



Proyectos de la Secretaría de Investigación, Internacionales y Posgrado

| |
|---|
| Convocatoria: PROYECTO SIIP TIPO 1 BIENAL 2019 |
| Título: DOBLE FOTOIONIZACION DE BLANCOS MOLECULARES: TRATAMIENTO EXACTO DE LA CORRELACION ELECTRONICA. |

| |
|--|
| Director: RANDAZZO, JUAN MARTIN |
| Codirector: |
| Área: ionización de agua |

Resumen de Proyecto:

En este proyecto desarrollaremos un modelo para la descripción del continuo de dos electrones emitidos desde una molécula, luego de la absorción de un fotón. Como estados iniciales se consideraran combinaciones separables de orbitales de representados desde un único centro, provenientes del método de campo autoconsistente multiconfiguracional (orbitales de Moccia). Para la descripción de los estados del continuo se considerará la función de scattering estacionaria que describe en forma exacta la correlación electrónica, y la interacción con el remanente de molécula cargada en una aproximación de potencial central. La orientación y estructura molecular serán consideradas a través del estado inicial, realizándose luego la estadística correspondiente en la orientación molecular la comparación de la sección eficaz diferencial teórica con la experimental. Los datos que se generen de esta metodología serán comparados con resultados experimentales en agua de inminente publicación, pudiendo extenderse en forma inmediata al tratamiento de otras moléculas tales como NH₃, NH₄, SiH₄, H₂S o HCl, entre otras.

Palabras Claves : 1- ionización de agua 2- doble fotoionización 3- ionización molecular

Título (Inglés): Double photoionization of molecular targets: the exact description of the electronic correlation

Resumen de Proyecto (inglés):

We will develop a model the continuum of two electrons after single photon absorption from molecular targets. As the initial states we will consider the independent electron model composed by products of Moccia orbitals, obtained by Multi-configurational self-consistent field method, while the evolution of the two electrons in presence of the charged molecule fragment will be described by the scattering wave function, evaluated by the Generalized Sturmian Method. The geometry and orientation of the molecule will be considered in the initial state, and a spherical average of the potential will be performed for the final state. Finally we will perform the average of the cross sections in order to compare with experiments. We will consider the water molecule first to compare with recent experimental results, and extend the calculation to other systems molecular systems like NH₃, NH₄, SiH₄, H₂S or HCl.

Palabras Claves : 1- water ionization 2- double photoionization 3- molecular ionization



EQUIPO DE TRABAJO

RANDAZZO, JUAN MARTIN

| | |
|--------------------------|----------|
| randazzo@cab.cnea.gov.ar | Director |
| DIV.COLISIONES ATOMICAS | |

BARRACHINA TEJADA, RAUL OSCAR

| | |
|--------------------------------------|--------------|
| barra@cab.cnea.gov.ar | Investigador |
| COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA | |

DELLA PICCA, RENATA

| | |
|-------------------------|--------------|
| renata@cab.cnea.gov.ar | Investigador |
| DIV.COLISIONES ATOMICAS | |

GRAMAJO, ANA ALICIA

| | |
|-----------------------------|---------|
| gramajo.anaalicia@gmail.com | Becario |
| DIV.COLISIONES ATOMICAS | |

Este objeto está alojado en la Biblioteca Digital en la URL: siip2019-2021.bdigital.uncu.edu.ar .

Se ha aportado el día 19/06/2020 a partir de la exportación de la plataforma SIGEVA de los proyectos bianuales de la SIIP 2019-2021