aparece como argumento de un logaritmo, una pequeña desviación de la regla de suma provoca una variación considerable del valor efectivo  $I'$  en el caso de  $Z$ s grandes. De hecho, para los gases nobles el valor efectivo  $I'$  está más próximo al valor recomendado por la ICRU que a los valores teóricos (DHFS) del potencial medio de excitación. En consecuencia, tenemos indicios suficientes para esperar que la re-evaluación de las medidas de poderes de frenado de los nobles gases en base a la fórmula (4.66) conllevaría valores del potencial medio de excitación en mejor acuerdo con los valores teóricos presentes.

### 4.3. Correcciones de capas

Las fórmulas asintóticas que hemos deducido en las secciones previas son el resultado de aproximaciones drásticas, la precisión de las cuales empeora a medida que la energía del proyectil decrece. La diferencia entre la sección eficaz “exacta”  $\sigma^{(k)}$  (es decir, la que se obtiene integrando numéricamente la SEDD) y la correspondiente fórmula asintótica se conoce como *corrección de capas internas*. Este nombre está motivado por el hecho de que los mayores errores en la fórmula asintótica proceden de las contribuciones de las



**Figura 4.11:** Potencial medio de excitación de todos los elementos entre  $Z = 1$  y 99. Los valores calculados (DHFS) se comparan con los valores empíricos del potencial medio de excitación recomendados por la ICRU Report 37 (ICRU, 1984). El potencial medio de excitación efectivo,  $I'$ , ha sido obtenido a partir de los valores calculados del poder de frenado para protones de 400 MeV utilizando la fórmula convencional de Bethe (4.84).

capas más internas (es decir, aquellas con las energías de ionización más grandes). Por lo tanto, ya que las funciones de onda de las capas internas son bastante independientes del estado de agregación del material, esperamos que las correcciones de capas calculadas para colisiones con átomos libres sean aproximadamente válidas incluso en el caso de choques en medios densos.

Los cálculos de correcciones de capas para la fórmula asintótica del poder de frenado publicados hasta la fecha son esencialmente no-relativistas. Se obtuvieron fórmulas explícitas para las correcciones de capas en términos de las GOSs, restando de las integrales que definen  $\sigma^{(1)}$  aquellas que se emplearon en la deducción de la fórmula asintótica (ver, por ejemplo, Fano, 1963). Así, Walske (1952, 1956) utilizó funciones de onda hidrogenoides para obtener las correcciones de capas para las capas K y L; Khandelwal y Merzbacher (1966) y Bichsel (1983) llevaron a cabo cálculos similares para las capas M. Por otro lado, Bonderup (1967) obtuvo correcciones de capas para el poder de frenado utilizando la aproximación de plasma local de Lindhard y Scharf (1953). Más recientemente, Bichsel (2002) determinó la corrección de capas del aluminio y el silicio integrando directamente las GOSs no relativistas de Manson (1972).

En este punto, es oportuno mencionar que la deducción de las fórmulas relativistas

asintóticas es menos “limpia” que en el caso no-relativista. Esto es así porque la SEDD no-relativista tiene una forma mucho más sencilla (las interacciones transversales no aparecen en este caso), lo que permite calcular las integrales ordenadamente. En cambio, en la formulación relativista, la SEDD es mucho más intrincada y contiene además la parte transversal. Para abordar estas complicaciones, hemos tenido que confiar en suposiciones muy estrictas, lo que dificulta que el cálculo de la corrección de capas a partir de la definición de integrales específicas. Sin embargo, haciendo uso de los resultados numéricos de PWACS, podemos extraer las correcciones de capas de manera sencilla, a partir de la comparación directa de las secciones eficaces calculadas con los resultados de las fórmulas asintóticas.

Finalmente, hay que mencionar que con este esquema sólo estamos considerando las correcciones de capas que resultan de las imprecisiones en la integración aproximada de la SEDD que se obtiene de la PWBA. En cambio, las correcciones de capas empíricas que se obtienen de la comparación de las fórmulas asintóticas con datos experimentales, o con resultados teóricos obtenidos a partir de cálculos más elaborados (por ejemplo, utilizando la DWBA), dan cuenta también de los errores que se inducen al utilizar la PWBA. Los efectos que están más allá de la PWBA se introducen normalmente añadiendo términos adicionales a las fórmulas asintóticas; los más relevantes son las correcciones de Barkas y de Bloch (Ahlen, 1980; Lindhard y Sørensen, 1996).

### 4.3.1. Cálculo numérico de las correcciones de capas

Como las secciones eficaces integradas  $\sigma^{(k)}$  (con  $k = 0, 1$  y  $2$ ) se pueden calcular de manera numérica, podemos obtener las correcciones de capas asociadas  $\mathcal{C}^{(k)}$  a partir de las secciones eficaces numéricas. Explícitamente, definimos estas correcciones de capas mediante las siguientes ecuaciones

$$\sigma^{(0)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left\{ M_{\text{tot}}^2 \left[ \ln(\gamma^2 - 1) - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \right] + C_{\text{tot}} - \mathcal{C}^{(0)} \right\}, \quad (4.85a)$$

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e c^2 \beta^2} & \left\{ 2S_0(0) \ln\left(\frac{2m_e c^2}{I}\right) + Z f(\gamma) \right. \\ & \left. + [S_0(0) - Z] \left[ \ln(\gamma^2 - 1) - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \right] + \Delta D_1 - \mathcal{C}^{(1)} \right\}, \quad (4.85b) \end{aligned}$$

y

$$\sigma^{(2)} = \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left\{ A_{\text{tot}} \left[ \ln(\gamma^2 - 1) - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \right] + Z m_e c^2 g(\gamma) + \Delta D_2 - \mathcal{C}^{(2)} \right\}, \quad (4.85c)$$

donde las secciones eficaces a la izquierda de las igualdades representan los valores numéricos obtenidos integrando directamente la SEDD. Nótese que la única diferencia

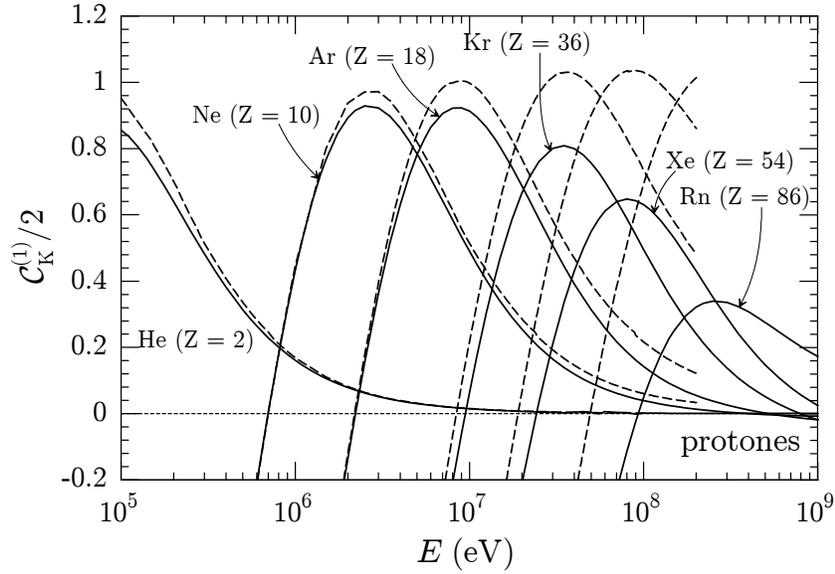
entre estas expresiones y las correspondientes fórmulas asintóticas son los términos  $\mathcal{C}^{(k)}$ . Consecuentemente, la corrección de capas ,

$$\mathcal{C}^{(k)} = \left( \frac{2\pi Z_0^2 e^4}{m_e c^2 \beta^2} \right)^{-1} \left[ \sigma_{\text{asint.}}^{(k)} - \sigma^{(k)} \right], \quad (4.86)$$

es proporcional al error en la fórmula asintótica, con el signo cambiado. En la fórmula de la sección eficaz de frenado usamos el valor calculado de la suma  $S_0(0)$ , para dar cuenta explícitamente de las desviaciones relativistas de la regla de suma de Bethe. Además, la corrección  $\mathcal{C}^{(1)}$ , es dos veces la corrección habitual  $C$  empleada por Fano (1963), Bichsel (2002) y otros; es decir,  $\mathcal{C}^{(1)} = 2C$ . El factor 2 fue introducido por estos autores para sacar un factor común  $2Z$  de los términos entre llaves en la ec. (4.85b) para partículas pesadas. Como este factor global no ocurre ni para electrones ni para positrones, en el presente trabajo hemos optado por una definición común a los diferentes tipos de partículas.

Ya hemos señalado que el cálculo no-relativista de la corrección de capas requiere simplificaciones menos drásticas que en el caso relativista. De hecho, se puede comprobar que las correcciones de capas no-relativistas tienden a cero cuando  $E \rightarrow \infty$ , una prueba de la bondad de las fórmulas asintóticas no-relativistas. En la teoría relativista, sin embargo, no esperamos que las correcciones de capas tiendan a cero en el límite de alta energía. En particular las cantidades  $\mathcal{Y}_a^{(k)}$ , ec. (4.39b), que dan cuenta de las desviaciones de la SED en pérdida de energía para la interacción transversal, de la aproximación dipolar-impulso, y que fueron despreciadas en la deducción de las fórmulas asintóticas, aparecen ahora como parte de las correcciones de capas. Nótese sin embargo, que para capas electrónicas con energías de ionización pequeñas y medianas, los efectos relativistas son pequeños, por lo que las interacciones distantes pueden describirse de manera precisa utilizando la aproximación dipolar. En este caso, nuestras correcciones de capas deberían tomar valores próximos a los obtenidos en la teoría no-relativista. La Figura 4.12 compara la corrección de la capa K al poder de frenado para colisiones de protones con átomos de gases nobles, obtenidas a partir de los cálculos descritos en esta tesis, con la corrección no relativista calculada utilizando funciones de onda hidrogenoides (Walske, 1952). Tal como esperábamos, el acuerdo entre los resultados relativistas y los no-relativistas es aceptable para el helio ( $Z = 2$ ), y se deteriora visiblemente cuando crece el número atómico.

Las Figuras 4.13, 4.14 y 4.15 muestran las correcciones de capas correspondientes a la sección eficaz total, la sección eficaz de frenado, y la sección eficaz de dispersión de energía para colisiones de protones con átomos de los diferentes gases nobles, como funciones de la energía cinética del proyectil. Como hemos dicho anteriormente, las correcciones de capas relativistas no se hacen cero en el límite de muy alta energía, a pesar de que las correcciones son de hecho pequeñas para proyectiles ultrarelativistas. Desafortunadamente, la definición de las correcciones de capas no refleja su importancia relativa. Para dar una idea más directa de la precisión de las fórmulas asintóticas, las Figuras 4.16, 4.17 y 4.18 muestran la diferencia relativa entre los valores numéricos de

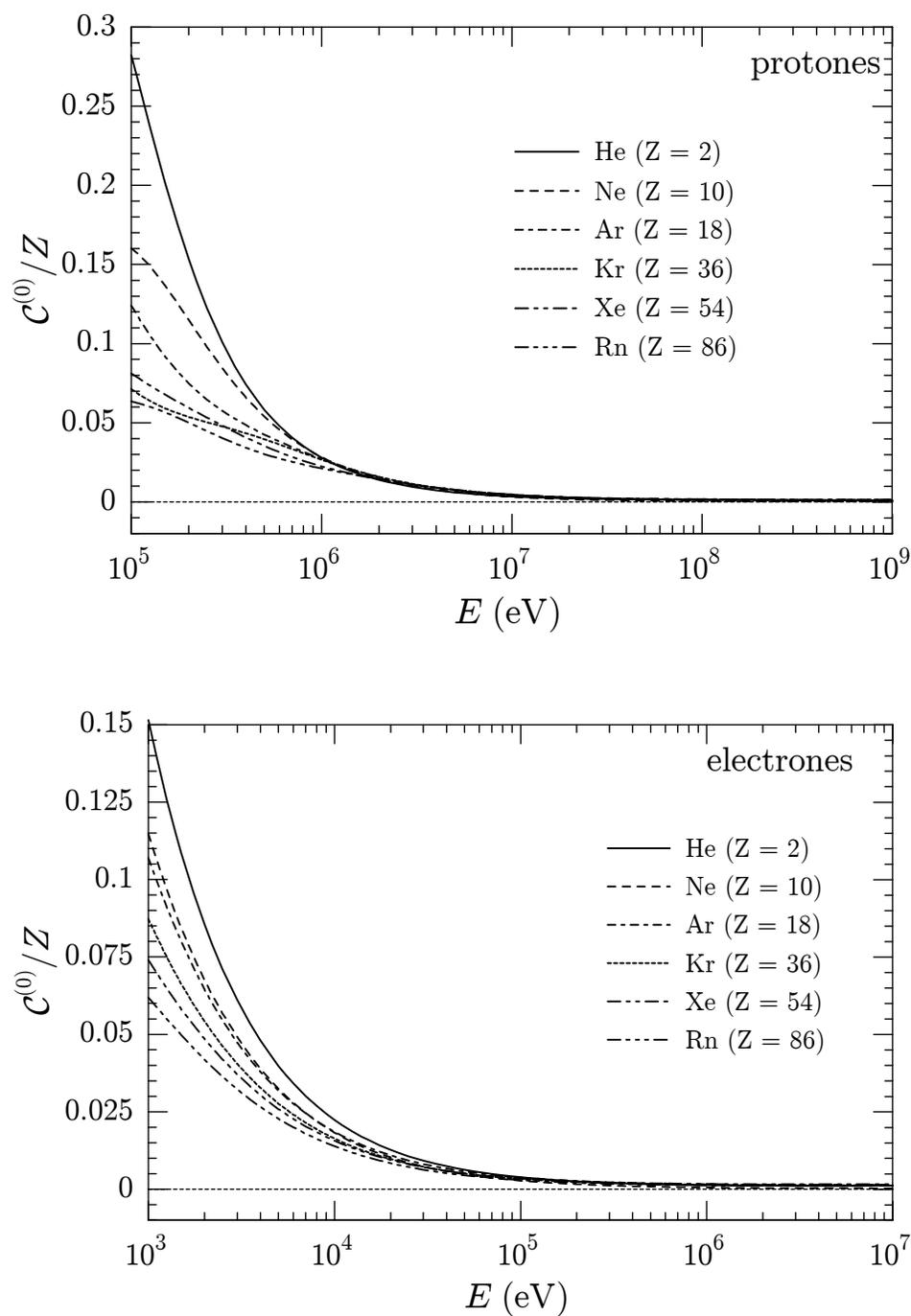


**Figura 4.12:** Correcciones de capas para la sección eficaz de frenado de la capa K de gases nobles e impacto de protones, en función de la energía cinética del proyectil. Las curvas continuas son el resultado del presente cálculo; las curvas a trazos representan la corrección de capas no-relativista calculada por Walske (1952) utilizando funciones de onda hidrogenoides.

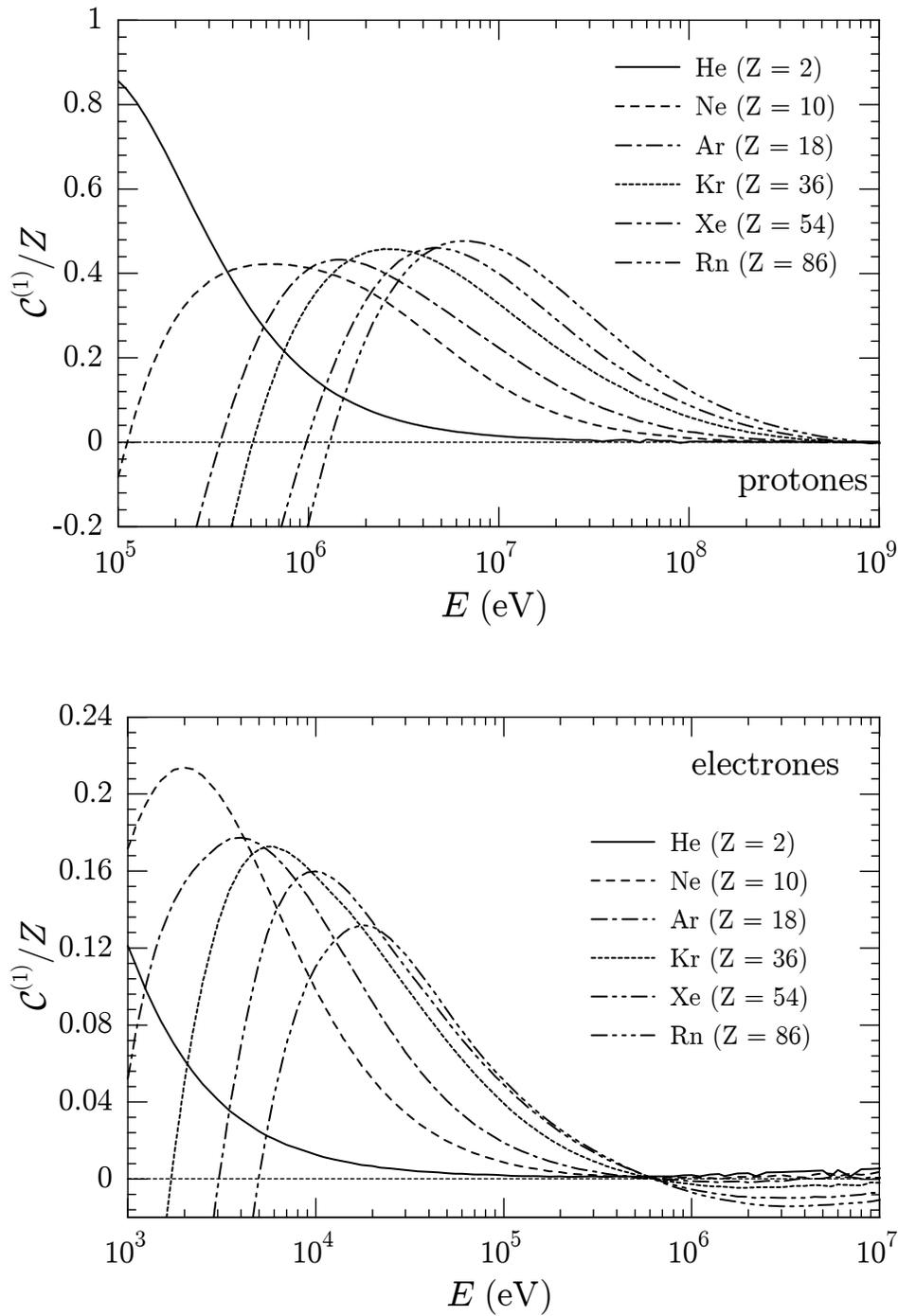
las secciones eficaces y los valores dados por las fórmulas (4.85),

$$\Delta\sigma^{(k)} = 100 \frac{\sigma_{\text{asint.}}^{(k)} - \sigma^{(k)}}{\sigma^{(k)}}, \quad (4.87)$$

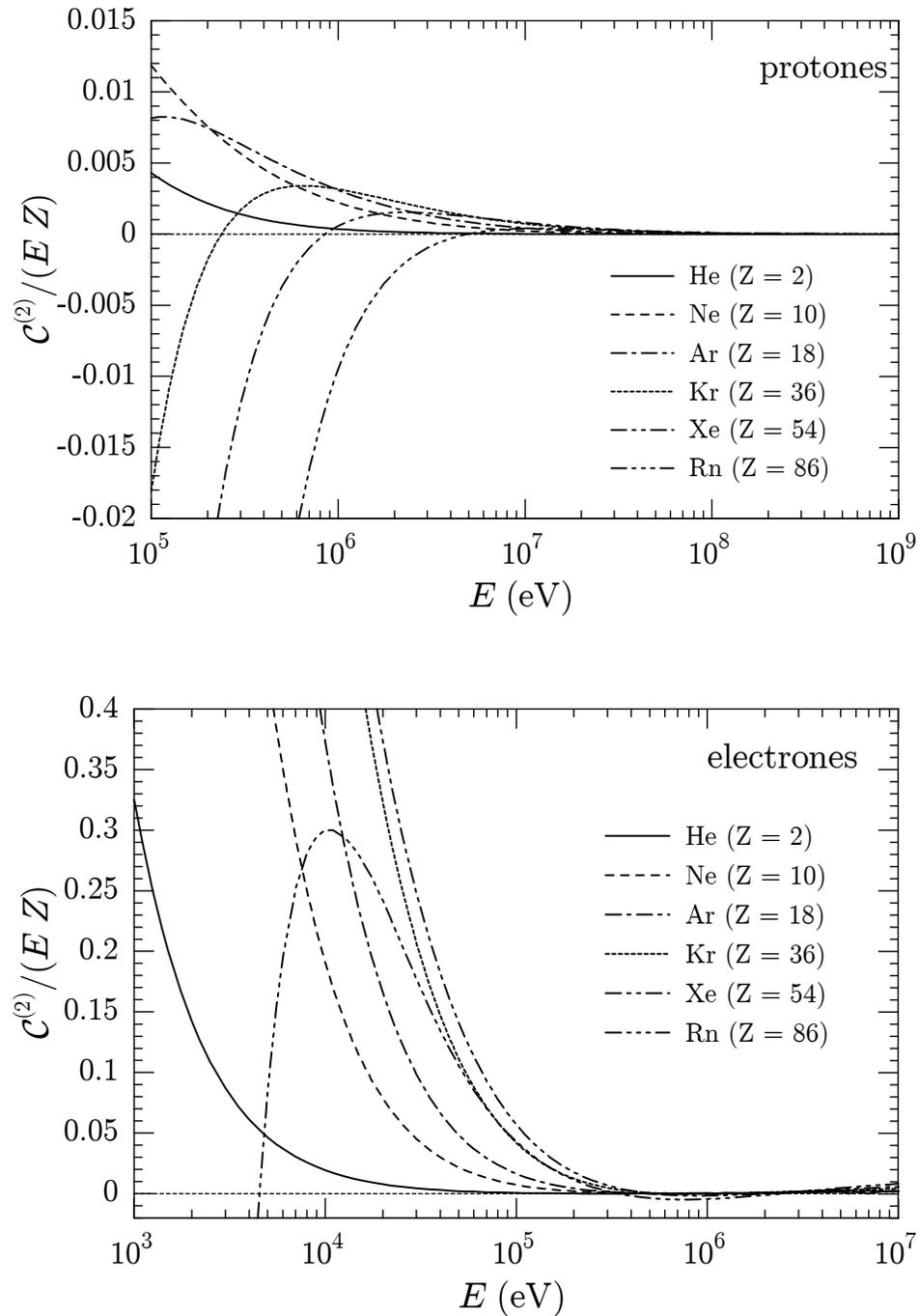
con los parámetros obtenidos en la Sección 4.2. En el caso de protones, la fórmula asintótica para la sección eficaz total difiere de los valores numéricos de la sección eficaz en menos de un 1% para energías superiores a 20 MeV; para electrones, el error es menor al 0.4% para  $E \gtrsim 20$  keV. La fórmula asintótica para el poder de frenado alcanza esa precisión para energías algo superiores; el error para protones es de unos pocos por ciento alrededor de 100 MeV. El error de la fórmula para electrones de energía  $E$  es del mismo orden de magnitud que el de la correspondiente fórmula para protones de energía  $\sim 1,000 E$ . En general, la precisión de las fórmulas asintóticas es peor para la sección eficaz de frenado que para la sección eficaz total, y aún peor para la sección eficaz de dispersión de energía.



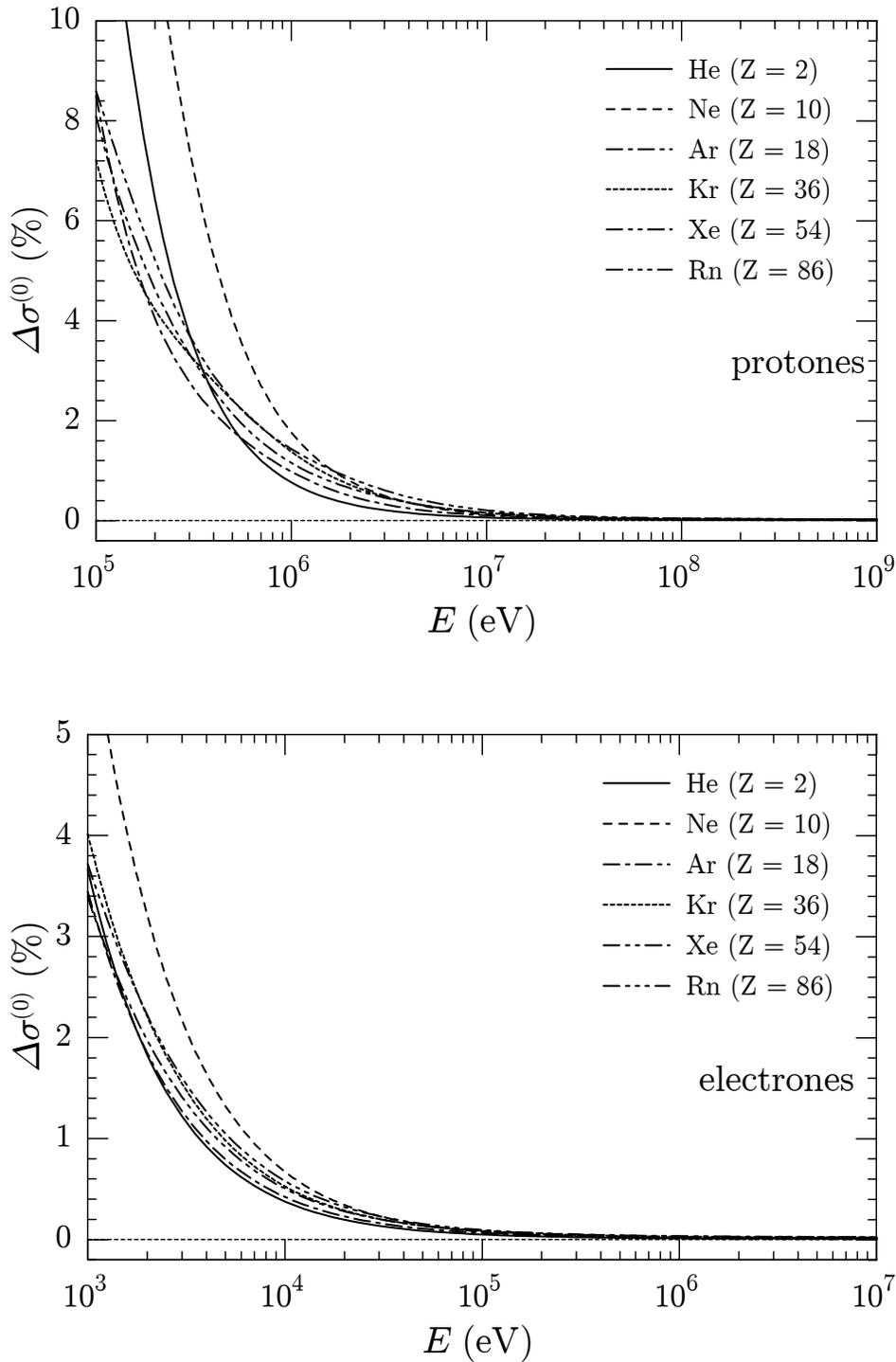
**Figura 4.13:** Corrección de capas  $C^{(0)}$  a la fórmula asintótica de la sección eficaz total para colisiones inelásticas de protones con los átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil.



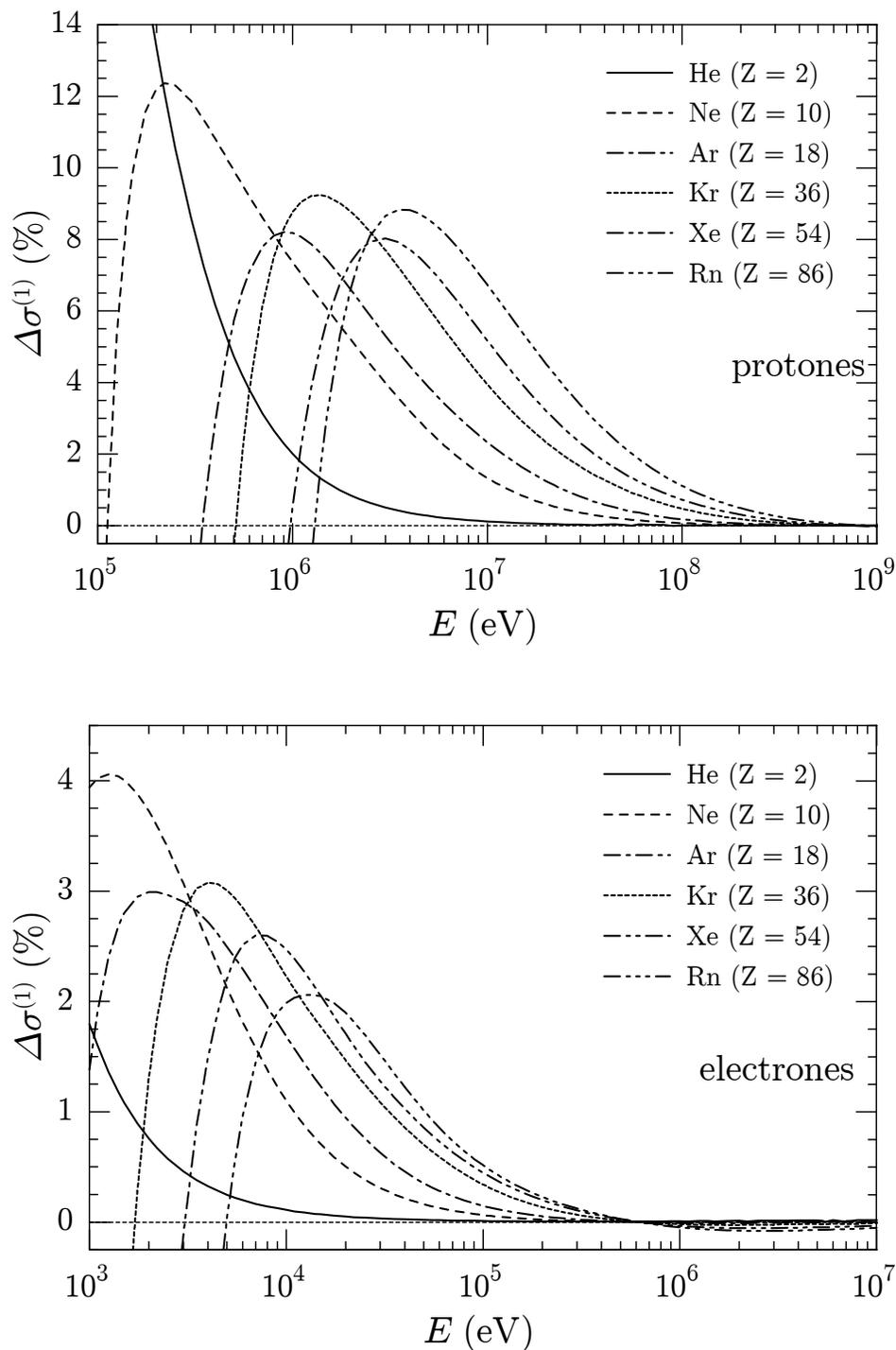
**Figura 4.14:** Corrección de capas  $C^{(1)}$  a la fórmula asintótica de la sección eficaz de frenado para colisiones inelásticas de protones con los átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil.



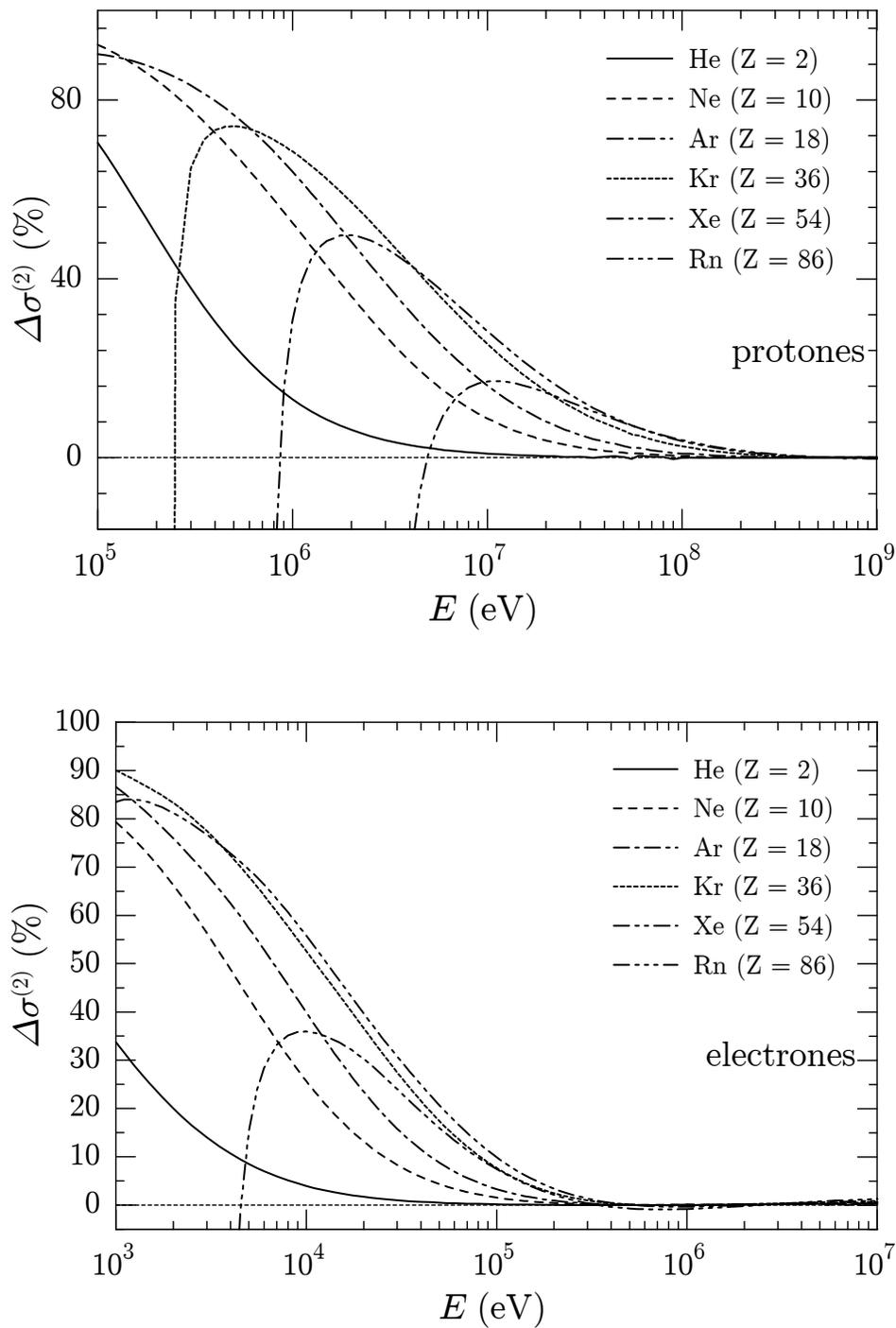
**Figura 4.15:** Corrección de capas  $C^{(2)}$  a la fórmula asintótica de la sección eficaz de dispersión de energía para colisiones inelásticas de protones con los átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil.



**Figura 4.16:** Diferencia relativa entre la sección eficaz total obtenida a partir de los cálculos numéricos y de la fórmula asintótica (4.85a), definida por la ec. (4.87), para colisiones inelásticas de protones con los átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil.



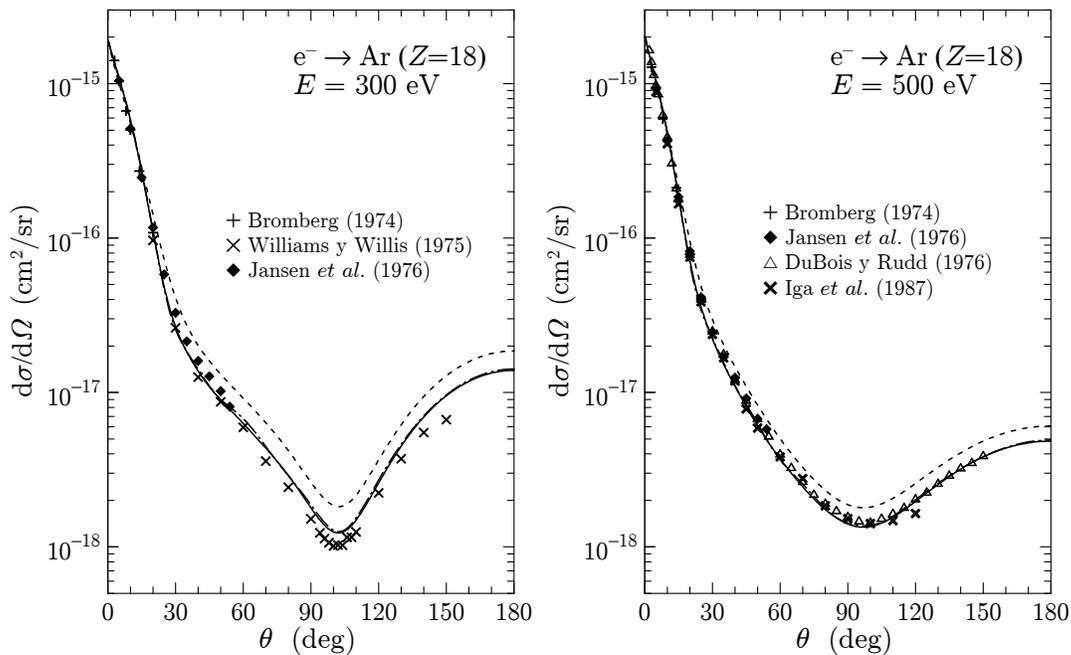
**Figura 4.17:** Diferencia relativa entre la sección eficaz de frenado a obtenida a partir de los cálculos numéricos y de la fórmula asintótica (4.85b), definida por la ec. (4.87), para colisiones inelásticas de protones con los átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil.



**Figura 4.18:** Diferencia relativa entre la sección eficaz de dispersión de energía obtenida a partir de los cálculos numéricos y de la fórmula asintótica (4.85c), definida por la ec. (4.87), para colisiones inelásticas de protones con los átomos de los gases nobles, como función de la energía cinética del proyectil.

## 4.4. Absorción inelástica en el scattering elástico

A pesar de que el scattering elástico y el inelástico, se consideran normalmente como procesos independientes, la existencia de canales de scattering inelásticos modifica las SEDs del scattering elástico, ya que los proyectiles que interactúan inelásticamente con el medio, desaparecen (son “absorbidos”) del canal elástico. En el artículo de Bote et al. (2009b) hemos propuesto un modelo de potencial óptico para describir el scattering de electrones tanto en gases como en sólidos amorfos. Este modelo es una modificación del propuesto anteriormente por Salvat (2003) para átomos libres, que hemos adaptado para estudiar el scattering en sólidos mediante un modelo de “muffin-tin”, tomando a modo de ejemplo el modelo de Raith (1968). El potencial imaginario, que da cuenta de

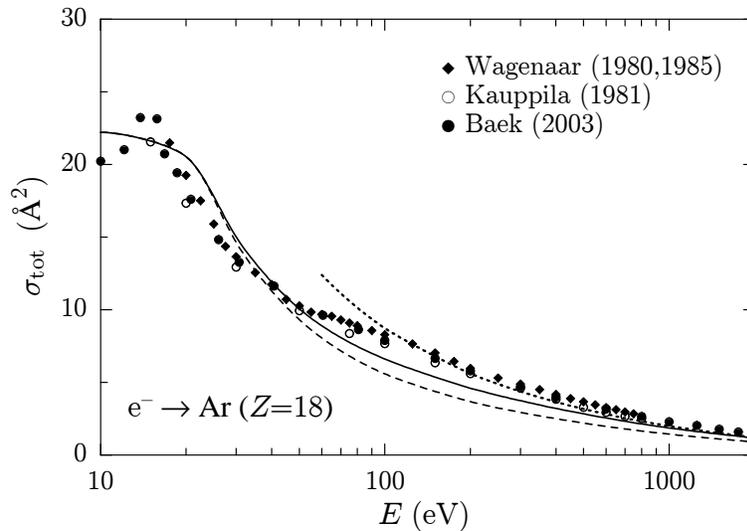


**Figura 4.19:** SED del scattering elástico de electrones con las energías cinéticas indicadas, por átomos de argón. Las curvas continuas son el resultado de los cálculos de ondas parciales utilizando el potencial de Bote et al. (2009b), con  $A_{\text{abs}} = 0,75$ . Las curvas a trazos representan los cálculos utilizando sólo la parte real de este potencial, es decir, ignorando los efectos de absorción inelástica. Los símbolos son medidas experimentales absolutas de las referencias indicadas.

los efectos de absorción inelástica, se obtiene directamente de la aproximación de plasma local, es decir, las interacciones inelásticas en el sólido se describen considerando que los electrones en cada elemento de volumen responden como si formaran parte de un gas de electrones homogéneo con densidad igual a la densidad electrónica local. Este potencial contiene un parámetro multiplicativo empírico e independiente de la energía,  $A_{\text{abs}}$ , que da cuenta de las posibles imprecisiones de la aproximación de plasma local y debería

tomar valores cercanos a la unidad. En el caso de colisiones elásticas con átomos libres,  $A_{\text{abs}}$  puede determinarse comparando la SED teórica, obtenida con el método de ondas parciales, con SEDs experimentales absolutas (ver la Figura 4.19).

El principal objetivo del nuestro trabajo (Bote et al., 2009b) era confirmar una predicción cualitativa de Jablonski et al. (2004), quienes en base a la fórmula asintótica de Bethe para la sección eficaz total inelástica, sugirieron que los efectos de absorción deberían ser mucho menores en sólidos que en gases. En primer lugar comprobamos que, tomando  $A_{\text{abs}} = 0,75$ , el modelo de potencial óptico proporciona SEDs para átomos libres que están en excelente acuerdo con las medidas experimentales (ver la Figura 4.20). Por otro lado, nuestros cálculos mostraron que al tomar  $A_{\text{abs}} = 0,75$ , el teorema óptico proporciona secciones eficaces de absorción  $\sigma_{\text{abs}}$  que, para proyectiles suficientemente energéticos, están en buen acuerdo con la sección eficaz inelástica total (ver la Figura 4.20). El hecho que interesa aquí es que, cuando no se tienen medidas absolutas de la SED elástica, el valor del parámetro de absorción  $A_{\text{abs}}$  se puede determinar ajustando la sección eficaz inelástica para proyectiles de alta energía. Es decir, la fórmula asintótica de la sección eficaz inelástica total, ec. (4.60), permite determinar la intensidad de la componente imaginaria del modelo de potencial óptico. Bote et al. muestran que esta conclusión es también válida para el scattering elástico de electrones y positrones en sólidos.



**Figura 4.20:** Sección eficaz total (elástica + inelástica) para el scattering de electrones por átomos de argón, como función de la energía cinética del proyectil. La curva continua se ha obtenido con un cálculo de ondas parciales utilizando el potencial óptico de Bote et al. (2009b), con  $A_{\text{abs}} = 0,75$ . La curva a trazos representa la sección eficaz total  $\sigma_{\text{el}}$  para el scattering elástico calculada a partir de la parte real del potencial; la línea punteada representa la suma de  $\sigma_{\text{el}}$  y de la sección eficaz inelástica evaluada a partir de la fórmula de Bethe (4.60). Los símbolos son medidas experimentales de las referencias indicadas.

# Capítulo 5

## Cálculo de secciones eficaces de ionización en la DWBA

En este Capítulo describiremos el esquema teórico, los métodos de cálculo y los resultados de un estudio sistemático de la ionización de capas internas de átomos por impacto de electrones y positrones. El objetivo final de este estudio es elaborar una base de datos completa de secciones eficaces de ionización de las capas K, L y M de todos los elementos, para proyectiles con energías arbitrarias. Esta información es esencial para la simulación Monte Carlo de la generación de rayos x por haces de electrones y positrones, y para el análisis cuantitativo en espectroscopia Auger y en microanálisis con sonda de electrones.

Excepto para la capa K de elementos pesados, la curva de la sección eficaz de ionización en función de la energía  $E$  del proyectil presenta un máximo ancho para energías del orden de 2 a 4 veces la energía de ionización  $E_a$ . Es decir, la ionización es más probable cuando la energía del proyectil no es demasiado mayor que  $E_a$ . Por desgracia, a estas energías la fiabilidad de la PWBA es cuestionable, debido principalmente a que ignora el efecto del potencial del átomo blanco en las funciones de onda del proyectil y, en el caso de colisiones de electrones, los efectos de intercambio. Ambos efectos se pueden describir de forma consistente utilizando la DWBA. Segui et al. (2003) y Colgan et al. (2006) han mostrado que una forma relativamente sencilla de la DWBA, en la que se ignora la interacción transversal, proporciona secciones eficaces de ionización en buen acuerdo con medidas experimentales recientes para proyectiles con energías próximas al umbral de ionización. El problema de la DWBA es que la dificultad de los cálculos aumenta con  $E$ , haciéndose prohibitiva para energías del orden de  $10E_a$ .

Para extender los cálculos a energías mayores, consideraremos que la DWBA, en la forma empleada por Segui et al. (2003), describe razonablemente los efectos de distorsión e intercambio. Comparando la DWBA con la PWBA, deduciremos la corrección a añadir a la segunda para dar cuenta de estos efectos. Obtendremos así una PWBA corregida que permitirá calcular la sección eficaz de ionización para proyectiles con energías cualesquiera (salvo en un intervalo estrecho que cubriremos por interpolación).

## 5.1. Aproximación de Born con ondas planas distorsionadas

Por completitud, en esta Sección presentamos la DWBA en la forma empleada por Segui et al.(2003), ligeramente modificada para adecuarla a nuestros propósitos. Como hemos indicado en el Capítulo 1, los estados inicial y final del proyectil se representan por ondas planas distorsionadas, que son soluciones de la ecuación de Dirac con un potencial central  $V_P(r)$ . Para las colisiones de electrones, suponemos que el proyectil “siente” el mismo potencial que los electrones atómicos, es decir, tomamos  $V_P(r) = V_{\text{DHFS}}(r)$ . Cuando el proyectil es un positrón, hacemos  $V_P(r) = -V_{\text{DHFS}}(r)$ , es decir, suponemos que los potenciales que sienten un electrón y un positrón difieren sólo en el signo. Para una justificación más detallada de esta elección, véase Segui et al. (2003). La DWBA descansa en la suposición de que el potencial  $V_T(r)$  describe efectivamente la interacción del proyectil con los electrones no activos (espectadores) del blanco, de modo que la perturbación  $\mathcal{H}''$ , ec. (2.9), se reduce a la interacción entre el proyectil y el electrón activo,  $\mathcal{H}_{\text{int}}(0, 1)$ . Como que, en general, la interacción transversal tiene un efecto menor, Segui et al. consideraron que la interacción es puramente coulombiana (longitudinal, L)

$$\mathcal{H}_{\text{int}}^L(0, 1) = -\frac{Z_0 e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}. \quad (5.1)$$

A menudo, esta formulación de la DWBA se califica como semi-relativista, ya que ignora la interacción transversal.

Consideremos primero las colisiones de positrones, que no presentan efectos de intercambio. La sección eficaz de ionización viene dada por la ec. (2.49). Para calcular la cantidad  $\mathcal{J}_{fi}$ , ec. (2.53), utilizamos el desarrollo del potencial de Coulomb en términos de los tensores esféricos de Racah (ver, por ejemplo, Edmonds, 1960),

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}|} = \sum_{L=0}^{\infty} \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \mathbf{C}^{(L)}(\hat{\mathbf{r}}_0) \cdot \mathbf{C}^{(L)}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (5.2)$$

con  $r_{<} = \min(r_0, r)$  y  $r_{>} = \max(r_0, r)$  y el desarrollo (B.21) de las ondas distorsionadas. Las integrales angulares y las sumas sobre números cuánticos magnéticos se pueden evaluar analíticamente utilizando álgebra elemental de momento angular. La expresión resultante para la SED en pérdida de energía es

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_+^{\text{(DW,L)}}}{dW} &= \frac{2Z_0^2 e^4}{\hbar v} \frac{(E - W + 2m_e c^2)(W - E_a + 2m_e c^2)}{c^4 \hbar^4 k^2 k' k_b} \frac{E + 2m_e c^2}{E + m_e c^2} \\ &\times \sum_{\kappa_b} \sum_{\kappa} \sum_{\kappa'} \sum_L \frac{1}{[L]} \left( X_{\ell' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \right)^2, \end{aligned} \quad (5.3)$$

donde

$$X_{\ell' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \equiv \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(L)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle \langle \ell' \frac{1}{2} j' || \mathbf{C}^{(L)} || \ell' \frac{1}{2} j' \rangle R_{\ell' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a}, \quad (5.4)$$

y las cantidades  $R_{\epsilon'\kappa';\epsilon_b\kappa_b;L}^{\epsilon\kappa;n_a\kappa_a}$  son integrales de Slater,

$$R_{\epsilon'\kappa';\epsilon_b\kappa_b;L}^{\epsilon\kappa;n_a\kappa_a} = \int \int dr_0 dr \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} [P_{\epsilon\kappa}(r_0)P_{\epsilon'\kappa'}(r_0) + Q_{\epsilon\kappa}(r_0)Q_{\epsilon'\kappa'}(r_0)] \\ \times [P_{n_a\kappa_a}(r)P_{\epsilon_b\kappa_b}(r) + Q_{n_a\kappa_a}(r)Q_{\epsilon_b\kappa_b}(r)]. \quad (5.5)$$

Los elementos de matriz reducidos de los tensores de Racah,  $\langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(L)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle$ , vienen dados por la fórmula (2.79).

En el caso de colisiones de electrones, debemos dar cuenta de los efectos de intercambio antisimetrizando los estados inicial y final. Como hemos supuesto que los electrones proyectil y blanco se mueven en el mismo potencial (DHFS), sus orbitales son ortogonales, y los elementos de la matriz de transición toman la forma

$$T_{fi,-} \equiv \left\langle \psi_{\mathbf{k}',m_{S'}}^{(-)}(0) \psi_{\epsilon_b\kappa_b m_b}(1) \left| \mathcal{H}_{\text{int}}^L(0,1) \right| \psi_{\mathbf{k},m_S}^{(+)}(0) \psi_{n_a\kappa_a m_a}(1) \right\rangle \\ - \left\langle \psi_{\mathbf{k}',m_{S'}}^{(-)}(1) \psi_{\epsilon_b\kappa_b m_b}(0) \left| \mathcal{H}_{\text{int}}^L(0,1) \right| \psi_{\mathbf{k},m_S}^{(+)}(0) \psi_{n_a\kappa_a m_a}(1) \right\rangle. \quad (5.6)$$

La SED en pérdida de energía se obtiene siguiendo los mismos pasos que para los positrones, y es

$$\frac{d\sigma_-^{\text{DW},L}}{dW} = \frac{2Z_0^2 e^4}{\hbar v} \frac{(E - W + 2m_e c^2)(W - E_a + 2m_e c^2)}{c^4 \hbar^4 k^2 k' k_b} \frac{E + 2m_e c^2}{E + m_e c^2} \\ \times \sum_{\kappa} \sum_{\kappa'} \sum_{\kappa_b} \left[ \sum_L \frac{1}{[L]} (X_{\epsilon'\kappa';\epsilon_b\kappa_b;L}^{\epsilon\kappa;n_a\kappa_a})^2 + \sum_{L'} \frac{1}{[L']} (X_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon'\kappa';L'}^{\epsilon\kappa;n_a\kappa_a})^2 \right. \\ \left. - 2 \sum_L \sum_{L'} (-1)^{L+L'+1} \left\{ \begin{matrix} j_a & j_b & L \\ j & j' & L' \end{matrix} \right\} X_{\epsilon'\kappa';\epsilon_b\kappa_b;L}^{\epsilon\kappa;n_a\kappa_a} X_{\epsilon_b\kappa_b;\epsilon'\kappa';L'}^{\epsilon\kappa;n_a\kappa_a} \right]. \quad (5.7)$$

donde  $\{\:::\}$  son símbolos  $6j$  de Wigner. El coeficiente  $X_{\epsilon_b\kappa_b,\epsilon\kappa,L}^{\epsilon\kappa;n_a\kappa_a}$  se obtiene de (5.4) haciendo los cambios  $\epsilon'\kappa' \leftrightarrow \epsilon_b\kappa_b$  ( $E - W \leftrightarrow W - E_a$ ). El primer y segundo término entre paréntesis corresponden a transiciones directas y de intercambio, respectivamente. El tercer término resulta de la interferencia entre las ondas dispersadas directa y de intercambio.

Como ya hemos indicado (ver la Sección 3.4), consideramos como electrón primario al más rápido de los electrones después de la colisión, por lo que la máxima energía que puede perder el electrón proyectil es  $W_{\text{max}} = (E + E_a)/2$ . Los detalles del cálculo numérico de las SEDs en pérdidas de energía (5.3) y (5.7), pueden encontrarse en Segui et al. (2003).

## 5.2. Corrección de distorsión y de intercambio a la PWBA

Para estimar el error de la PWBA que resulta de ignorar los efectos de distorsión e intercambio, comparamos las secciones eficaces calculadas a partir de la PWBA y la DWBA, para energías cinéticas del proyectil bajas. Para que esta comparación sea consistente, ignoramos por el momento la contribución de la interacción transversal a la SED en la PWBA.

Consideremos primero las colisiones de positrones. Recordando que cuando el potencial de distorsión  $V_P$  se hace tender a cero, las ondas planas distorsionadas se reducen a ondas planas de energía positiva, podemos escribir los elementos de la matriz de transición en la PWBA como

$$T_{fi}^{\text{PW}} = \left\langle \phi_{\mathbf{k}', m_{S'}, +1}(0) \psi_{\epsilon_b \kappa_b m_b}(1) \left| \mathcal{H}_{\text{int}}^L(0, 1) \right| \phi_{\mathbf{k}, m_S, +1}(0) \psi_{n_a \kappa_a m_a}(1) \right\rangle. \quad (5.8)$$

Estos elementos de matriz pueden considerarse también como el límite  $V_P \rightarrow 0$  de los elementos de matriz de la DWBA, (2.23). En este límite, las funciones radiales del proyectil se reducen a las funciones Bessel esféricas, ver la ec. (B.23). Así, la SED en pérdida de energía en la PWBA para colisiones con positrones (considerando sólo la interacción longitudinal) se puede calcular utilizando las mismas fórmulas que en la DWBA, ecs. (5.3) y (5.3), con las funciones de onda radiales del proyectil sustituidas por funciones de Bessel esféricas. Esto es,

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_+^{\text{PW},L}}{dW} &= \frac{2Z_0^2 e^4}{\hbar v} \frac{(E - W + 2m_e c^2)(W - E_a + 2m_e c^2)}{c^4 \hbar^4 k^2 k' k_b} \frac{E + 2m_e c^2}{E + m_e c^2} \\ &\times \sum_{\kappa_b} \sum_{\kappa} \sum_{\kappa'} \sum_L \frac{1}{[L]} \left( \tilde{X}_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \right)^2, \end{aligned} \quad (5.9)$$

con

$$\tilde{X}_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} = \langle \ell_a \frac{1}{2} j_a || \mathbf{C}^{(L)} || \ell_b \frac{1}{2} j_b \rangle \langle \ell' \frac{1}{2} j' || \mathbf{C}^{(L)} || \ell' \frac{1}{2} j' \rangle \tilde{R}_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \quad (5.10)$$

y

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} &= \iint dr_0 dr \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \left[ P_{\epsilon \kappa}^{(0)}(r_0) P_{\epsilon' \kappa'}^{(0)}(r_0) + Q_{\epsilon \kappa}^{(0)}(r_0) Q_{\epsilon' \kappa'}^{(0)}(r_0) \right] \\ &\times \left[ P_{n_a \kappa_a}(r) P_{\epsilon_b \kappa_b}(r) + Q_{n_a \kappa_a}(r) Q_{\epsilon_b \kappa_b}(r) \right], \end{aligned} \quad (5.11)$$

donde  $P_{\epsilon \kappa}^{(0)}(r)$  y  $Q_{\epsilon \kappa}^{(0)}(r)$  son las funciones de onda radiales correspondientes a estados libres [es decir, con  $V_P(r) = 0$ ] de energía positiva, dados por las ecs. (B.23). La diferencia

entre las secciones eficaces obtenidas de la DWBA y de la PWBA se puede expresar como

$$\begin{aligned}
\frac{d\Delta\sigma_+}{dW} &\equiv \frac{d\sigma_+^{(DW,L)}}{dW} - \frac{d\sigma_+^{(PW,L)}}{dW} \\
&= \frac{2Z_0^2 e^4}{\hbar v} \frac{(E - W + 2m_e c^2)(W - E_a + 2m_e c^2)}{c^4 \hbar^4 k^2 k' k_b} \frac{E + 2m_e c^2}{E + m_e c^2} \\
&\quad \times \sum_{\kappa_b} \sum_{\kappa} \sum_{\kappa'} \sum_L \frac{1}{[L]} \Delta X_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \left( 2\tilde{X}_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} + \Delta X_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \right), \quad (5.12)
\end{aligned}$$

donde

$$\Delta X_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} = X_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} - \tilde{X}_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \quad (5.13)$$

es la “corrección” al coeficiente  $X$  de la PWBA.

Cálculos numéricos indican que, para  $E \gtrsim 10E_a$ , la diferencia entre las secciones eficaces totales obtenidas de la DWBA y de la PWBA, decrece en magnitud cuando la energía del proyectil crece, siendo menores que el  $\sim 5\%$  para  $E$  mayores que aproximadamente  $20E_a$ . Las diferencias entre las correspondientes SEDs pueden ser substanciales a esas energías, pero proceden mayormente de ondas parciales con un momento angular orbital  $\ell$  pequeño o moderado. Cuando  $\ell$  es grande, la barrera centrífuga mantiene al proyectil lejos del núcleo, donde el potencial de distorsión es pequeño, por lo que esperamos que la PWBA proporcione la contribución correcta a la SED. En otras palabras, las series de ondas parciales (5.12) deberían converger más rápidamente que las series de la DWBA.

De manera similar, en el caso de electrones tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma_-^{(PW,L)}}{dW} &= \frac{2Z_0^2 e^4}{\hbar v} \frac{(E - W + 2m_e c^2)(W - E_a + 2m_e c^2)}{c^4 \hbar^4 k^2 k' k_b} \frac{E + 2m_e c^2}{E + m_e c^2} \\
&\quad \times \sum_{\kappa_b} \sum_{\kappa} \sum_{\kappa'} \left[ \sum_L \frac{1}{[L]} \left( \tilde{X}_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b, L}^{\epsilon \kappa, n_a \kappa_a} \right)^2 + \sum_{L'} \frac{1}{[L']} \left( \tilde{X}_{\epsilon_b \kappa_b, \epsilon' \kappa', L'}^{\epsilon \kappa, n_a \kappa_a} \right)^2 \right], \quad (5.14)
\end{aligned}$$

y la correspondiente corrección viene dada por

$$\begin{aligned}
\frac{d\Delta\sigma_{\pm}}{dW} &\equiv \frac{d\sigma_{\pm}^{(DW,L)}}{dW} - \frac{d\sigma_{\pm}^{(PW,L)}}{dW} \\
&= \frac{2Z_0^2 e^4}{\hbar v} \frac{(E - W + 2m_e c^2)(W - E_a + 2m_e c^2)}{c^4 \hbar^4 k^2 k' k_b} \frac{E + 2m_e c^2}{E + m_e c^2} \sum_{\kappa_b} \sum_{\kappa} \sum_{\kappa'} \\
&\times \left[ \sum_L \frac{1}{[L]} \Delta X_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \left( 2\tilde{X}_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} + \Delta X_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b; L}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \right) \right. \\
&\quad + \sum_{L'} \frac{1}{[L']} \Delta X_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon' \kappa'; L'}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \left( 2\tilde{X}_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon' \kappa'; L'}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} + \Delta X_{\epsilon_b \kappa_b; \epsilon' \kappa'; L'}^{\epsilon \kappa; n_a \kappa_a} \right) \\
&\quad \left. - 2 \sum_L \sum_{L'} (-1)^{L+L'+1} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & L \\ j & j' & L' \end{Bmatrix} X_{\epsilon' \kappa'; \epsilon_b \kappa_b, L}^{\epsilon \kappa, n_a \kappa_a} X_{\epsilon_b \kappa_b, \epsilon' \kappa', L'}^{\epsilon \kappa, n_a \kappa_a} \right]. \quad (5.15)
\end{aligned}$$

Llegados a este punto, podemos combinar la SED en pérdida de energía de la PWBA definida por la ec. (2.108) (teniendo en cuenta sólo la contribución de la interacción longitudinal) con la corrección DWBA dada por las ecs. (5.15) y (5.12) para electrones y positrones, respectivamente,

$$\frac{d\sigma_{\pm}^{(L)}}{dW} = \frac{d\sigma_{\pm}^{(PW,L)}}{dW} + \frac{d\Delta\sigma_{\pm}}{dW}. \quad (5.16)$$

Finalmente, integrando esta SED en pérdida de energía, obtenemos la sección eficaz total de ionización,

$$\sigma_{\pm}^{(L)} = \int_{E_a}^E \frac{d\sigma_{\pm}^{(PW,L)}}{dW} dW + \int_{E_a}^{W_{\max}} \frac{d\Delta\sigma_{\pm}}{dW} dW = \sigma_{\pm}^{(PW,L)} + \Delta\sigma_{\pm}^{(L)}. \quad (5.17)$$

Aquí la pérdida de energía máxima en la PWBA se toma igual a  $E$ , tanto para electrones como positrones, porque los efectos de intercambio no han sido tenidos en cuenta en la PWBA. Sin embargo, en el caso de colisiones de electrones, la corrección  $\Delta\sigma_{\pm}^{(L)}$  da cuenta de los efectos de intercambio de manera consistente. Nos referimos a la DWBA, calculada de acuerdo con las fórmulas (5.16) y (5.17), como la PWBA “corregida” (CPWBA). Evidentemente, si la energía del proyectil es suficientemente pequeña como para que las series de ondas parciales de la DWBA converjan, las SEDs y la sección eficaz total de ionización calculadas a partir de las fórmulas de la CPWBA coinciden con las que resultan de la DWBA semi-relativista.

Los cálculos numéricos muestran que las series (5.12) y (5.15) no convergen más rápidamente que las correspondientes de la DWBA, ecs. (5.3) y (5.7). Sin embargo, para momentos angulares grandes, la contribución a la SED de cada término de (5.12) y (5.15) es mucho menor que el término equivalente de (5.3) y (5.7). Además, el cálculo de la

parte longitudinal de SED en la PWBA,  $d\sigma^{(PW,L)}/dW$ , no presenta problemas numéricos (al menos en el rango de energías donde las correcciones de distorsión e intercambio son relevantes). En consecuencia, el cálculo de las correcciones (5.12) y (5.15) es, en la práctica, más eficiente que el cálculo directo de las series de la DWBA. Podemos verificar esta afirmación en la Tabla 5.1, que muestra los cocientes entre las secciones eficaces de ionización de varias capas del oro por impacto de electrones, evaluadas con la DWBA y con la CPWBA (es decir a partir de las series (5.7) y (5.15), respectivamente) considerando sólo la interacción longitudinal. En ambas aproximaciones, los sumatorios sobre  $\kappa$ ,  $\kappa'$  y  $\kappa_b$  han sido truncados en el valor de corte  $\kappa_{max}$  indicado en la Tabla. Consideramos que la sección eficaz obtenida para la CPWBA con el valor de corte más alto,  $\kappa_{max} = 30$ , como el valor “exacto” de la sección eficaz. La cantidad tabulada es la razón de cada sección eficaz y este valor “exacto”. Vemos que la CPWBA converge más rápidamente que la DWBA. Si consideramos como aceptable una precisión del 1.5 %, la CPWBA da un valor aceptable con  $\kappa_{max} = 15$ , mientras que la DWBA sólo consigue esta precisión con  $\kappa_{max} = 30$ . Para mantener el tiempo de cálculo dentro de unos límites razonables, todos los resultados numéricos que se dan a continuación han sido obtenidos con  $\kappa_{max} = 20$ , por lo que los errores de redondeo son menores que  $\sim 0,5\%$ .

### 5.3. Secciones eficaces totales de ionización

Para obtener secciones eficaces correctas para las capas internas de elementos pesados, debemos tener en cuenta la contribución de la interacción transversal. Como ésta sólo es apreciable para proyectiles muy energéticos, resulta razonable describirla utilizando la PWBA relativista. Así, la SED en pérdida de energía en la CPWBA, incluyendo las contribuciones tanto transversal como longitudinal, se expresa

$$\frac{d\sigma_{\pm}}{dW} = \frac{d\sigma^{(PW)}}{dW} + \frac{d\Delta\sigma_{\pm}}{dW}, \quad (5.18)$$

donde la SED de la PWBA viene dada por la ec. (5.28). La sección eficaz total es

$$\sigma_{\pm} = \int_{E_a}^E \frac{d\sigma^{(PW)}}{dW} dW + \int_{E_a}^{W_{max}} \frac{d\Delta\sigma_{\pm}}{dW} dW = \sigma^{(PW)} + \Delta\sigma_{\pm}. \quad (5.19)$$

Hemos desarrollado programas Fortran para calcular la sección eficaz en la CPWBA, de acuerdo con la fórmula (5.19). El cálculo converge para energías cinéticas  $E$  de hasta aproximadamente  $25E_a$ , debido, en parte, a que truncamos las series de ondas parciales, ecs. (5.12) y (5.15), en  $\kappa_{max}$ . El tiempo de cálculo crece con la energía cinética del proyectil, porque la convergencia de las series de ondas parciales se enlentece al aumentar la energía. Por ejemplo, en un procesador Pentium<sup>TM</sup> IV 3 MHz, el cálculo de la sección eficaz (5.19) para electrones con energías de  $E = 1,02E_a$  y  $16E_a$  tarda 10 y 90 minutos, respectivamente.

Utilizando la CPWBA, hemos calculado las secciones eficaces de ionización para las capas K, L y M de todos los elementos, desde el hidrógeno ( $Z = 1$ ) hasta el einstenio

**Cuadro 5.1:** Convergencia de las series DWBA, ec. (5.7), y las de la CPWBA, ec. (5.15), para el caso de la ionización de capas internas por impacto de electrones con una energía de  $E = 10E_a$ . La cantidad tabulada es la razón de las secciones eficaces de ionización obtenidas de la DWBA y de la CPWBA, con el valor correspondiente a la serie de ondas parciales truncada en el valor indicado de  $\kappa_{\max}$ , y la sección eficaz “exacta” (CPWBA con  $\kappa_{\max} = 30$ ).

Capa	$\kappa_{\max} =$	10	15	20	25	30
1s <sub>1/2</sub>	DWBA	0,700	0,890	0,961	0,986	0,996
	CPWBA	0,965	0,988	0,996	0,999	1,000
2s <sub>1/2</sub>	DWBA	0,609	0,854	0,946	0,978	0,991
	CPWBA	0,975	0,987	0,996	0,999	1,000
2p <sub>1/2</sub>	DWBA	0,650	0,863	0,945	0,978	0,992
	CPWBA	0,964	0,987	0,996	0,999	1,000
2p <sub>3/2</sub>	DWBA	0,639	0,858	0,941	0,974	0,989
	CPWBA	0,965	0,987	0,996	0,999	1,000
3s <sub>1/2</sub>	DWBA	0,507	0,798	0,926	0,970	0,987
	CPWBA	0,994	0,985	0,995	0,999	1,000
3p <sub>1/2</sub>	DWBA	0,538	0,809	0,924	0,967	0,985
	CPWBA	0,980	0,984	0,995	0,999	1,000
3p <sub>3/2</sub>	DWBA	0,532	0,808	0,923	0,966	0,985
	CPWBA	0,978	0,984	0,995	0,999	1,000
3d <sub>3/2</sub>	DWBA	0,583	0,826	0,924	0,965	0,984
	CPWBA	0,954	0,984	0,995	0,999	1,000
3d <sub>5/2</sub>	DWBA	0,585	0,826	0,924	0,965	0,984
	CPWBA	0,956	0,984	0,995	0,999	1,000

( $Z = 99$ ), para electrones y positrones con energías cinéticas desde  $1,02E_a$  ( $1,05E_a$  para positrones) hasta  $16E_a$ . El cálculo PWBA, ec. (5.28), da secciones eficaces totales que en  $E = 16E_a$  difieren de los valores CPWBA en menos de un 7%. Esta diferencia se debe principalmente a que, como ya hemos dicho, la PWBA no tiene en cuenta la distorsión de las funciones de onda del proyectil; el efecto del intercambio decrece rápidamente con la energía y es despreciable para  $E = 16E_a$ . Algunos autores han sugerido que el efecto de distorsión se puede describir aproximadamente suponiendo que el electrón proyectil adquiere una energía cinética adicional  $bE_a$  cuando cae dentro del potencial del átomo (ver, por ejemplo, Mayol y Salvat, 1990; Kim, 2001).

La expresión (2.65) muestra que en la PWBA la SED es inversamente proporcional a la cantidad  $m_e v^2$ , que en el dominio no-relativista es (el doble de) la energía cinética del proyectil. Este hecho sugiere modificar la PWBA de manera empírica multiplicándola

por un factor de escala  $E/(E + bE_a)$ , donde  $b$  es un parámetro independiente de la energía, característico de cada elemento y de cada capa, que determinamos imponiendo que la sección eficaz sea continua en  $E = 16E_a$ . Es decir, tomamos

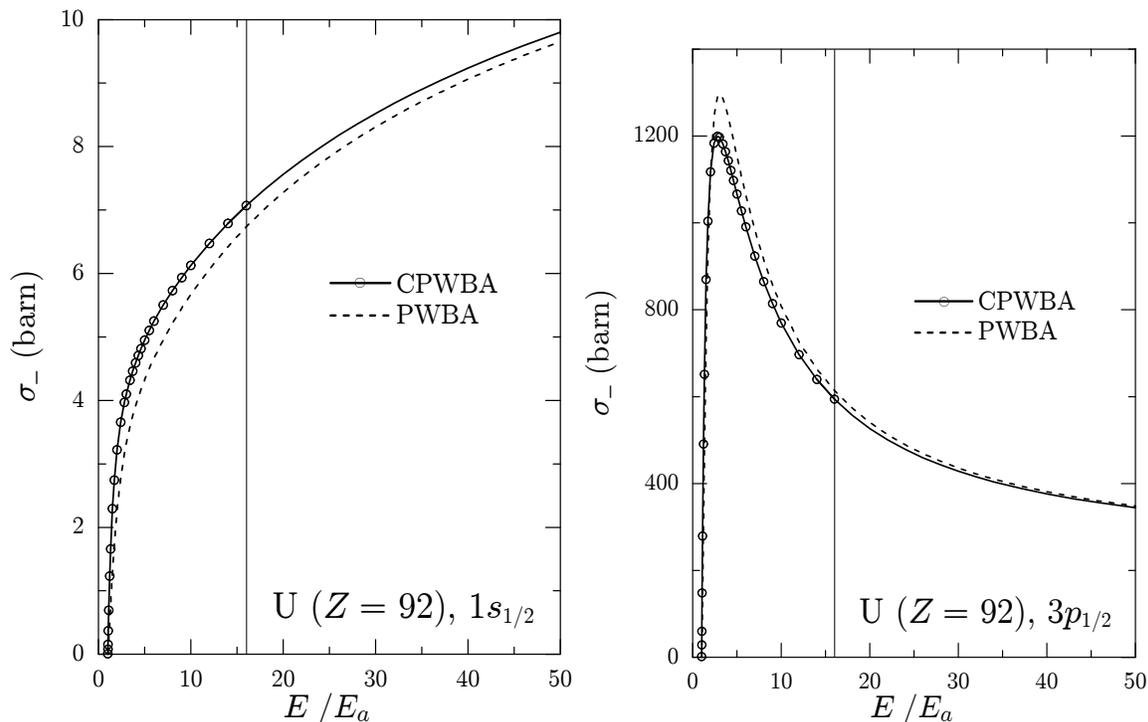
$$\sigma_{\pm}^{(\text{CPWBA})} = \begin{cases} \sigma^{(\text{PW})} + \Delta\sigma_{\pm} & \text{si } E \leq 16E_a, \\ \frac{E}{E + bE_a} \sigma_{\pm}^{(\text{PW})} & \text{si } E > 16E_a. \end{cases} \quad (5.20)$$

Nótese que el factor de escala  $E/(E + bE_a)$  tiende a la unidad para energías altas ( $E \gg E_a$ ), es decir, deja inalterada la sección eficaz de PWBA, en el dominio de energías donde se espera que ésta sea correcta.

La Figura 5.1 muestra la sección eficaz que se obtiene de la ec. (5.20) para la ionización de las capas K y M2 ( $3p_{1/2}$ ) del uranio por impacto de electrones como función de energía cinética. Los círculos abiertos representan los resultados numéricos del cálculo CPWBA, ec. (5.19); las curvas a trazos representan la sección eficaz de PWBA, ec. (2.108), y las curvas continuas son el resultado de ec. (5.20). Obsérvese como las dos ramas de la ec. (5.20) empalman con suavidad en  $E = 16E_a$ . Para verificar la consistencia del escalado de la PWBA, hemos realizado cálculos con la CPWBA, ec. (5.20), para energías  $E$  mayores que  $16E_a$ , hasta aproximadamente  $20E_a$ , y hemos comprobado que los resultados concuerdan con la PWBA escalada con una precisión del 0.2 %. Finalmente, es interesante observar que para las capas K de los elementos pesados, la PWBA da valores de las secciones eficaces que son más pequeños que los de la CPWBA, en el rango de energías donde esta última puede ser evaluada. Esto está en contradicción con la simple suposición de que la PWBA puede ser corregida parcialmente considerando que el efecto del potencial atómico sobre las funciones de onda del proyectil es equivalente a un *incremento* neto en la energía cinética (Mayol y Salvat, 1990; Kim, 2001).

El uso combinado de la DWBA semi-relativista y de la PWBA que acabamos de describir, nos dota de un descripción teórica realista de la ionización de capas internas tanto por impacto de electrones como de positrones, con la que podemos calcular secciones eficaces de ionización de átomos neutros e iones positivos, desde la energía de ionización hasta energías arbitrariamente grandes. Hemos implementado este esquema de cálculo en una serie de programas Fortran, con los que hemos generado una base de datos de secciones eficaces de ionización para las capas K, L y M de todos los elementos, desde el hidrógeno ( $Z = 1$ ) al einstenio ( $Z = 99$ ), para electrones y positrones con energías que van desde 50 eV hasta 1 GeV.

De ahora en adelante, nos referiremos a las secciones eficaces obtenidas con la CPWBA (incluyendo la contribución transversal) como DWBA, es decir,  $\sigma_{\pm}^{(\text{CPWBA})} \rightarrow \sigma_{\pm}^{(\text{DWBA})}$ .



**Figura 5.1:** Secciones eficaces totales para la ionización de las capas K y M2 del uranio por impacto de electrones. Los círculos abiertos son los resultados de nuestro cálculo CPWBA, ec. (5.19). Las curvas continuas son los resultados de los resultados de la ec. (5.20), y las curvas de trazos discontinuos, representan las secciones eficaces PWBA dadas por ec. (5.28). Las líneas verticales indican la posición de la energía de empalme,  $E = 16E_a$ .

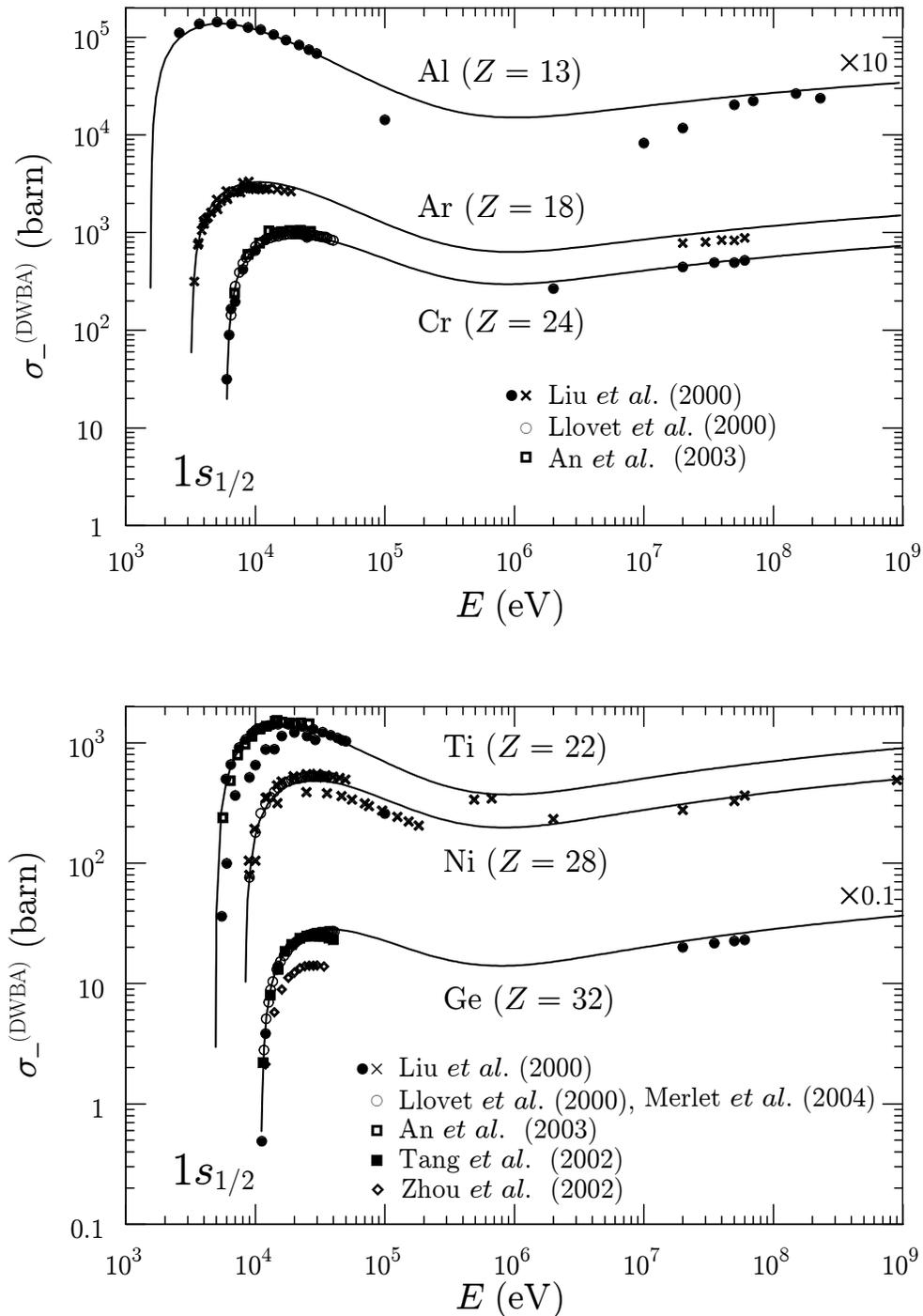
## 5.4. Comparación con datos experimentales

Para comprobar la validez de nuestro esquema teórico y de las secciones eficaces calculadas, en esta Sección, comparamos los resultados numéricos con la información experimental disponible. Desde principios de los años treinta, multitud de grupos experimentales de todo el mundo han medido secciones eficaces de ionización. Sin embargo, a pesar de la continuada actividad en el campo, la información experimental de que disponemos es todavía muy limitada, y en muchos casos, insuficiente para verificar experimentalmente las diferentes aproximaciones teóricas. La Figura 5.2 muestra las secciones eficaces de ionización de la capa K para los elementos Al, Ar, Ti, Cr, Ni y Ge. Los cálculos parecen encajar razonablemente con los experimentos, y además, el acuerdo es incluso mejor para los experimentos recientes, los cuales se espera que sean más precisos.

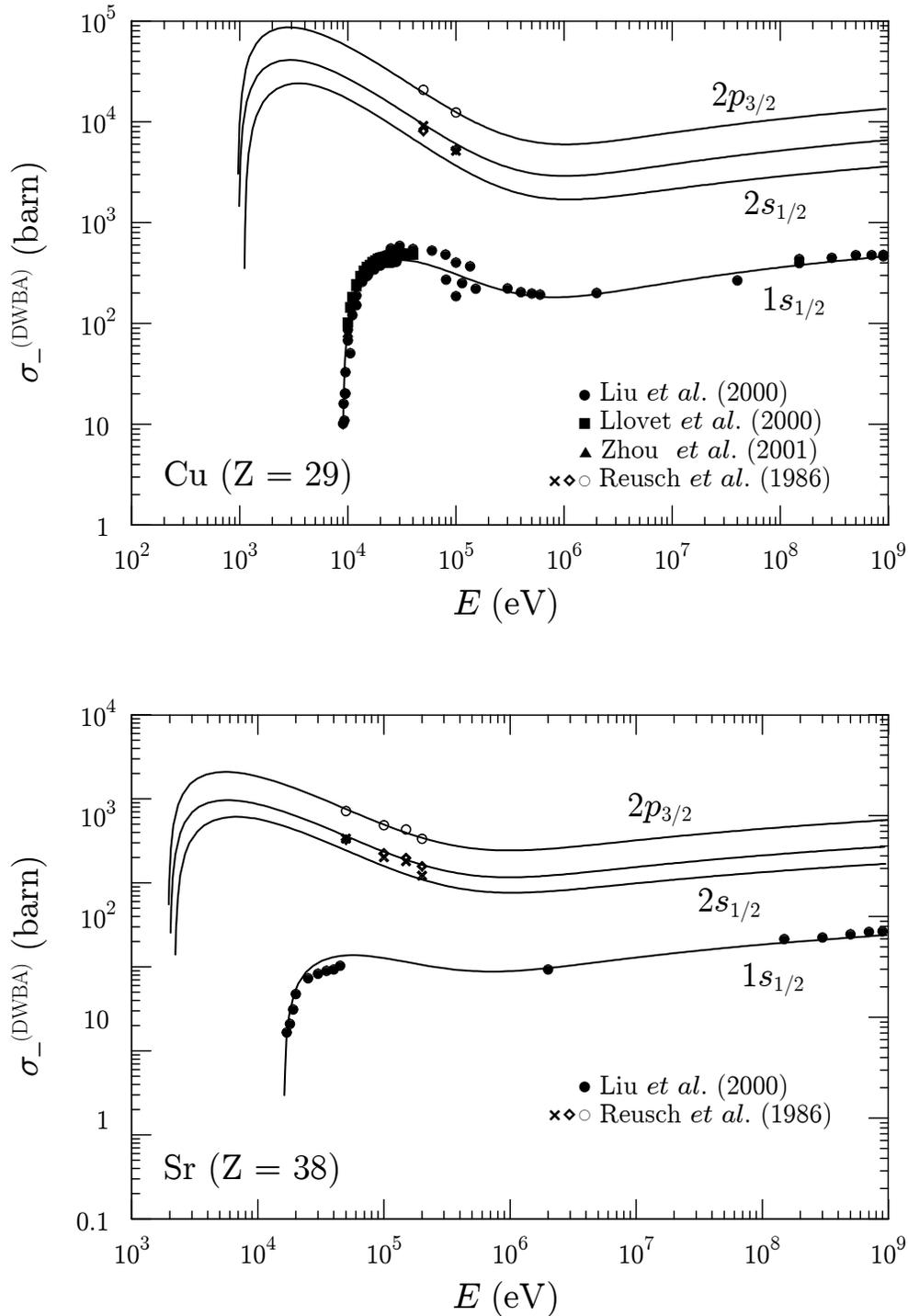
La Figura 5.3 muestra las secciones eficaces de ionización por impacto de electrones, calculadas y medidas, de la capa K y de las subcapas L de los elementos Cu, Sr, Ag, Xe, W, Au, Pb y Bi. Para las capas K, cuando se dispone de suficiente información experimental, el grado de acuerdo entre la teoría y los experimentos es similar al observado

para el caso de los elementos ligeros que se muestran en la Figura 5.2. En el caso de las subcapas L, la comparación no es concluyente debido a que los datos experimentales están afectados por incertidumbres considerables. Éstas se deben, en parte, a que las secciones eficaces de ionización se obtienen a partir de las secciones eficaces de producción de rayos x medidas experimentalmente, utilizando rendimientos de fluorescencia y coeficientes Coster-Krönig que, en el caso de las subcapas L, tienen incertidumbres del orden del 20 % o mayores (ver, por ejemplo, Krause, 1979).

La información de las secciones eficaces de ionización de capas internas por impacto de positrones medidas experimentalmente de la que se dispone en la literatura es muy escasa. La Figura 5.4 muestra la comparación de las secciones eficaces medidas y calculadas para la ionización de las capas K de átomos de cobre y de plata por impacto de positrones. Para ilustrar las diferencias entre electrones y positrones, la Figura 5.4 también muestra secciones eficaces calculadas para la ionización de capas K por impacto de electrones. Vemos que, para energías relativamente pequeñas, la secciones eficaces para electrones son substancialmente mayores que las de positrones. Esta diferencia se debe a una combinación de los efectos de intercambio (que no se dan para los positrones) y al signo opuesto del potencial distorsión que “sienten” los electrones y los positrones. Los positrones, al ser repelidos por el campo del átomo, tienen más dificultad para producir la ionización.



**Figura 5.2:** Secciones eficaces totales por impacto de electrones de la capa K de los elementos Al, Ar, Ti, Cr, Ni y Ge, como función de la energía  $E$  del proyectil. Las curvas son el resultado de la CPWBA, ec. (5.20). Los símbolos representan la información experimental; los círculos abiertos (Llovet et al., 2000; Llovet et al., 2004), los cuadrados abiertos (An et al., 2003), los cuadrados sólidos (Tang et al., 2002) y los diamantes abiertos (Zhou et al., 2002) corresponden a medidas recientes. Los círculos sólidos y las cruces son los resultados de distintos grupos experimentales, que fueron compilados por Liu et al. (2000).



**Figura 5.3:** Secciones eficaces totales de ionización por impacto de electrones de la capa K y de las subcapas L de los elementos Cu, Sr, Ag, Xe, W, Au, Pb y Bi. Los círculos sólidos corresponden a medidas experimentales para la capa K pertenecientes a diferentes grupos compiladas por Liu *et al.* (2000). El resto de símbolos son medidas recientes de Llovet *et al.* (2000), Zhou *et al.* (2000) y Zhou *et al.* (2001). Los datos experimentales para la subcapas L proceden de Chang (1979), Palinkas y Schlenk (1980), Hippler *et al.* (1981), Hippler *et al.* (1983), Reusch *et al.* (1986), y Schneider *et al.* (1993); las cruces, diamantes y círculos abiertos corresponden, respectivamente, a las subcapas L1, L2 y L3.

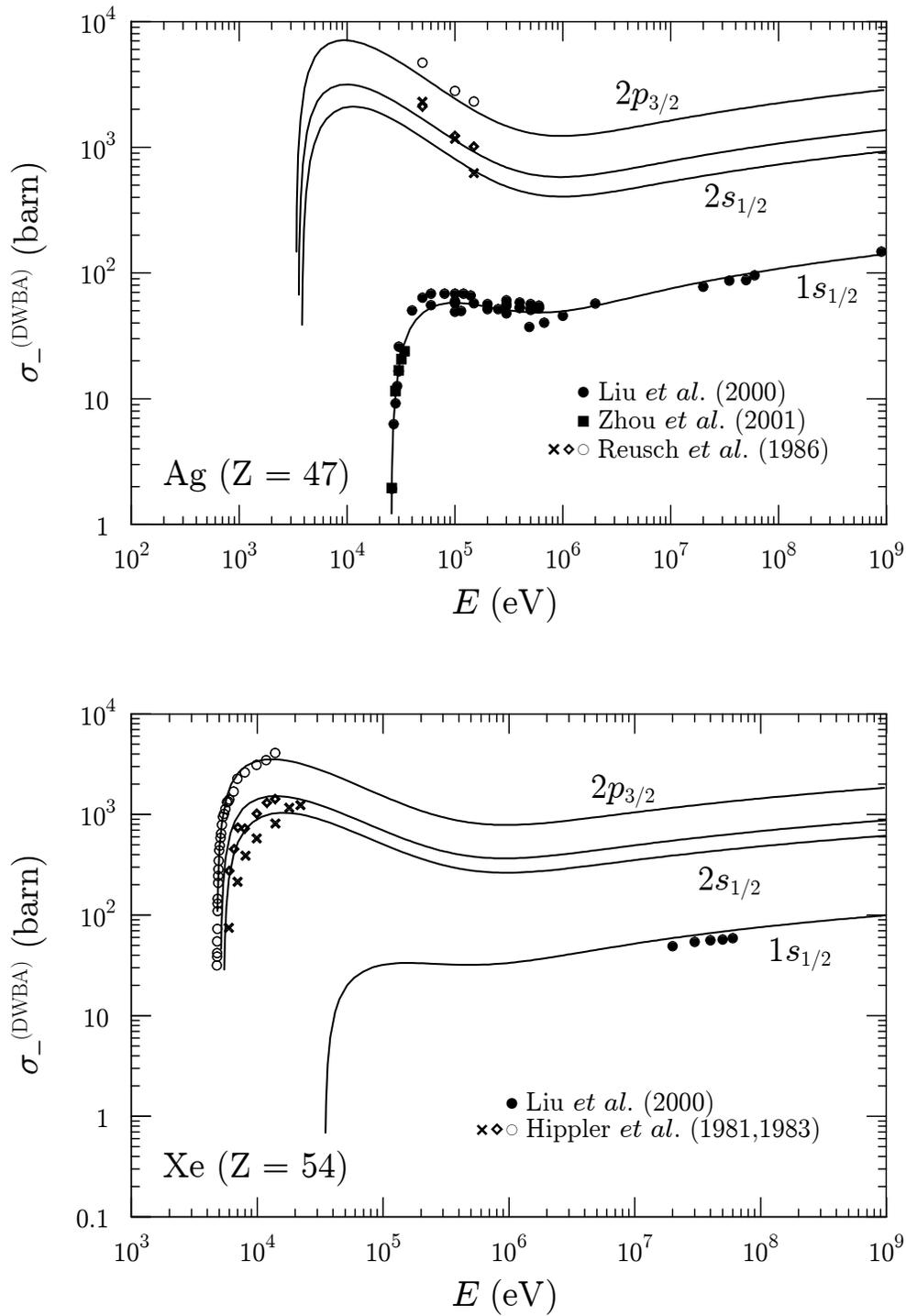


Figura 5.3: Continuación.

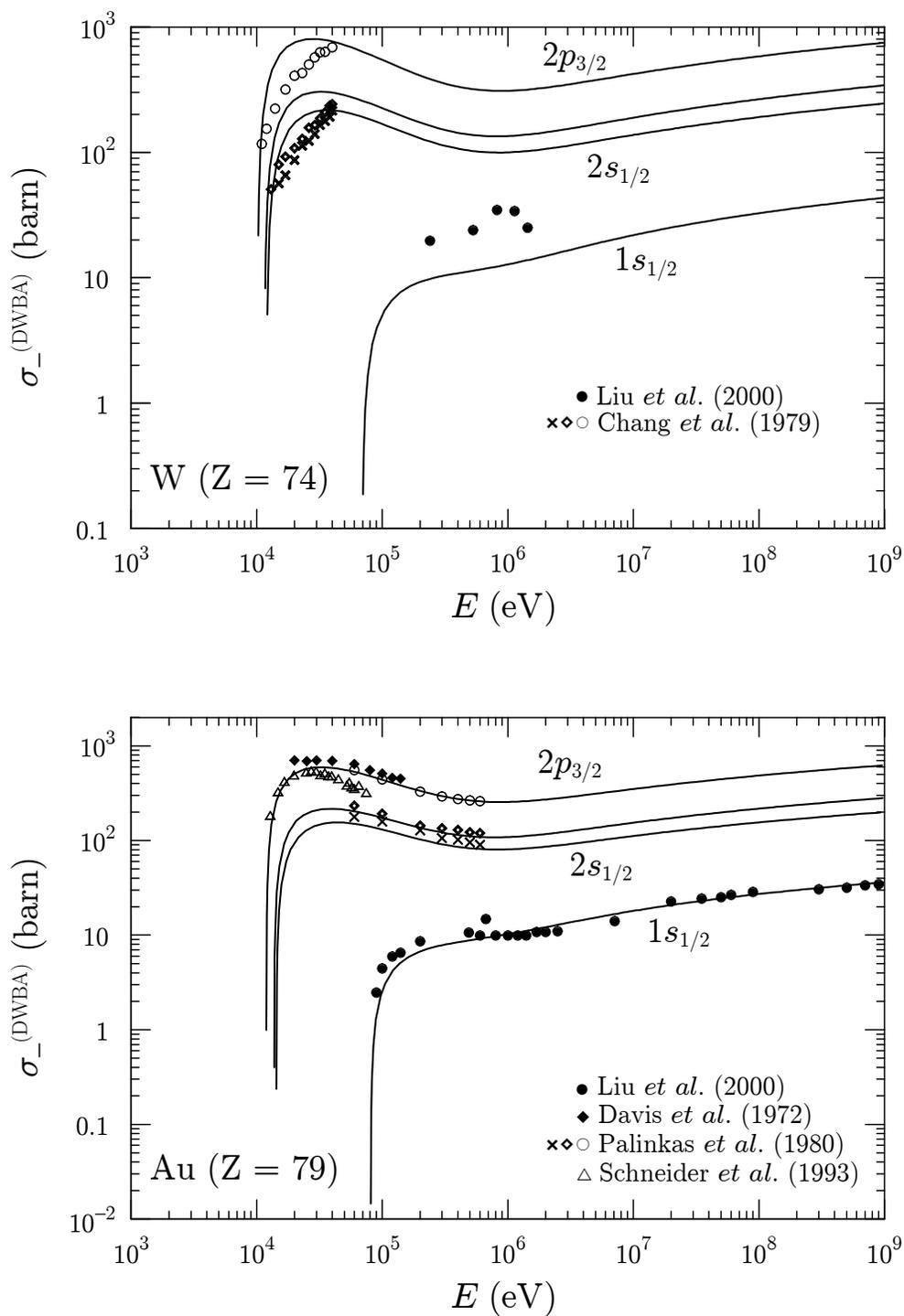


Figura 5.3: Continuación.

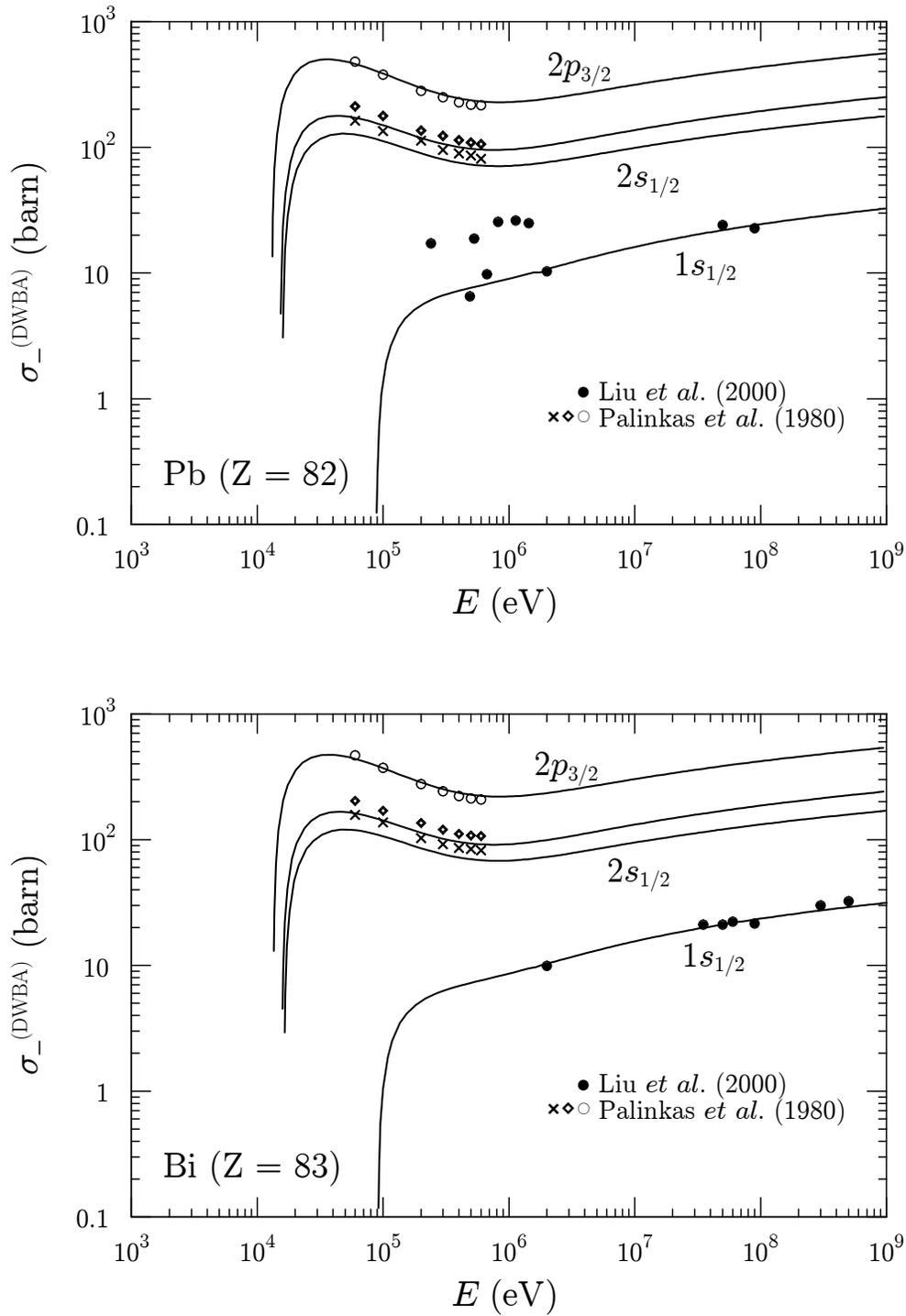
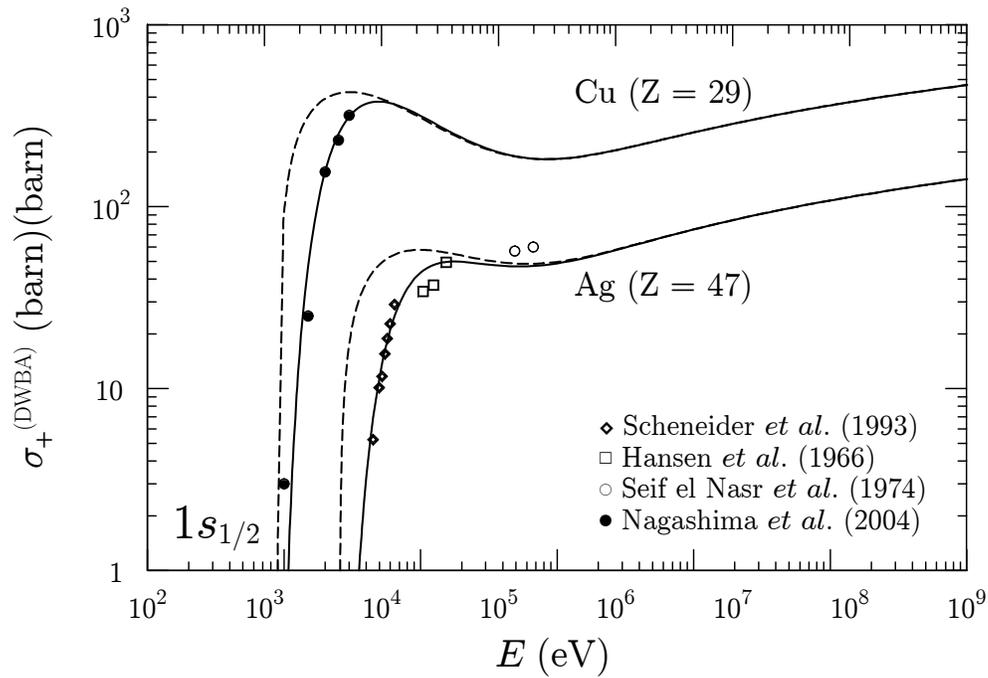


Figura 5.3: Continuación.



**Figura 5.4:** Secciones eficaces de ionización de la capa K de los elementos Cu y Ag por impacto de positrones (curvas sólidas) y electrones (curvas a trazos). Los símbolos representan información experimental para positrones (Schneider et al., 1993; Hansen y Flammers, 1966; Seif el Nasr et al., 1974; Nagashima et al., 2004).

## 5.5. Fórmulas analíticas

La base de datos de secciones eficaces de ionización, calculada con el esquema de cálculo descrito en las Secciones 4.2 y 4.3, ha sido implementada en el código de simulación Monte Carlo PENELOPE (Salvat et al., 2009), y en breve se distribuirá públicamente. Sin embargo, para usuarios esporádicos resulta mucho más conveniente disponer de fórmulas analíticas sencillas. A continuación, presentamos una parametrización de las secciones eficaces, obtenida mediante ajustes por mínimos cuadrados que aproximan los valores numéricos con un error menor que la incertidumbre asociada a las diferentes aproximaciones involucradas en el cálculo teórico.

Como no ha sido posible encontrar una forma analítica suficientemente flexible para cubrir el rango completo de energía, que se extiende desde  $E_a$  hasta 1 GeV, consideramos dos intervalos, separados por la energía de corte  $16E_a$ . En el primer intervalo, que va desde el umbral de ionización hasta  $16E_a$ , las secciones eficaces se calculan mediante la DWBA, mientras que en el segundo intervalo,  $E > 16E_a$ , utilizamos la PWBA escalada.

En el primer intervalo,  $E < 16E_a$ , consideramos las secciones eficaces de ionización para electrones y positrones como funciones del “sobrevoltaje”,  $U \equiv E/E_a$ , donde las energías de ionización  $E_a$  son las que se obtienen del potencial DHFS (ver la Sección 2.2). Las formas analíticas que hemos adoptado son una generalización natural de la propuesta por Kim y Rudge (1994). Para electrones con sobrevoltajes  $U < 16$  tomamos

$$\sigma_- = 4\pi a_0^2 \frac{U-1}{U^2} \left( a_1 + a_2 U + \frac{a_3}{1+U} + \frac{a_4}{(1+U)^3} + \frac{a_5}{(1+U)^5} \right)^2, \quad (5.21)$$

donde  $a_0$  es el radio de Bohr’s y  $a_1, \dots, a_5$  son parámetros característicos de cada elemento y cada capa, que se determinan mediante ajustes de mínimos cuadrados de las secciones eficaces numéricas,  $\sigma_{\mp}^{(DWBA)}$  (ver Bote et al. 2009a, para la lista completa de todos los elementos  $Z = 1, 99$ ). En la Tabla 5.2, damos, a modo de ejemplo, los valores de estos parámetros para las capas K, L y M del oro. En la Figura 5.5 se comparan los valores obtenidos de la fórmula (5.21) con las secciones eficaces  $\sigma_-^{(DWBA)}$  de la base de datos (panel izquierdo), y se muestran las diferencias relativas (panel derecho)

$$\Delta\sigma = 100 \frac{\sigma_{\mp}^{(DWBA)} - \sigma_{\mp}}{\sigma_{\mp}^{(DWBA)}}. \quad (5.22)$$

Vemos que  $\Delta\sigma$  es menor que 1% para  $U > 1,3$ . Para sobrevoltajes pequeños, las diferencias son algo mayores, pero aún siempre por debajo de 5%. Nótese que la sección eficaz alcanza su valor máximo en  $U \sim 3$ , y que, cuando  $U$  es aproximadamente 1,3, la sección eficaz es unas 10 veces menor.

En la DWBA, las secciones eficaces para electrones y para positrones son diferentes, en parte porque el potencial de distorsión es atractivo para los electrones y repulsivo para los positrones, y en parte por los efectos de intercambio, que no existen para positrones. En consecuencia, no es de extrañar que la expresión (5.21) no resulte adecuada para

positrones. Para positrones con  $U < 16$ , utilizamos la siguiente fórmula

$$\sigma_+ = 4\pi a_0^2 \frac{U-1}{U^2} \left( d_1 + d_2 U + \frac{d_3}{1+U} + d_4 \frac{\sqrt{U}}{(1+U)^3} + d_5 \frac{U}{(1+U)^6} \right)^4, \quad (5.23)$$

donde los parámetros  $d_1, \dots, d_5$ , que son característicos de cada elemento y capa, se obtienen mediante ajustes por mínimos cuadrados. Los valores de estos parámetros para las capas del oro se dan en la Tabla 5.3. En la Figura 5.6 comparamos los valores obtenidos de la fórmula (5.23) con las secciones eficaces  $\sigma_+^{(\text{DWBA})}$  de la base de datos (panel izquierdo), y mostramos las diferencias relativas (panel derecho). El error de la fórmula analítica (5.23) es menor que el 1% para  $U > 2,5$ . Para sobrevoltajes más bajos, el error es algo mayor, típicamente del orden de 5-10% para  $U = 1,5$ , sin embargo, los valores de la sección eficaz de ionización en este rango de energías son mucho más pequeños que el valor máximo de ésta.

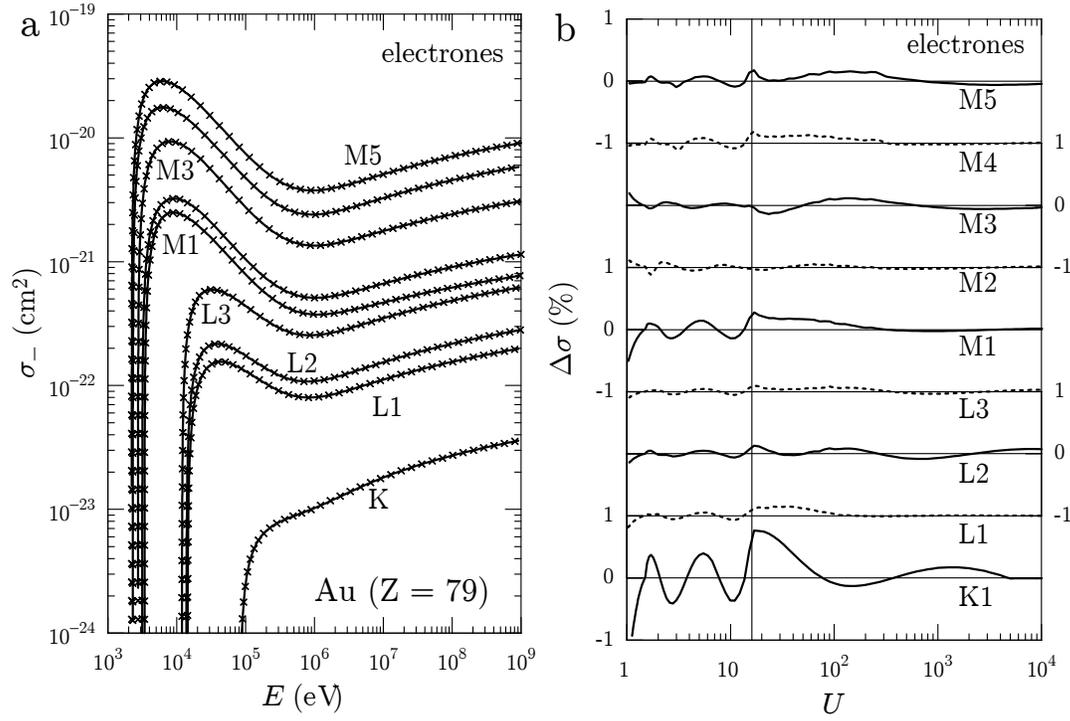
Es conveniente recordar que la base de datos numérica ha sido generada suponiendo que las energías de ionización de cada capa son iguales a los autovalores de las ecuaciones DHFS (ver la Sección 2.2). Los errores en las energías de ionización se propagan a la sección eficaz de ionización, lo que provoca un desplazamiento de la curva de la sección eficaz *vs.* energía cinética del proyectil. Para corregir, al menos parcialmente, ese desplazamiento, podemos utilizar las fórmulas (5.21) y (5.23) con los valores experimentales de la energía de ionización en la definición del sobrevoltaje.

**Cuadro 5.2:** Parámetros de la fórmulas analíticas (5.21) para las secciones eficaces de ionización de las capas K, L y M del oro ( $Z = 79$ ) por impacto de electrones con sobrevoltajes  $U = E/E_a$  menores que 16.

Z	S	$E_a$ (eV)	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$
79	K	8.096E+4	3.417E-4	2.628E-5	-5.614E-4	1.874E-3	-4.282E-3
	L1	1.434E+4	1.660E-3	3.860E-5	-1.551E-3	1.512E-3	-1.709E-3
	L2	1.378E+4	1.927E-3	4.450E-5	-1.769E-3	3.137E-3	-5.213E-3
	L3	1.192E+4	3.210E-3	6.382E-5	-2.871E-3	4.847E-3	-7.392E-3
	M1	3.402E+3	6.777E-3	6.194E-5	-5.987E-3	1.174E-2	-3.284E-2
	M2	3.145E+3	8.286E-3	5.917E-5	-8.695E-3	9.568E-3	-1.143E-2
	M3	2.734E+3	1.412E-2	9.652E-5	-1.477E-2	1.402E-2	-1.611E-2
	M4	2.301E+3	1.910E-2	1.504E-4	-2.080E-2	4.721E-2	-1.104E-1
	M5	2.212E+3	2.439E-2	1.877E-4	-2.661E-2	6.094E-2	-1.439E-1

Para sobrevoltajes mayores que 16, la sección eficaz de ionización se obtiene de la PWBA mediante el escalado dado por la ec. (5.20),

$$\sigma_{\pm} = \frac{E}{E + bE_a} \sigma^{(\text{PWBA})}. \quad (5.24)$$



**Figura 5.5:** Comparación de las secciones eficaces de ionización de las capas K, L y M del oro por impacto de electrones de la base numérica (cruces) y las fórmulas analíticas descritas en el texto (curvas continuas). El panel de la izquierda muestra las secciones eficaces de ionización, en barns, por impacto de electrones. El panel derecho muestra las diferencias relativas entre las secciones eficaces de la base de datos y las fórmulas analíticas. Las líneas verticales indican el sobrevoltaje de corte  $U = 16$ , que separa los intervalos donde aplican, respectivamente, las fórmulas de baja y alta energía. Nótese como el error de las fórmulas analíticas es típicamente menor que el 1%.

La sección eficaz de PWBA se puede aproximar fielmente por la siguiente fórmula analítica, que es una generalización de la fórmula propuesta por Scofield (1978),

$$\sigma^{(\text{PWBA})} = 4\pi a_0^2 \frac{A_a}{\beta^2} \{ [\ln X^2 - \beta^2] (1 + g_1 X^{-1}) + g_2 + g_3 (1 - \beta^2)^{1/4} + g_4 X^{-1} \}, \quad (5.25)$$

donde

$$\beta = \frac{v}{c} = \frac{\sqrt{E(E + 2m_e c^2)}}{E + m_e c^2} \quad (5.26)$$

y

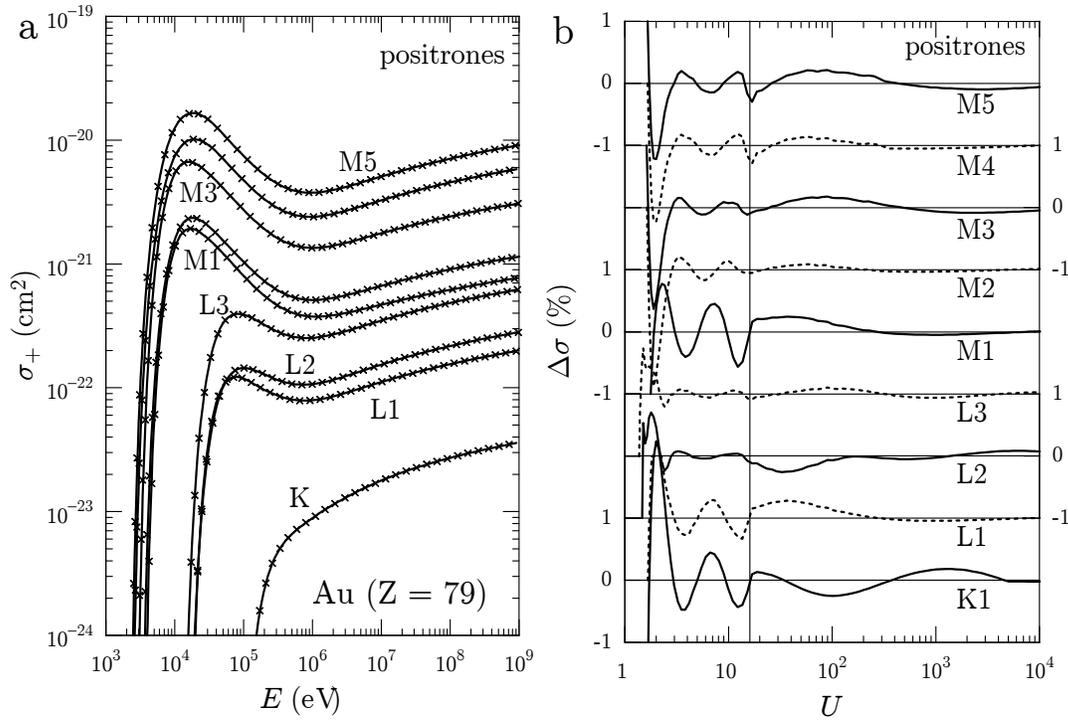
$$X \equiv \frac{p}{m_e c} = \frac{\sqrt{E(E + 2m_e c^2)}}{m_e c^2} \quad (5.27)$$

es el momento del proyectil en unidades de  $m_e c$ . El parámetro  $A_a$  se define como

$$A_a \equiv \frac{\alpha^4 m_e c^2}{2} \int_{E_a}^{\infty} \frac{1}{W} \frac{df_a(W)}{dW} dW = \alpha^2 M_a^2, \quad (5.28)$$

donde  $df_a(W)/dW$  es la OOS para la ionización de la capa activa  $n_a\kappa_a$ , ec. (2.69), y  $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$  la constante de estructura fina.  $M_a^2$  está definido por la ec. (4.61). Los parámetros  $g_1, \dots, g_4$  se determinan mediante ajustes por mínimos cuadrados de las secciones eficaces obtenidas de la PWBA, y son los mismos para electrones y para positrones. A modo de ejemplo, la Tabla 5.4 muestra los parámetros para las capas del átomo de oro. La fórmula (5.24) aproxima las secciones eficaces de la base de datos numérica con un error inferior al 1% para cualquier energía mayor que  $16E_a$  (ver las Figuras 5.5 y 5.6).

Conviene señalar que los errores introducidos por las aproximaciones analíticas son menores que las incertidumbres numéricas que resultan de las simplificaciones y aproximaciones implícitas en los cálculos teóricos. Es decir, las aproximaciones analíticas propuestas no implican pérdida alguna de precisión.



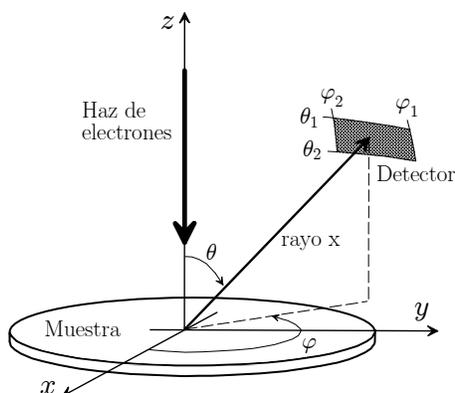
**Figura 5.6:** Comparación de las secciones eficaces de ionización de las capas K, L y M del oro por impacto de positrones de la base numérica (cruces) y las fórmulas analíticas descritas en el texto (curvas continuas). Los detalles son los mismos que en la Figura 5.5. Para energías cerca del umbral de ionización, el error de las fórmulas analíticas es típicamente mayor que en el caso de electrones, pero menor que el 1% para  $U > 2,5$ .

**Cuadro 5.3:** Parámetros de la fórmulas analíticas (5.23) para las secciones eficaces de ionización de las capas K, L y M del oro ( $Z = 79$ ) por impacto de positrones con sobrevoltajes  $U = E/E_a$  menores que 16.

$Z$	S	$E_a$ (eV)	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$	$d_5$
79	K	8.096E+4	2.124E-2	4.444E-4	-3.604E-2	5.182E-2	-6.648E-1
	L1	1.434E+4	3.739E-2	5.161E-4	1.231E-2	-3.497E-1	-2.524E-1
	L2	1.378E+4	4.553E-2	3.913E-4	-3.232E-2	-2.823E-1	2.908E-1
	L3	1.192E+4	5.862E-2	4.360E-4	-3.677E-2	-3.962E-1	5.070E-1
	M1	3.402E+3	7.556E-2	5.948E-4	3.858E-2	-8.230E-1	3.676E-1
	M2	3.145E+3	8.703E-2	4.176E-4	1.097E-3	-9.132E-1	2.072E+0
	M3	2.734E+3	1.140E-1	5.366E-4	-8.998E-3	-1.117E+0	2.349E+0
	M4	2.301E+3	1.583E-1	-1.358E-5	-2.665E-1	-3.060E-1	1.163E+0
	M5	2.212E+3	1.791E-1	-3.224E-5	-3.016E-1	-3.487E-1	1.349E+0

## 5.6. Simulación MC de rendimientos de rayos x

Desde las primeras simulaciones Monte Carlo (MC) del transporte de electrones con energías del orden del keV, publicadas en los años sesenta, la mejora de los modelos de scattering y el incremento notable de la potencia de cálculo de los ordenadores actuales, ha propiciado que la simulación MC se haya convertido en una de las herramientas más utilizadas en el estudio del transporte de electrones en las diferentes técnicas de espectroscopia de electrones y en la microscopía electrónica. La simulación Monte Carlo de los espectros de rayos x emitidos en los experimentos de microanálisis es una de las aplicaciones prácticas de la base de datos numérica de secciones eficaces que hemos generado.



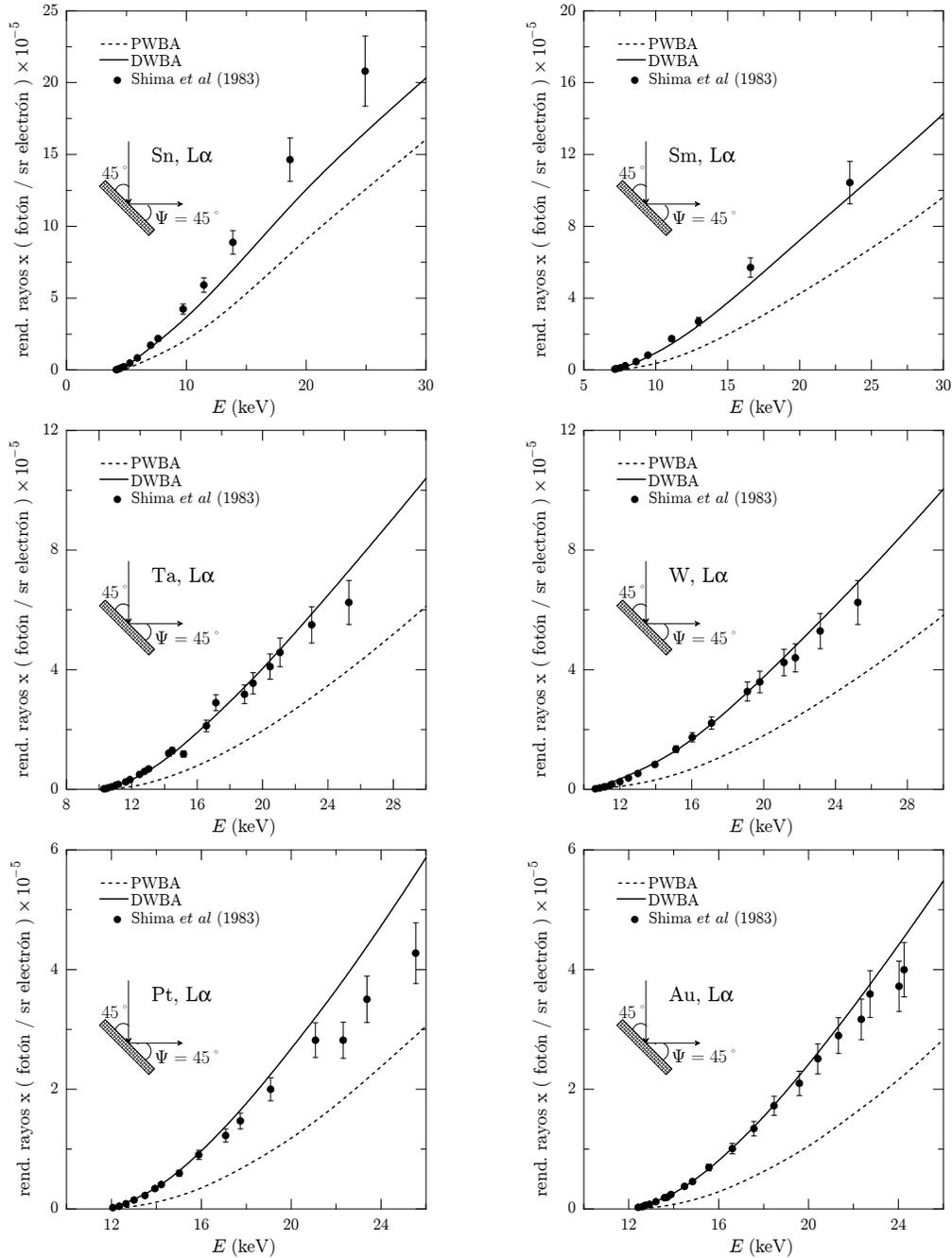
**Figura 5.7:** Geometría del montaje experimental utilizado en la simulación de los rendimientos de rayos x.

La base de datos ha sido implementada en el código MC PENELOPE (Salvat et al.,

**Cuadro 5.4:** Parámetros de la fórmula analítica de alta energía, ecs. (5.24) y (5.25), para las secciones eficaces de ionización de las capas K, L y M del oro ( $Z = 79$ ) por impacto de electrones y positrones con sobrevoltajes  $U = E/E_a$  mayores que 16.

$Z$	S	$b_-$	$b_+$	$A_a$	$g_1$	$g_2$	$g_3$	$g_4$
79	K	-6.761E-1	1.145E+0	5.126E-9	3.132E+0	6.068E+0	-1.019E+1	6.048E+0
	L1	1.416E-1	1.090E+0	2.737E-8	-9.608E-2	6.577E+0	-1.273E-2	-8.063E-1
	L2	1.124E-1	1.059E+0	3.829E-8	1.368E+0	6.798E+0	-4.207E+0	2.946E+0
	L3	2.421E-1	8.944E-1	8.369E-8	5.542E-1	6.998E+0	-1.755E+0	8.937E-1
	M1	1.085E+0	6.488E-1	9.465E-8	1.530E-1	9.062E+0	-5.857E-1	1.810E-1
	M2	6.830E-1	9.401E-1	1.499E-7	1.286E-1	7.599E+0	-4.845E-1	1.895E-1
	M3	6.452E-1	9.069E-1	4.114E-7	6.466E-2	7.156E+0	-1.511E-1	2.887E-2
	M4	6.279E-1	7.473E-1	8.121E-7	8.946E-2	6.387E+0	-3.160E-1	1.665E-1
	M5	6.403E-1	7.032E-1	1.263E-6	6.045E-2	6.368E+0	-1.200E-1	7.030E-2

2009), con el que hemos simulado rendimientos de rayos x característicos, para haces de electrones incidiendo o bien normalmente o bien formando un ángulo de  $45^\circ$  con la superficie de la muestra, para los elementos C, Al, Si, Ti, Cu, Fe, Zn, Ge, Zr, Sn, Sm, Ta, W, Au, and Pb (Bote et al., 2008). Nótese que el rendimiento de rayos x se define como el número promedio de rayos x característicos que se originan en la superficie de la muestra por unidad de ángulo sólido y por electrón incidente (ver la Figura 5.7). En las simulaciones, la energía del haz de electrones va de unos pocos keV (dependiendo del umbral de ionización de cada elemento y capa) hasta unos 40 keV. Como ejemplo, la Figura 5.8 compara los rendimientos de rayos x correspondientes a la transición  $L\alpha$  de los elementos Sn, Sm, Ta, W, Au, y Pb simulados con PENELOPE utilizando secciones eficaces DWBA (curva continua) y PWBA (curva a trazos), con las medidas experimentales de Shima et al. (1983). Es claro que los resultados de las simulaciones con las secciones eficaces DWBA están en mejor acuerdo con las medidas experimentales que los de simulaciones con las secciones eficaces PWBA. En consecuencia, es razonable concluir que con el uso de nuestras secciones eficaces DWBA mejorará la calidad de los métodos de análisis cuantitativo en EPMA.



**Figura 5.8:** Rendimientos de rayos x de la transición  $L\alpha$  de los elementos Sn, Sm, Ta, W, Au, y Pb, para haces de electrones incidiendo sobre la muestra con un ángulo de  $45^\circ$  relativo a su superficie, como funciones de la energía cinética  $E$  del haz. Las curvas continuas y a trazos representan los resultados de simulaciones Monte Carlo utilizando secciones eficaces de ionización DWBA y PWBA, respectivamente. Los símbolos representan medidas experimentales de Shima et al.(1983).

# Capítulo 6

## Conclusiones

- En este trabajo hemos reformulado de manera detallada la primera aproximación de Born relativista con ondas planas, para colisiones inelásticas de electrones, positrones y partículas pesadas con átomos o iones, suponiendo que la función de onda atómica puede describirse mediante un modelo de partículas independientes. Hemos deducido expresiones cerradas de las intensidades de oscilador generalizadas longitudinal (GOS) y transversal (TGOS). Un aspecto básico de nuestra formulación es que hemos evitado la aproximación de pequeñas transferencias de momento utilizada por Fano (1963), que altera significativamente las secciones eficaces integradas para energías cercanas al umbral de ionización. Liberada de esta aproximación, la PWBA es idéntica a la DWBA en el límite de potencial distorsionador nulo.
- Hemos elaborado métodos numéricos robustos para el cálculo de las GOSs longitudinal y transversal, así como esquemas de interpolación y de extrapolación para obtener la SEDD a partir de las GOSs tabuladas, que hemos implementado en un conjunto de programas de cálculo. Utilizando el potencial autoconsistente de DHFS, hemos generado una base de datos completa de GOSs, TGOSs, OOSs, y perfiles “Born-Compton” para todas las capas de la configuración del estado fundamental de átomos neutros de los elementos desde el hidrógeno hasta el einstenio. Las GOSs calculadas presentan desviaciones sistemáticas de la regla de suma de Bethe, que son consecuencia de efectos relativistas. A partir de nuestra base de datos de GOSs, hemos calculado secciones eficaces totales, secciones eficaces de frenado, y secciones eficaces de dispersión de energía para colisiones inelásticas de electrones, positrones y protones con átomos libres, integrando numéricamente la SEDD.
- Teniendo en cuenta las desviaciones de la regla de suma, hemos deducido fórmulas asintóticas para las secciones eficaces integradas. Además hemos obtenido las correcciones de capas directamente, como las diferencias entre estas fórmulas y los valores numéricos de las secciones eficaces. Tanto las desviaciones de la regla de suma como las correcciones de capas se originan principalmente en las capas internas, que son poco sensibles al estado de agregación, por lo que los valores obtenidos son también aproximadamente válidos para colisiones con moléculas y con medios densos.

---

- Combinando la PWBA y la DWBA, hemos desarrollado un procedimiento robusto para el cálculo de secciones eficaces de ionización de capas internas por impacto de electrones y positrones, para energías arbitrariamente grandes. Para energías por debajo de 16 veces la energía de ionización, utilizamos la DWBA para determinar las correcciones de distorsión e intercambio a la PWBA. Por encima de esta energía, la PWBA escalada con el factor empírico  $E/(E + bE_a)$  reproduce fielmente los valores DWBA. Utilizando este esquema, hemos generado una base de datos de secciones eficaces de ionización para las capas K, L y M de todos los elementos desde  $Z = 1$  hasta  $Z = 99$ , por impacto de electrones y positrones con energías entre 50 eV y un 1 GeV. Esta base de datos es útil para el análisis cuantitativo en EPMA y AES, y para la simulación MC del transporte acoplado de electrones y fotones. Hemos implementado esta base de datos en el código PENELOPE, y simulado la generación de rayos x en muestras irradiadas por haces de electrones. La comparación con medidas experimentales confirma que al utilizar DWBA en vez de la PWBA mejora la fiabilidad de las simulaciones. Para facilitar el uso de nuestras secciones eficaces de ionización, hemos parametrizado los valores numéricos mediante expresiones analíticas simples.

# Apéndice A

## Cinemática de las colisiones inelásticas

A continuación presentamos de manera resumida la cinemática de las colisiones inelásticas de partículas cargadas de masa  $M$  y velocidad  $\mathbf{v}$  con un átomo blanco. Por simplicidad, trabajaremos en el sistema de referencia del laboratorio, donde el átomo blanco está en reposo. Justo antes de la colisión inelástica, el momento y la energía cinética del proyectil son  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  y  $E$ , respectivamente; las cantidades correspondientes después a la colisión se denotan por  $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$  y  $E' = E - W$ , respectivamente. Recordemos que la energía cinética y el momento de una partícula libre que se mueve con velocidad  $\mathbf{v}$  son, respectivamente,

$$E = (\gamma - 1)Mc^2 \quad \text{y} \quad \mathbf{p} = \beta\gamma Mc\hat{\mathbf{v}}, \quad (\text{A.1})$$

donde

$$\beta = \frac{v}{c} = \sqrt{\frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2}} = \sqrt{\frac{E(E + 2Mc^2)}{(E + Mc^2)^2}} \quad (\text{A.2})$$

es la velocidad en unidades de  $c$  y

$$\gamma = \sqrt{\frac{1}{1 - \beta^2}} = \frac{E + Mc^2}{Mc^2} \quad (\text{A.3})$$

es la energía total en unidades de la energía en reposo de la partícula. Nótese que  $E$  y  $p$  están relacionados mediante la expresión

$$(cp)^2 = (E + Mc^2)^2 - M^2c^4 = E(E + 2Mc^2). \quad (\text{A.4})$$

Evidentemente, para partículas diferentes al electrón, la máxima pérdida de energía en una colisión es  $W_{\max} = E$ . En el caso de ionizaciones por impacto de electrones, debido a la indistinguibilidad entre el proyectil y el electrón emitido, la máxima pérdida de energía es  $W_{\max} \simeq E/2$ . La transferencia de momento en la colisión es  $\mathbf{p} - \mathbf{p}' \equiv \hbar\mathbf{q}$ ;

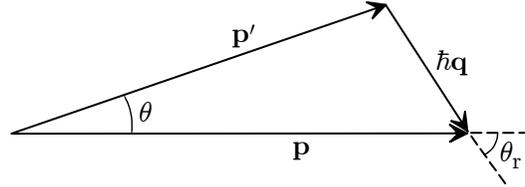
$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  es el momento transferido en unidades de  $\hbar$ . Tradicionalmente, se acostumbra a introducir la energía de retroceso  $Q$  definida como

$$Q(Q + 2m_e c^2) = (c\hbar q)^2 = c^2 (p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta), \quad (\text{A.5})$$

donde  $m_e$  es la masa del electrón y  $\theta = \arccos(\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}')$  es el ángulo de scattering (ver la Fig A.1). De manera equivalente, podemos escribir

$$Q = \sqrt{(c\hbar q)^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2. \quad (\text{A.6})$$

Nótese que, cuando la colisión se produce con un electrón libre y en reposo, la pérdida de energía se transforma completamente en energía cinética del electrón que retrocede, es decir,  $Q = W$ . Para colisiones con electrones ligados, la relación  $Q \simeq W$  es aún válida para colisiones ionizantes próximas (esto es, cuando la transferencia de energía  $W$  es mucho mayor que la energía de ionización del electrón blanco, por lo que, los efectos de ligadura son despreciables).



**Figura A.1:** Momento transferido y ángulos de scattering en las colisiones inelásticas.

La ec. (A.5) relaciona la pérdida de energía, el ángulo de scattering y la energía de retroceso. Las curvas que se muestran en la Figura A.2 representan la energía de retroceso en función de la pérdida de energía para los ángulos de scattering dados. Es conveniente notar que para transferencias de energía mucho más pequeñas que la energía del proyectil, las curvas son casi líneas rectas verticales. Esto es, cuando la pérdida de energía es pequeña, la energía de retroceso  $Q$  es una función sólo del ángulo de scattering ( $Q$  es independiente de  $W$ ). Este comportamiento cambia cuando la pérdida de energía crece, porque cada curva con  $\theta \lesssim 60^\circ$  se aproxima suavemente a la curva  $\theta = 0$ . Todas las curvas convergen en único punto cuando la pérdida de energía alcanza su valor máximo permitido  $W_{\max} = E$ .

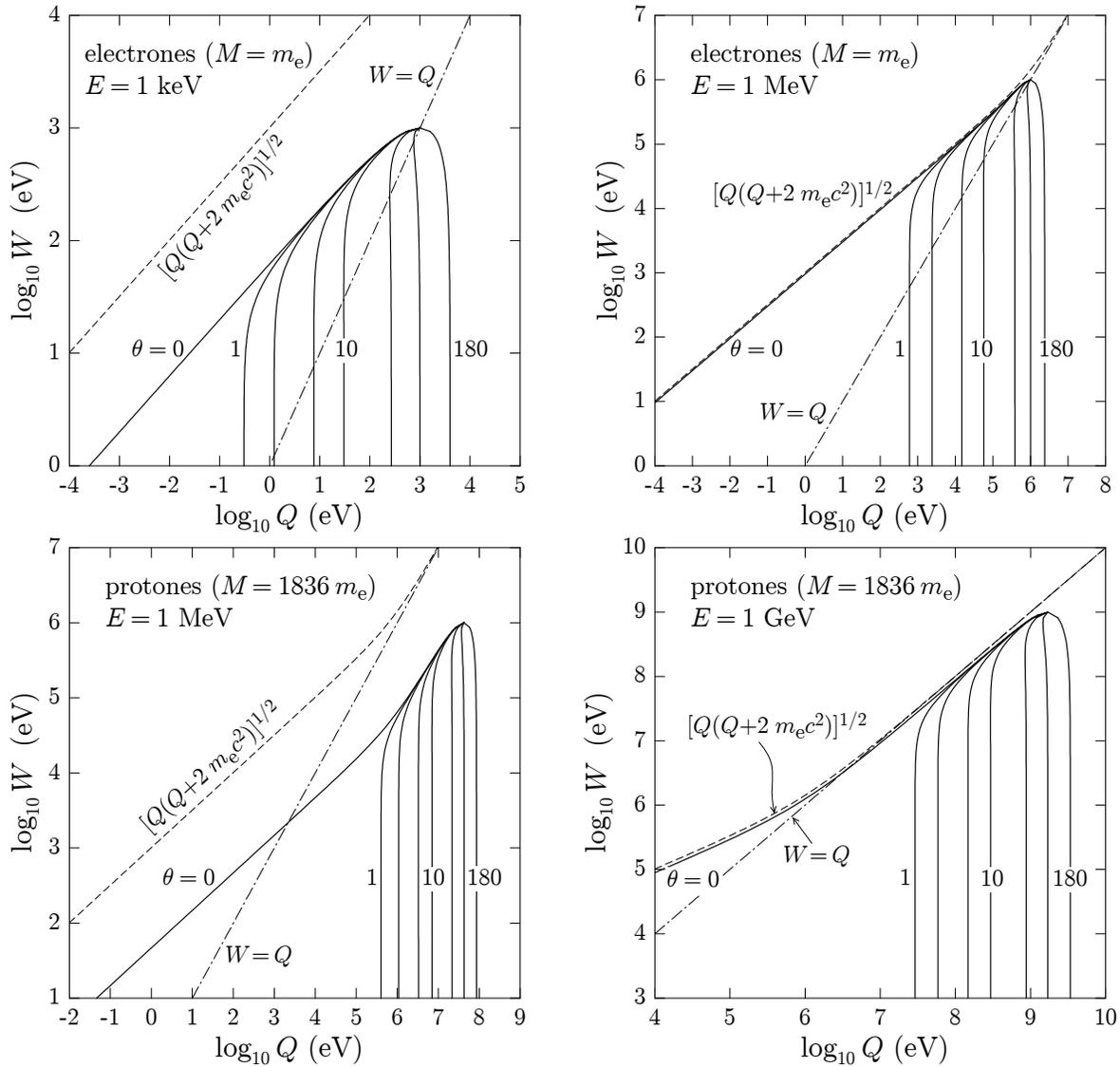
De la definición de la transferencia de momento  $\mathbf{q}$  (ver la Figura A.1), podemos obtener las expresiones que relacionan el ángulo de scattering  $\theta$  y la energía de retroceso  $\theta_r$  (es decir, el ángulo entre  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{q}$ ) con la pérdida de energía  $W$  y con la energía de retroceso  $Q$ . Elevando al cuadrado la identidad  $\mathbf{p} - \mathbf{p}' = \mathbf{q}$ , tenemos

$$(cp)^2 + (cp')^2 - 2(cp)(cp') \cos \theta = (c\hbar q)^2,$$

---

y, entonces, se sigue que

$$\begin{aligned}\cos \theta &= \frac{(cp)^2 + (cp')^2 - (c\hbar q)^2}{2(cp)(cp')} \\ &= \frac{E(E + 2Mc^2) + (E - W)(E - W + 2Mc^2) - (cq)^2}{2\sqrt{E(E + 2Mc^2)}(E - W)(E - W + 2Mc^2)}.\end{aligned}\tag{A.7}$$



**Figura A.2:** Cinemática de las colisiones inelásticas para electrones y protones con las energías cinéticas indicadas. Las curvas representan el valor de la energía de retroceso  $Q$  (abscisa) que se corresponde con la pérdida de energía  $W$  (ordenada) para un ángulo de scattering dado. Las curvas que se muestran se corresponden con ángulos de scattering de 0, 1, 2, 5, 10, 30, 60, y 180 grados.

De manera similar, del cuadrado de la identidad  $\mathbf{p} - \hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}'$ , obtenemos

$$\begin{aligned}\cos\theta_r &= \frac{(cp)^2 - (cp')^2 + (c\hbar q)^2}{2(cp)(cq)} \\ &= \frac{E(E + 2Mc^2) - (E - W)(E - W + 2Mc^2) + (cq)^2}{2\sqrt{E(E + 2Mc^2)}(c\hbar q)} \\ &= \frac{W}{\beta(c\hbar q)} \left( 1 + \frac{(c\hbar q)^2 - W^2}{2W(E + Mc^2)} \right).\end{aligned}\quad (\text{A.8})$$

Para proyectiles pesados ( $M \gg m_e$ ) y muy energéticos, y colisiones tales que  $Q \ll E$  y  $W \ll E$ ,

$$\cos\theta_r \simeq \frac{W}{\beta(c\hbar q)}.\quad (\text{A.9})$$

El rango cinemáticamente permitido de energías de retroceso es  $Q_- < Q < Q_+$ , donde los extremos vienen dados por la ec. (A.5) con  $\cos\theta = +1$  y  $-1$ , respectivamente. Esto es,

$$\begin{aligned}Q_{\pm} &= \sqrt{(cp \pm cp')^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 \\ &= \sqrt{\left[ \sqrt{E(E + 2Mc^2)} \pm \sqrt{(E - W)(E - W + 2Mc^2)} \right]^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2.\end{aligned}\quad (\text{A.10})$$

Nótese que, para  $W < E$ ,  $Q_+$  es mayor que  $W$ . Cuando  $W \ll E$ , la expresión (A.10) no es adecuada para evaluar  $Q_-$  porque implica la substracción de dos cantidades muy similares. En este caso, resulta más conveniente utilizar la relación aproximada

$$\begin{aligned}cp - cp' &\simeq c \left( \frac{dp}{dE} W - \frac{1}{2} \frac{d^2 p}{dE^2} W^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 p}{dE^3} W^3 \right) \\ &= \frac{W}{\beta} \left[ 1 + \frac{1}{2\gamma(\gamma + 1)} \frac{W}{E} + \frac{1}{2(\gamma + 1)^2} \left( \frac{W}{E} \right)^2 \right],\end{aligned}\quad (\text{A.11})$$

y calcular  $Q_-$  como

$$Q_- = m_e c^2 \left[ \sqrt{\left( \frac{cp - cp'}{m_e c^2} \right)^2 + 1} - 1 \right] \simeq m_e c^2 \left( x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{2} \right),\quad (\text{A.12})$$

con

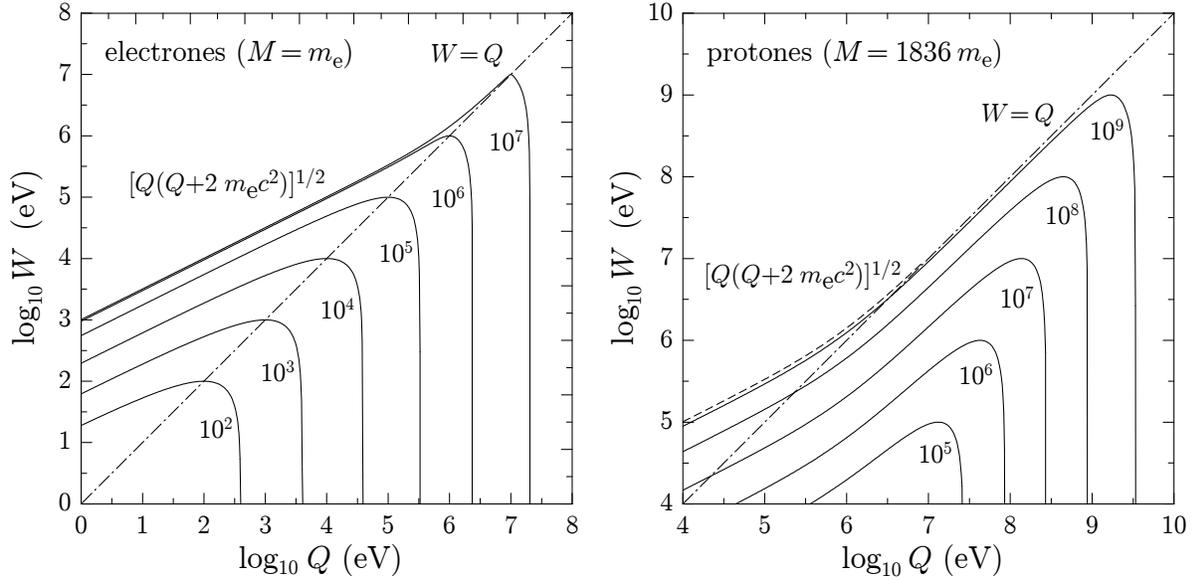
$$x \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{cp - cp'}{m_e c^2} \right)^2 \simeq \frac{W^2}{2\beta^2 m_e^2 c^4} \left[ 1 + \frac{1}{2\gamma(\gamma + 1)} \frac{W}{E} + \frac{1}{2(\gamma + 1)^2} \left( \frac{W}{E} \right)^2 \right]^2.\quad (\text{A.13})$$

Por lo tanto, para  $W \ll E$ ,

$$Q_-(Q_- + 2m_e c^2) = (cp - cp')^2 \simeq W^2/\beta^2,\quad (\text{A.14})$$

y

$$\cos \theta_r \simeq \frac{W}{\beta(c\hbar q)} \simeq \sqrt{\frac{Q_-(Q_- + 2m_e c^2)}{Q(Q + 2m_e c^2)}}. \quad (\text{A.15})$$



**Figura A.3:** Dominios de las transiciones cinemáticamente permitidas en el plano  $(Q, W)$  para electrones/positrones (izquierda) y protones (derecha). Las curvas representan la máxima pérdida de energía permitida  $W_m(Q)$ , dada por la ec. (A.16), para proyectiles con las energías cinéticas indicadas (en eV). Cuando  $E$  crece,  $W_m(Q)$  se aproxima a la línea de fotones en vacío,  $W_0(Q) = [Q(Q + 2m_e c^2)]^{1/2}$ , que es una cota superior absoluta para las pérdidas de energía permitidas.

De (A.10), resulta claro que las curvas  $Q = Q_-(W)$  y  $Q = Q_+(W)$  se cruzan en  $W = E$ . Por lo que, estas dos curvas definen una función continua  $W = W_m(Q)$  en el intervalo  $0 < Q < Q_+(0)$ . Resolviendo las ecs.  $Q = Q_{\pm}(W_m)$  obtenemos

$$W_m(Q) = E + M c^2 - \sqrt{\left[ \sqrt{E(E + 2M c^2)} - \sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)} \right]^2 + M^2 c^4}, \quad (\text{A.16})$$

que, cuando  $W \ll E$ , se reduce a

$$W_m(Q) \simeq \beta \sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)}. \quad (\text{A.17})$$

Ahora, se sigue que para valores de  $E$  y  $Q$  [ $< Q_+(0)$ ] dados, los únicos valores cinemáticamente permitidos de la pérdida de energía son aquellos que pertenecen al intervalo  $0 < W < W_m(Q)$  (ver la Figura A.3).

En el régimen no-relativista, la energía de retroceso es

$$Q \equiv (\hbar q)^2 / 2m_e, \quad (\text{A.18})$$

y los límites del intervalo  $(Q_-^{\text{nr}}, Q_+^{\text{nr}})$  de energías de retroceso son

$$Q_{\pm}^{\text{nr}} = \frac{M}{m_e} \left[ \sqrt{E} \pm \sqrt{E - W} \right]^2. \quad (\text{A.19})$$

La máxima pérdida de energía para un valor dado de  $Q$  [ $< Q_+(0)$ ] es

$$W_m^{\text{nr}}(Q) = \sqrt{\frac{m_e}{M} Q} \left( 2\sqrt{E} - \sqrt{\frac{m_e}{M} Q} \right). \quad (\text{A.20})$$

Nótese que  $W_m^{\text{nr}}(Q)$  crece sin límite cuando la energía  $E$  del proyectil crece. Este hecho se contrapone al caso relativista, donde la ec. (A.17) muestra que  $[Q(Q + 2m_e c^2)]^{1/2}$  es una cota superior para  $W_m(Q)$ .

Para una pérdida de energía  $W$  dada, la cantidad

$$\hbar q_- \equiv c^{-1} \sqrt{Q_-(Q_- + 2m_e c^2)}, \quad (\text{A.21})$$

es el valor mínimo de la transferencia de momento en una colisión inelástica, lo que sucede cuando  $\theta = 0$ .  $\hbar q_-$  es siempre mayor que  $W/c$ . Cuando la energía del proyectil crece,  $\beta \rightarrow 1$  y  $\hbar q_-$  decrecen tendiendo al valor  $W/c$ , pero sin llegar a alcanzarlo. Es oportuno recordar que un fotón con energía  $W$  en vacío tiene un momento lineal  $\hbar q = W/c$  y, consecuentemente, aquellas interacciones que consisten en la emisión de fotones están ubicadas sobre la línea

$$W_0(Q) = c\hbar q = \sqrt{Q(Q + 2m_e c^2)} \quad (\text{A.22})$$

del plano  $(Q, W)$ , conocida como línea de fotones en vacío. Esta línea descansa fuera de la región cinemáticamente permitida, es decir, la energía de “retroceso” de un fotón es siempre menor que  $Q_-$  (ver las Figuras A.2 y A.3). Por lo tanto, cuando el blanco es un átomo aislado, la emisión de fotones por el proyectil no es posible<sup>1</sup>. Cuando la energía  $E$  del proyectil crece,  $Q_-$  decrece y tiende a la línea de fotones cuando  $\beta$  tiende a la unidad. Por lo tanto, la conservación del momento y de la energía prácticamente no impiden la emisión de fotones por proyectiles ultra-relativistas en medios de baja-densidad. De manera general, como la interacción implica el intercambio de fotones virtuales, la SED crece a medida que el fotón se hace más real, esto es, cuando nos acercamos a la línea de fotones. Para un gas poco denso, esto causa un crecimiento gradual de la sección eficaz con la energía del proyectil  $\beta \rightarrow 1$ .

---

<sup>1</sup>En materia condensada, los proyectiles ultra-relativistas pueden emitir fotones reales (radiación Cerenkov) bajo ciertas condiciones muy restrictivas.



# Apéndice B

## Funciones de onda de Dirac

En este Apéndice, resumiremos de manera breve algunos aspectos concretos de la ecuación de Dirac, y fijaremos la notación que se emplea en las secciones de teoría. El hamiltoniano de Dirac para un electrón en un potencial central  $V(r)$  es (ver, por ejemplo, Rose, 1961)

$$\mathcal{H}_D = c\tilde{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \tilde{\beta}m_e c^2 + V(r), \quad (\text{B.1})$$

donde  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  es el operador momento, y  $\tilde{\alpha}$  y  $\tilde{\beta}$  son las matrices de Dirac. La representación estándar de estas matrices es

$$\tilde{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\beta} = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

donde por  $\boldsymbol{\sigma}$  se indican las familiares matrices  $2 \times 2$  de spin de Pauli, y  $I_2$  es la matriz unidad  $2 \times 2$ .

La ecuación de ondas de Dirac independiente del tiempo toma la forma

$$\left[ c\tilde{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \tilde{\beta}m_e c^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = \mathcal{W}\psi(\mathbf{r}), \quad (\text{B.3})$$

donde  $\mathcal{W}$  es el valor propio de la energía (total).

### B.1. Ondas planas

En el caso de electrones libres ( $V \equiv 0$ ), el hamiltoniano (B.1) conmuta con el operador de momento, y, por lo tanto, existe un conjunto completo de autofunciones  $\phi_{\mathbf{k}\mu\tau}(\mathbf{r})$  común a  $\mathcal{H}_D$  y  $\mathbf{p}$ . Estas funciones son las ondas planas

$$\phi_{\mathbf{k}\mu\tau}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} U_{\mathbf{k}\mu\tau}, \quad (\text{B.4})$$

donde el índice  $\tau$  ( $= \pm 1$ ) denota el signo de la energía,  $\mu = \pm 1/2$  y donde  $U_{\mathbf{k}\mu\tau}$  son los siguientes spinores dobles,

$$U_{\mathbf{k},\mu,+1} = \left[ 1 + \frac{(c\hbar k)^2}{(|\mathcal{W}| + m_e c^2)^2} \right]^{-1/2} \begin{pmatrix} I_2 \\ + \frac{c\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{|\mathcal{W}| + m_e c^2} \end{pmatrix} \chi_\mu, \quad (\text{B.5a})$$

$$U_{\mathbf{k},\mu,-1} = \left[ 1 + \frac{(c\hbar k)^2}{(|\mathcal{W}| + m_e c^2)^2} \right]^{-1/2} \begin{pmatrix} - \frac{c\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{|\mathcal{W}| + m_e c^2} \\ I_2 \end{pmatrix} \chi_\mu, \quad (\text{B.5b})$$

y

$$\chi_{+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.6})$$

son las spinores unitarios de Pauli. Se puede verificar fácilmente que, dado  $\mathbf{k}$ ,

$$U_{\mathbf{k}\mu'\tau'}^\dagger U_{\mathbf{k}\mu\tau} = \delta_{\mu',\mu} \delta_{\tau',\tau} \quad \text{y} \quad \sum_{\mu,\tau} U_{\mathbf{k}\mu\tau} U_{\mathbf{k}\mu\tau}^\dagger = I_4. \quad (\text{B.7})$$

## B.2. Ondas esféricas y ondas planas distorsionadas

Consideremos ahora un electrón en un potencial central  $V(r)$ . El operador de momento angular para una partícula de Dirac es  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ , donde  $\mathbf{L} = -i\mathbf{r} \times \nabla$  es el momento angular orbital y  $\mathbf{S}$  es el momento angular de spin (todos los momentos angulares están en unidades de  $\hbar$ ). Como  $\mathcal{H}_D$  conmuta con  $\mathbf{J}^2$ ,  $J_z$  y con el operador de paridad ( $\mathcal{P} = \tilde{\beta} \times$  la inversión espacial), existe una base completa de funciones propias común a estos cuatro operadores. Estas funciones son las ondas esféricas, y tienen la forma (Rose, 1961; Grant, 1965)

$$\psi_{\epsilon\kappa m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P(r)_{\epsilon\kappa} \Omega_{\kappa,m}(\hat{\mathbf{r}}) \\ iQ(r)_{\epsilon\kappa} \Omega_{-\kappa,m}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

donde  $\Omega_{\kappa,m}(\hat{\mathbf{r}})$  son spinores esféricos, y  $P_{\epsilon\kappa}(r)$  y  $Q_{\epsilon\kappa}(r)$  son la componente mayor y menor de las funciones radiales, las cuales satisfacen el par acoplado de ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} \frac{dP_{\epsilon\kappa}}{dr} &= -\frac{\kappa}{r} P_{\epsilon\kappa} + \frac{\epsilon - V + 2m_e c^2}{c\hbar} Q_{\epsilon\kappa}, \\ \frac{dQ_{\epsilon\kappa}}{dr} &= -\frac{\epsilon - V}{c\hbar} P_{\epsilon\kappa} + \frac{\kappa}{r} Q_{\epsilon\kappa}. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

donde  $\epsilon = \mathcal{W} - m_e c^2$  es la energía del electrón, descontando su energía en reposo. Los spinores esféricos son funciones propias del momento angular total de la teoría de Pauli, y vienen dados por

$$\Omega_{\kappa,m}(\hat{\mathbf{r}}) \equiv \Omega_{j,m}^\ell(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_{\mu=\pm 1/2} \langle \ell, \frac{1}{2}, m - \mu, \mu | j, m \rangle Y_{\ell, m - \mu}(\hat{\mathbf{r}}) \chi_\mu. \quad (\text{B.10})$$

Estos son funciones propias de manera simultánea de  $L^2$ ,  $S_{\mathbf{p}}^2$ ,  $J^2$  y  $J_z$  con valores propios  $\ell(\ell+1)$ ,  $3/4$ ,  $j(j+1)$  y  $m$ , respectivamente. Aquí,  $\mathbf{S}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$  denota el operador bidimensional de spin de Pauli. Las cantidades  $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j, m \rangle$  son coeficientes Clebsch-Gordan, y  $\chi_{\mu}$  son los spinores de Pauli, es decir, estados propios de  $S_{\mathbf{p}}^2$  y  $S_{\mathbf{p}3}$  con valores propios  $3/4$  y  $\mu = \pm\frac{1}{2}$ , respectivamente. Explícitamente,

$$\begin{aligned} \Omega_{\ell\pm 1/2, m}^{\ell}(\hat{\mathbf{r}}) &= \begin{pmatrix} \langle \ell, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} | j, m \rangle Y_{\ell, m-1/2}(\hat{\mathbf{r}}) \\ \langle \ell, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | j, m \rangle Y_{\ell, m+1/2}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{\ell \pm m + \frac{1}{2}} Y_{\ell, m-1/2}(\hat{\mathbf{r}}) \\ \sqrt{\ell \mp m + \frac{1}{2}} Y_{\ell, m+1/2}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Para simplificar la notación, se acostumbra a introducir el número cuántico relativista de momento angular

$$\kappa = (\ell - j)(2j + 1), \quad (\text{B.12})$$

que especifica tanto el momento angular total  $j$  como la paridad  $[(-1)^{\ell}]$  de la onda esférica de Dirac,

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2}, \quad \ell = j + \frac{\kappa}{2|\kappa|} = \begin{cases} \kappa & \text{si } \kappa > 0 \\ -\kappa - 1 & \text{si } \kappa < 0 \end{cases}. \quad (\text{B.13})$$

También, es conveniente considerar el número cuántico

$$\bar{\ell} \equiv \begin{cases} -\kappa & \text{si } \kappa < 0 \\ \kappa - 1 & \text{si } \kappa > 0 \end{cases} = \ell - \frac{\kappa}{|\kappa|}, \quad (\text{B.14})$$

que es el valor de  $\ell$  correspondiente a  $-\kappa$ . Nótese que la onda esférica  $\psi_{E\kappa m}(\mathbf{r})$  no es una autofunción de  $L^2$ ; el índice  $\ell$  usado en la notación espectroscópica es el autovalor de la componente superior del espinor, e indica la paridad del estado propio.

Los potenciales DHFS empleados en los cálculos actuales resultan de la combinación de un potencial de corto alcance y del potencial de Coulomb,

$$V(r) = V_{\text{sr}} + \frac{Z_{\infty} e^2}{r}, \quad (\text{B.15})$$

donde la componente de corto alcance de  $V_{\text{sr}}(r)$  se anula para  $r$  mayores que  $r_{\text{Latter}}$ , que es el punto donde comienza la cola de Latter [ver la ec. (2.17)], y  $Z_{\infty} = -1$  para átomos neutros. Las funciones de onda radiales para estos potenciales se pueden calcular numéricamente con una precisión elevada utilizando el paquete de subrutinas RADIAL (Salvat y Fernández-Varea, 2009). El algoritmo numérico implementado en estas subrutinas combina una interpolación con un spline cúbico del potencial  $rV(r)$ , con una expansión en serie de potencias de la función de onda radial, de tal forma que los errores

de redondeo se reducen de manera efectiva. En el caso de orbitales ligados ( $\epsilon < 0$ ), cada nivel discreto de energía se caracteriza por el número cuántico principal  $n$  y por número cuántico relativista  $\kappa$ . Los orbitales ligados calculados con la RADIAL se normalizan a la unidad y, por lo tanto, los orbitales calculados satisfacen la relación de ortonormalidad

$$\int \psi_{n'\kappa'm'}^\dagger(\mathbf{r})\psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{n'n} \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{m'm}. \quad (\text{B.16})$$

La normalización de las funciones radiales de las ondas esféricas libres (con  $\epsilon > 0$ ) es tal, que la componente mayor de la función de onda radial oscila de manera asintótica con amplitud unidad,

$$P_{\epsilon\kappa}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin\left(kr - \ell\frac{\pi}{2} - \eta \ln 2kr + \delta_{\epsilon\kappa}\right), \quad (\text{B.17})$$

donde

$$k = (c\hbar)^{-1} \sqrt{\epsilon(\epsilon + 2m_e c^2)} \quad (\text{B.18})$$

es el número de onda y  $\eta = Z_\infty e^2 m_e / (\hbar^2 k)$  es el parámetro de Sommerfeld. El defasaje  $\delta_{\epsilon\kappa}$  se determina numéricamente integrando las ecuaciones radiales de dentro ( $r = 0$ ) hacia fuera, hasta un punto más allá del rango  $r_c$  del potencial  $V_{\text{sr}}$ , y empalmándolo en ese punto con una combinación de las funciones regular e irregular de Dirac-Coulomb. El paquete de subrutinas RADIAL implementa algoritmos eficientes para calcular las funciones de onda de Dirac-Coulomb. En el límite  $Z_\infty = 0$ , las funciones radiales de Dirac-Coulomb se reducen a funciones de Bessel, y por lo tanto, el algoritmo genérico es válido también para potenciales de alcance finito. Las ondas esféricas libres normalizadas a partir de (B.17) satisfacen la relación de ortogonalidad

$$\int \psi_{\epsilon'\kappa'm'}^\dagger(\mathbf{r})\psi_{\epsilon\kappa m}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{\epsilon}{k} \pi \delta(\epsilon' - \epsilon) \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{m'm}. \quad (\text{B.19})$$

En teoría de colisiones, los estados de las partículas libres en los canales inicial y final se describen mediante el uso de ondas planas distorsionadas (OPDs), es decir, con soluciones de la ecuación de Dirac con el potencial  $V(r)$ , que asintóticamente se comportan como ondas planas sumadas a una onda esférica saliente (+) o entrante (-). Una OPD se caracteriza por el vector de ondas  $\mathbf{k}$  y el spin  $\mu$ ; esta función se puede expandir utilizando una base de ondas esféricas como (ver, por ejemplo, Rose, 1961)

$$\psi_{\mathbf{k}\mu}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\epsilon + 2m_e c^2}{\pi(\epsilon + m_e c^2)}} \sum_{\kappa,m} i^\ell \exp(\pm i\delta_\kappa) \left\{ \left[ \Omega_{\kappa m}(\hat{\mathbf{k}}) \right]^\dagger \chi_\mu \right\} \psi_{\epsilon\kappa m}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.20})$$

donde

$$\epsilon = \sqrt{(c\hbar k)^2 + (m_e c^2)^2} - m_e c^2 \quad (\text{B.21})$$

es la energía cinética de la partícula. La expansión (B.20) se conoce como serie de ondas parciales. De manera sencilla, se puede verificar que, con la normalización que hemos

adoptado para las ondas esféricas libres, las OPDs satisfacen la relación de ortogonalidad

$$\int \left[ \psi_{\mathbf{k}'\mu'}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \right]^\dagger \psi_{\mathbf{k}\mu}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \delta_{\mu'\mu}. \quad (\text{B.22})$$

En el límite donde la intensidad del potencial tiende a cero ( $V = 0$ ), el defasaje se hace cero y la función de onda radial de los estados libres ( $E > 0$ ) se reduce a una función esférica de Bessel regular

$$\begin{aligned} P_{\epsilon\kappa}^{(0)}(r) &= kr j_\kappa(kr), & Q_{\epsilon\kappa}^{(0)}(r) &= \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon + 2m_e c^2}} kr j_{\kappa-1}(kr) && \text{si } \kappa > 0, \\ P_{\epsilon\kappa}^{(0)}(r) &= kr j_{-\kappa-1}(kr), & Q_{\epsilon\kappa}^{(0)}(r) &= -\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon + 2m_e c^2}} kr j_{-\kappa}(kr) && \text{si } \kappa < 0. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

De forma más compacta, para cualquier  $\kappa$ , tenemos

$$P_{\epsilon\kappa}^{(0)}(r) = kr j_\ell(kr), \quad Q_{\epsilon\kappa}^{(0)}(r) = \frac{\kappa}{|\kappa|} \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon + 2m_e c^2}} kr j_{\bar{\ell}}(kr), \quad (\text{B.24})$$

donde, como ha hemos dicho,  $\bar{\ell}$  es el valor de  $\ell$  correspondiente a  $-\kappa$ , ec. (B.14). Nótese que, en el límite  $V = 0$ , la OPD se reduce a una onda plana de energía positiva,  $\psi_{\mathbf{k}\mu}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \rightarrow \phi_{\mathbf{k},\mu,+1}(\mathbf{r})$ .



# Apéndice C

## Lista de publicaciones y comunicaciones a congresos

### • Publicaciones

Bote, D. y F. Salvat (2008), “Calculations of inner-shell ionization by electron impact with the distorted-wave and plane-wave Born approximations”, *Phys. Rev. A* **77**, 042701 (1–24).

Bote, D., X. Llovet y F. Salvat (2008), “Monte Carlo simulation of characteristic x-ray emission from thick samples bombarded by kiloelectronvolt electrons”, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 105304 (1–9).

Bote, D., F. Salvat, A. Jablonski y C.J. Powell (2009), “Cross sections for ionization of K, L and M shells of atoms by impact of electrons and positrons with energies up to 1 GeV. Analytical formula”, *At. Data Nucl. Data Tables* **95** 871–909.

Bote, D., F. Salvat, A. Jablonski y C.J. Powell (2009), “The effect of inelastic absorption on the elastic scattering of electrons and positrons in amorphous solids”, *J. Elect. Spect. Rel. Phenoma* **175** 41–54.

Bote, D. y F. Salvat (2010), “Inelastic collisions of fast charged particles with atoms. Relativistic plane-wave Born approximation”, *informe interno*, Universitat de Barcelona.

### • Comunicaciones a congresos

Bote, D., X. Llovet, F. Salvat (2006), “Ionización de capas internas de átomos por impacto de electrones”. *Encuentro de Física Nuclear 2006, Valencia. Conferencia.*

Bote, D., X. Llovet, F. Salvat (2006), “Monte Carlo simulation of K x-ray production by electrons”. *10th International Symposium on Radiation Physics, Coimbra (Portugal)*. **Póster**.

Bote, D., F. Salvat-Pujol, J.A. Escuder, C.J. Powell y F. Salvat (2008), “Cross sections for the ionization of atoms by electron impact. A numerical database and an analytical formula”. *Microscopy and Microanalysis (M&M08), Albuquerque, U.S.A.* **Póster**

Bote, D. (2008). “Colisiones electrón-átomo: secciones eficaces de ionización de capas atómicas internas”. *I Jornada de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular, Madrid*. **Conferencia invitada**

Bote, D. (2010). “Inelastic collisions of fast charged particles with atoms. Derivation of Bethe asymptotic formulas and calculation of shell corrections”. *II Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular, Barcelona*. **Conferencia invitada**

# Bibliografía

- Abramowitz, M. y I.A.S. (1974), eds. *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover, New York).
- Ahlen, S.P. (1980), “Theoretical and experimental aspects of the energy loss of relativistic heavily ionizing particles”, *Rev. Mod. Phys.* **52**, 121–173.
- An, Z., M.T. Liu, Y.C. Fu, Z.M. Luo, C.H. Tang, C.M. Li, B.H. Zhang y Y.J. Tang (2003), “Some recent progress on the measurement of K-shell ionization cross-sections of atoms by electron impact: Application to Ti and Cr elements”, *Nucl. Instrum. Methods B* **207**, 268–274.
- Baek, W.Y. y B.Grosswendt (2003), “Total electron scattering cross sections of He, Ne and Ar, in the energy range 4 eV 2 keV”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, 731–753.
- Besenbacher, F., U. Andersen y E. Bonderup (1980), “Stragglng in energy loss of energetic hydrogen and helium ions”, *Nucl. Instrum. Methods* **168**, 1–15.
- Bethe, H. (1930), “Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie”, *Ann. Physik* **397**, 325–400.
- Bethe, H. (1932), “Bremsformel ffor Elektronen relativistischer Geschwindigkeit.”, *Z. Physik* **76**, 293–299.
- Bethe, H. (1933), “Quantenmechanik der Ein und ZweiElektronenprobleme”, in *Quantentheorie*, editado por H. Geiger y K. Scheel, “Handbuch der Physik” Vol. 24/I (Springer, Berlin), pp. 273–560.
- Bhabha H.J. (1936), “The scattering of positrons by electrons with exchange on Dirac’s theory of the positron”, *Proc. R. Soc. London A* **154**, 195–206.
- Bichsel, H. (1983), “Stopping power of M-shell electrons for heavy charged particles”, *Phys. Rev. A* **28**, 1147–1150.
- Bichsel, H. (2002), “Shell corrections in stopping powers”, *Phys. Rev. A* **65**, 52709.
- Bonderup, E. (1967), “Stopping of swift protons evaluated from statistical atomic model”, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **35**, 17.
- Bote, D. y F. Salvat (2008), “Calculations of inner-shell ionization by electron impact with the distorted-wave and plane-wave Born approximations”, *Phys. Rev. A* **77**, 042701.

- Bote, D., X. Llovet y F. Salvat (2008), “Monte Carlo simulation of characteristic x-ray emission from thick samples bombarded by kiloelectronvolt electrons”, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41**, 105304.
- Bote, D., F. Salvat, A. Jablonski y C.J. Powell (2009a), “Cross sections for ionization of K, L and M shells of atoms by impact of electrons and positrons with energies up to 1 GeV. Analytical formula”, *At. Data Nucl. Data Tables* **95**, 871–909.
- Bote, D., F. Salvat, A. Jablonski y C.J. Powell (2009b), “The effect of inelastic absorption on the elastic scattering of electrons and positrons in amorphous solids”, *J. Elect. Spect. Rel. Phenoma* **175**, 41–54.
- Bote, D. y F. Salvat (2010), “Inelastic collisions of fast charged particles with atoms. Relativistic plane-wave Born approximation”, *informe interno*, Universitat de Barcelona.
- Bransden, B.H. (1983), *Atomic Collision Theory* (Benjamin/Cummings, London).
- Bransden, B.H. y C.J. Joachain (1983), *Physics of Atoms and Molecules* (Longman, Essex, England).
- Breit, G. y H.A. Bethe (1954), “Ingoing waves in final state of scattering problems”, *Phys. Rev.* **93**, 888–890.
- Bromberg, J.P. (1974), “Absolute differential cross sections of electrons elastically scattered by the rare gases. I. Small angle scattering between 200 and 700 eV”, *J. Chem. Phys.* **61**, 963–969.
- Carlson, T.A. (1975), *Photoelectron and Auger Spectroscopy* (Plenum Press, New York).
- Casnati, E., A. Tartari y C. Baraldi (1982), “An empirical approach to K-shell ionisation cross section by electrons”, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15**, 155.
- Chang, C.N. (1979), “L-subshell ionization cross sections for tungsten at low energies”, *Phys. Rev. A* **19**, 1930.
- Chen, M.H. y B. Crasemann (1985), “Relativistic cross sections for atomic K- and L-shell ionization by protons, calculated from a Dirac-Hartree-Slater model”, *At. Data Nucl. Data Tables* **33**, 217–233.
- Chen, M.H. y B. Crasemann (1989), “Atomic K-shell, L-shell, and M-shell cross-sections for ionization by protons - a relativistic hartree-slater calculation”, *At. Data Nucl. Data Tables* **41**, 257–285.
- Cohen, S.M. (2003a), “Bethe stopping power theory for heavy-element targets and relativistic projectiles”, *Phys. Rev. A* **68**, 012720.
- Cohen, S.M. (2003b), “Range of validity for perturbative treatments of relativistic sum rules”, *Phys. Rev. A* **68**, 042704.
- Colgan, J., C.J. Fontes y H.L. Zhang (2006), “Inner-shell electron-impact ionization of neutral atoms”, *Phys. Rev. A* **73**, 062711.
- Condon, E.U. (1930), “The theory of complex spectra”, *Phys. Rev.* **36**, 1121–1133.

- Condon, E.U. y H. Odabaşı (1980), *Atomic Structure* (Cambridge University Press, New York).
- Davis, D.V., V.D. Mistry y C.A. Quarles (1972), “Inner-shell ionization of copper, silver and gold by electron bombardment”, *Phys. Lett.* **38A**, 169.
- Dehmer, J.L., M. Inokuti y R.P. Saxon (1975), “Systematics of moments of dipole oscillator-strength distributions for atoms of the first and second row”, *Phys. Rev. A* **12**, 102–121.
- DuBois, R.D. y M.E. Rudd (1976), “Differential cross sections for elastic scattering of electrons from argon, neon, nitrogen and carbon monoxide”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **9**, 2657–2667.
- Edmonds, A.R. (1960), *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, NJ).
- Fano, U. (1954), “Ionizing collisions of very fast particles and the dipole strength of optical transitions”, *Phys. Rev.* **95**, 1198–1200.
- Fano, U. (1956), “Differential inelastic scattering of relativistic charged particles”, *Phys. Rev.* **102**, 385–387.
- Fano, U. (1963), “Penetration of protons, alpha particles and mesons”, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **13**, 1–66.
- Fernández-Varea, J.M., R. Mayol, F. Salvat y D. Liljequist (1992), “A comparison of inelastic electron scattering models based on delta-function representations of the Bethe surface”, *J. Phys.: Cond. Mat.* **4**, 2879–2890.
- Fernández-Varea, J.M., F. Salvat, M. Dingfelder y D. Liljequist (2005), “A relativistic optical-data model for inelastic scattering of electrons and positrons in condensed matter”, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **229**, 187–218.
- Grant, I.P. (1961), “Relativistic self-consistent fields”, *Proc. Roy. Soc. A* **262**, 555–576.
- Grant, I.P. (1965), “Relativistic self-consistent fields”, *Proc. Phys. Soc. A* **86**, 523–527.
- Hansen, H. y A. Flammersfeld (1966), “Messung des Wirkungsquerschnitts für K-ionisierung durch Stoss nieder energetische Negatonen und Positonen”, *Nucl. Phys.* **79**, 135.
- Heredia-Avalos, S., R. Garcia-Molina, J.M. Fernández-Varea e I. Abril (2005), “Calculated energy loss of swift He, Li, B, and N ions in SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and ZrO<sub>2</sub>”, *Phys. Rev. A* **72**, 052902.
- Hippler, R., H. Klar, K. Saeed, I. McGregor, H. Kleinpoppen y A.J. Duncan (1983), “Threshold behaviour of Ar K and Xe L3 ionisation by electron impact”, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16**, L617–L621.
- Hippler, R., I. McGregor, M. Aydinol y H. Kleinpoppen (1981), “Ionization of L subshells by low-energy electron impact”, *Phys. Rev. A* **23**, 1730.
- Hippler, R., K. Saeed, I. McGregor y H. Kleinpoppen (1982), “Energy dependence At. Data Nucl. Data Tables of characteristic and bremsstrahlung cross sections of argon induced by electron bombardment at low energies”, *Z. Physik A* **307**, 83–87.

- ICRU Report 37 (1984), *Stopping Powers for Electrons and Positrons* (ICRU, Bethesda, MD).
- Iga, I., L. Mu-Tao, J.C. Nogueira y R.S. Barbieri (1987), “Elastic differential cross section measurements for electron scattering from Ar and O<sub>2</sub> in the intermediate-energy range”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **20**, 1095–1104.
- Inokuti, M., Y.K. Kim y R.L. Platzman (1967), “Total cross sections for inelastic scattering of charged particles by atoms and molecules. I. A sum rule for the Bethe cross sections and its application to the helium atom”, *Phys. Rev.* **164**, 55.
- Inokuti, M. (1971), “Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules — The Bethe theory revisited”, *Rev. Mod. Phys.* **43**, 297–347.
- Inokuti, M., R.P. Saxon y J.L. Dehmer (1975), “Total cross-sections for inelastic scattering of charged particles by atoms and molecules—VIII. Systematics for atoms in the first and second row”, *Int. Journal for Rad. Phys. and Chem.* **7**, 109–120.
- Inokuti, M., J.L. Dehmer, T. Baer y J.D. Hanson (1981), “Oscillator-strength moments, stopping powers, and total inelastic-scattering cross sections of all atoms through strontium”, *Phys. Rev. A* **23**, 95–109.
- Jablonski, A., F. Salvat y C.J. Powell (2004), “Differential cross sections for elastic scattering of electrons by atoms and solids”, *J. Elect. Spect. Rel. Phenoma* **137**, 299–303.
- Jackson, J.D. (1975), *Classical Electrodynamics* (John Wiley and Sons, New York).
- Jansen, R. H.J., F.J. de Heer, H.J. Luyken, B. van Wingerden y H.J. Blaauw (1976), “Absolute differential cross sections for elastic scattering of electrons by helium, neon, argon and molecular nitrogen”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **9**, 185–212.
- Joachain, C.J. (1983), *Quantum Collision Theory* (North Holland, Amsterdam).
- Johnson, W.R. y K.T. Cheng (1979), “Quantum defects for highly stripped ions”, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12**, 863–879.
- Johnson, R. E. y M. Inokuti (1983), “Electronic relaxation in rare-gas solids - ejection of atoms by fast charged-particles”, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **206**, 289–297.
- Kauppila, W.E., T.S. Stein, J.H. Smart, M.S. Dababneh, Y.K. Ho, J.P. Downing y V. Pol (1981), “Measurements of total scattering cross sections for intermediate-energy positrons and electrons colliding with helium, neon, and argon”, *Phys. Rev. A* **24**, 725–742.
- Khandelwal, G.S. y E. Merzbacher (1966), “Stopping power of M electrons”, *Phys. Rev.* **144**, 349–352.
- Kim, Y.K. y M. Inokuti (1970), “Total cross sections for inelastic scattering of charged particles by atoms and molecules. V. Evaluation of the next order beyond the Bethe asymptote”, *Phys. Rev. A* **3**, 665–678.
- Kim, Y.K. y M.E. Rudd (1994), “Binary encounter model for electron-impact ionization”, *Phys. Rev. A* **50**, 3954–3967.

- Kim, Y.K. (2001), “Scaling of plane-wave Born cross sections for electron-impact excitation of neutral atoms”, *Phys. Rev. A* **64**, 032713.
- Krause, M.O. (1979), “Atomic radiative and radiationless yields for K and L shells”, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8**, 307–327.
- Latter, R. (1955), “Atomic energy levels for the Thomas–Fermi and Thomas–Fermi–Dirac potential”, *Phys. Rev.* **99**, 510–519.
- Liberman, D., D.T. Cromer y J.T. Waber (1971), “Relativistic self-consistent field program for atoms and ions”, *Comp. Phys. Commun.* **2**, 107–113.
- Lindhard, J. (1954), “On the properties of a gas of charged particles”, *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* **28**, 1–57.
- Lindhard, J. y M. Scharff (1953), “Energy loss in matter by fast particles of low charge”, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **27**, 15.
- Lindhard, J. y A.H. Sorensen (1996), “Relativistic theory of stopping for heavy ions”, *Phys. Rev.* **A53**, 2443–2456.
- Liu, M., Z. An, C. Tang, Z. Liu, X. Peng y X. Long (2000), “Experimental electron-impact K-shell ionization cross sections”, *At. Data Nucl. Data Tables* **76**, 213–234.
- Llovet, X., C. Merlet y F. Salvat (2000), “Measurements of K-shell ionization cross sections of Cr, Ni and Cu by impact of 6.5–40 keV electrons”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33**, 3761–3772.
- Mann, J.B. y W.R. Johnson (1971), “Breit interaction in multielectron atoms”, *Phys. Rev. A* **4**, 41–51.
- Manson, S.T., (1972), “Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms: Ionization of the Aluminum L Shell”, *Phys. Rev.* **A6**, 1013–1024 .
- Mayol, R. y F. Salvat (1990), “Cross sections for K-shell ionisation by electron impact”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, 2117–2130.
- Merlet, C., X. Llovet y F. Salvat (2004), “Measurements of absolute K-shell ionization cross sections and L-shell x-ray production cross sections of Ge by electron impact”, *Phys. Rev. A* **69**, 032708.
- Merlet, C., X. Llovet y J.M Fernández-Varea (2006), “Absolute K-shell ionization cross sections and  $L\alpha$  and  $L\beta_1$  x-ray production cross sections of Ga and As by 1.5–39 keV electrons”, *Phys. Rev. A* **73**, 062719.
- Møller C. (1932), “Zur Theorie des Durchgangs schneller Elektronen durch Materie”, *Ann. Physik* **14**, 531–585.
- Mott, N.F. y H.S.W. Massey (1965), *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford University Press, London).
- Nagashima, Y., F. Saito, Y. Itoh, A. Goto y T. Hyodo (2004), “Measurement of Cu K-shell and Ag L-shell ionization cross sections by low-energy positron impact”, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 223201.

- Nakel, W. y C.T. Whelan (1999), “Relativistic (e, 2e) processes”, *Phys. Reports* **315**, 409–471.
- Pálinkás, J. y B. Schlenk (1980), “L-Subshell ionization cross sections for Au, Pb, and Bi by 60-600 keV electron impact”, *Z. Physik A* **297**, 29–33.
- Raith, H. (1968), “Komplexe Atomstreuamplituden für die elastische Elektronenstreuung an Festkörperatomen”, *Acta Crystall. A* **24**, 85–93.
- Rehr, J.J. y R.C. Albers (2000), “Theoretical approaches to x-ray absorption fine structure”, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 621–654.
- Reusch, S., H. Genz, W. Low y A. Richter (1986), “A Method to Determine L-Subshell Ionization Cross Sections for Medium and Heavy Elements”, *Z. Physik. A* **3**, 379–389.
- Riley, M.E. y D.G. Truhlar (1975), “Approximations for the exchange potential in electron scattering”, *J. Chem. Phys.* **63**, 2182.
- Rohrlich, F. y B.C. Carlson (1954), “Positron-Electron Differences in Energy Loss and Multiple Scattering”, *Phys. Rev.* **93**, 38.
- Rose, M.E. (1961), *Relativistic Electron Theory* (John Wiley and Sons, New York).
- Rose, M.E. (1950), *Elementary Theory of Angular Momentum* (Dover, New York).
- Salvat, F., J.M. Fernández-Varea y W. Williamson (1995), “Accurate numerical solution of the radial Schrödinger and Dirac wave equations”, *Comp. Phys. Commun.* **90** 151-168.
- Salvat, F. (2003), “Optical-model potential for electron and positron elastic scattering by atoms”, *Phys. Rev. A* **68**, 12708.
- Salvat, F. y J.M. Fernández-Varea (2009), “Accurate numerical solution of the radial Schrödinger and Dirac wave equations”, *informe interno*, Universitat de Barcelona.
- Salvat, F. y J.M. Fernández-Varea (2009b), “Overview of physical interaction models for photon and electron transport used in Monte Carlo code”, *Metrologia* **46**, S112–S138.
- Salvat, F., J.M. Fernández-Varea y J. Sempau (2009), *PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport* (OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux).
- Schattschneider, P., C. Hébert, H. Franco y B. Jouffrey (2005), “Anisotropic relativistic cross sections for inelastic electron scattering, and the magic angle”, *Phys. Rev. B* **72**, 045142.
- Schneider, H., I. Tobehn, F. Ebel y R. Hippler (1993), “Absolute cross sections for inner shell ionization by lepton impact”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2707–2709.
- Scofield, J.H. (1978), “K- and L-shell ionization of atoms by relativistic electrons”, *Phys. Rev. A* **18**, 963–970.
- Seaton, M.J. (1983), “Quantum defect theory”, *Rep. Prog. Phys.* **46**, 167–257.

- Segui, S., M. Dingfelder, J.M. Fernández-Varea y F. Salvat (2002), “The structure of the Bethe ridge. Relativistic Born and impulse approximations”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35**, 33–53.
- Segui, S., M. Dingfelder y F. Salvat (2003), “Distorted-wave calculation of cross sections for inner-shell ionization by electron and positron impact”, *Phys. Rev. A* **67**, 062710.
- Seif el Nasr, S. A. H., D. Berényi y G. Bibok (1974), “Inner shell ionization cross sections for relativistic electrons”, *Z. Physik* **267**, 169–174.
- Seif el Nasr, S. A. H., D. Berényi y G. Bibok (1974), “Positron impact inner shell ionization”, *Z. Phys. A* **271**, 207–210.
- Slater, J.C. (1951), “A simplification of the Hartree-Fock method”, *Phys. Rev.* **81**, 385–390.
- Shima K., M. Okuda, E. Suzuki, T. Tsubota y T. Mikumo (1983), “L $\alpha$  x-ray production efficiency from Z=50–82 thick target elements by electron impacts from threshold energy to 30 keV”, *J. Appl. Phys.* **53**, 1202.
- Tan, Z., Y. Xia, M. Zhao, X. Liu, F. Li, B. Huang y Y. Ji (2004), “Electron stopping power and mean free path in organic compounds over the energy range of 20–10,000 eV”, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **222**, 27–43.
- Tang, C., Z. An, Z. Luo y M. Liu (2002), “Measurements of germanium K-shell ionization cross sections and tin L-shell x-ray production cross sections by electron impact”, *J. Appl. Phys.* **91**, 6739–6743.
- Wagenaar, R.W. y F.J. de Heer (1980), “Total cross sections for electron scattering from Ne, Ar, Kr and Xe”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **13**, 3855–3866.
- Wagenaar, R.W. y F.J. de Heer (1985), “Total cross sections for electron scattering from Ar, Kr and Xe”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **18**, 2021–2036.
- Walske M.C. (1952), “The stopping power of K-electrons”, *Phys. Rev.* **88**, 1283.
- Walske M.C. (1956), “Stopping power of L-electrons”, *Phys. Rev.* **101**, 940.
- Williams, J.F. y B.A. Willis (1975), “The scattering of electrons from inert gases I. Absolute differential elastic cross sections for argon atoms”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **8**, 1670–1682.
- Zhou, C., Z. An y Z. Luo (2002), “Measurement of K-shell production cross sections for Ga, Ge and Zr elements by electron impact”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35**, 841–845.
- Zhou, C. G., Z. An y Z. M. Luo (2001), “Measurement and correction of K-shell ionization cross sections for copper and gallium by electron impact”, *Chin. Phys. Lett.* **18**, 759.
- Zhou, C. G., Y. C. Fu, Z. An, C. H. Tang y Z. M. Luo (2001), “Measurement and multiple scattering correction of K-Shell ionization cross sections of silver by electron impact”, *Chin. Phys. Lett.* **18**, 531.
-