

PROPUESTA DE TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

DATOS GENERALES DE LA PROPUESTA

Título de la propuesta: **Doble fotoionización de blancos moleculares**

Apellido y Nombres del director: **Randazzo Juan Martín**

Teléfono: **005492944539360**

Dirección electrónica del director (ingresar una sola dirección): **randazzo@cab.cnea.gov.ar**

Cargo IB: **JTP**

¿Propone codirector? : **NO**

Datos Co-director:

Dirección electrónica del codirector (ingresar una sola dirección):

Título máximo alcanzado del codirector (Doctor, Magister, otros) : **Doctor**

Cargo docente del codirector en el IB (no excluyente):

Justifique brevemente el rol del Codirector:

Lugar de realización: **Departamento de Interacción de la Radiación con la Materia, Grupo FAMOP**

DETALLE TÉCNICO DE LA PROPUESTA

Orientación:

Interacción Radiación-Materia

Breve descripción: **En este trabajo se estudiará el problema de doble fotoionización (DPI) de blancos moleculares, en donde la absorción de un único fotón promueve dos electrones al continuo del ion doblemente cargado. Se empleará un formalismo que describe la dinámica por medio de la función de onda de scattering estacionario, determinada por la interacción dipolar entre el estado ligado inicial y el campo.**

Este proceso se observa con frecuencia en situaciones donde radiación electromagnética interactúa con un medio líquido o gaseoso, por lo que su tratamiento es de interés en radioterapia (ionización de H_2O), física de la atmósfera, etc. Sin embargo, una correcta descripción del problema constituye un gran desafío, tanto desde el punto de vista experimental como teórico, debido al número de partículas involucradas y grados de libertad que ello implica. El proceso más simple de doble fotoionización corresponde al caso del átomo de Helio (tres cuerpos), en el cual los estados iniciales y finales pueden evaluarse exactamente por medio de metodologías numéricas. Para sistemas más complejos deben emplearse aproximaciones, y los modelos resultan sensibles a la descripción del estado inicial, una correcta descripción de las interacciones y condiciones asintóticas para los dos electrones emitidos.

La propuesta de trabajo tiene varias componentes importantes, que podrán ser abarcadas según los intereses (teórico-computacional) del candidato, garantizando en todos los casos la generación de datos atómicos teóricos para contrastar con resultados experimentales.

El objetivo principal del trabajo es la el desarrollo de un software que permita acoplar orbitales

moleculares al cálculo de secciones eficaces de doble fotoionización. Dichos orbitales provienen de códigos abiertos de química cuántica como DALTON [<https://www.daltonprogram.org>], y consisten en expansiones en términos de funciones gaussianas en varios centros. Mediante un programa de cálculo de integrales atómicas como Ukmol [Z. Masin, et, al, Computer Physics Communications 249 (2020) 107092], es posible proyectar las series gaussianas en una base monocéntrica numérica (bsplines), para luego ser consideradas como estados iniciales en el cálculo de DPI. Los estados de scattering para dos electrones salientes se evalúa en términos de funciones Sturmianas generalizadas de flujo saliente. El desarrollo permitirá la generación de datos atómicos de DPI para un gran número de blancos moleculares.

Metodología principal: **Computacional**

Metodología secundaria: **Teórico**

Información adicional:

¿Propone que el tema sea considerado para suplemento de beca por tema prioritario?**NO**

Justifique porqué su propuesta debe ser considerada como tema prioritario:

Indique Gerente o Jefe de Departamento que avala su petición: