

Excitación Simple y Doble de Átomos de Helio

CESAR A. RAMIREZ[#] y ROBERTO D. RIVAROLA[#]

INSTITUTO DE FÍSICA DE ROSARIO (CONSEJO NACIONAL DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS Y TÉCNICAS), UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO, AV. PELLEGRINI 250, 2000 ROSARIO.
e-mail: cesarr@unrctu.edu.ar

Se estudian la excitación electrónica simple y doble de átomos de Helio por impacto de protones utilizando una aproximación Symmetric Eikonal [1] para velocidades intermedias y altas, en un modelo de cuatro cuerpos. Los resultados teóricos de secciones eficaces de excitación simple, se comparan con mediciones experimentales.

Single and double electronic excitation of He atoms by impact of protons are studied. A Symmetric Eikonal approximation [1], for intermediate and high velocities, in a four bodies model is used. The theoretical results of cross sections are compared with experimental data.

Introducción

En este trabajo se estudia la excitación electrónica de átomos de He por colisión con protones, utilizando un modelo de cuatro cuerpos, dentro de una aproximación Symmetric Eikonal (SE) [1], para velocidades de impacto intermedias y altas respecto a las velocidades medias de orbitación de los electrones del átomo. La excitación simple se obtiene como un caso particular de la excitación doble, considerando a uno de los electrones *congelado* en su estado inicial.

Se consideran cargas nucleares *efectivas* y energías de orbitación *efectivas* extraídas de un cálculo variacional para la energía mínima de cada estado del átomo de He y los estados ligados dielectrónicos se describen como productos de dos funciones de onda hidrogenicas, distorsionadas por fases eikonalas.

Se analiza la influencia de uno de los electrones sobre la probabilidad de excitación del otro electrón en los procesos de excitación simple y doble.

Salvo que se aclare expresamente, todas las magnitudes están dadas en unidades atómicas.

[#] Departamento de Física, Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario.

Teoría

La reacción se describe empleando la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto.

El Hamiltoniano electrónico para la colisión $H^+ + He(1s^2) \rightarrow H^+ + He(nl, n'l')$ se describe en la forma:

$$H = \sum_{k=1}^2 \left(-\frac{1}{2} \nabla_k^2 - \frac{Z_T}{x_k} - \frac{Z_P}{s_k} \right) + \frac{1}{|s_1 - s_2|} + \frac{Z_P Z_T}{R}, \quad (1)$$

donde \mathbf{x}_k (\mathbf{s}_k) es el vector posición del electrón k -ésimo respecto al blanco (proyectil), \mathbf{R} es el vector posición del proyectil respecto al blanco y Z_T (Z_P) es la carga nuclear del blanco (proyectil).

La función de onda exacta describiendo la evolución de los dos electrones debe satisfacer la ecuación de Schrödinger

$$(H - i \frac{\partial}{\partial t}) \Psi_{i,f}^{\pm}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = 0 \quad (2)$$

Las funciones de onda con correctas condiciones salientes $\Psi_i^+(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ y entrantes $\Psi_f^-(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ presentan los límites asintóticos:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_i^+ = \Phi_i(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \exp(-i\varepsilon_i t) \times \exp\left(+i \frac{Z_P(Z_T - 2)}{v} \ln(Rv - \mathbf{R} \cdot \mathbf{v})\right), \quad (3a)$$

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_f^- = \Phi_f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \exp(-i\varepsilon_f t) \times \exp\left(-i \frac{Z_P(Z_T - 2)}{v} \ln(Rv + \mathbf{R} \cdot \mathbf{v})\right) \quad (3b)$$

$\Phi_{i,f}$ representa las funciones de onda dielectrónicas de los estados ligados inicial y final del átomo de He, \mathbf{v} es la velocidad del proyectil y $\varepsilon_{i,f}$ la energía de los estados ligados dielectrónicos inicial y final.

Se eligen funciones de onda distorsionadas $\chi_{i,f}^\pm$ que satisfagan las condiciones asintóticas (3a) y (3b), de la forma

$$\chi_i^+ = \Phi_i(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \exp(-i\varepsilon_i t) L_i^+(s_1) L_i^+(s_2) \times \exp\left(+i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln(Rv - \mathbf{R} \cdot \mathbf{v})\right), \quad (4a)$$

$$\chi_f^- = \Phi_f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \exp(-i\varepsilon_f t) L_f^-(s_1) L_f^-(s_2) \times \exp\left(-i \frac{Z_P Z_T}{v} \ln(Rv + \mathbf{R} \cdot \mathbf{v})\right), \quad (4b)$$

donde se han introducido las fases eikoniales

$$L_i^+(s_k) = \exp\left(-i \frac{Z_P}{v} \ln(s_k v + \mathbf{s}_k \cdot \mathbf{v})\right), \quad (5a)$$

$$L_f^-(s_k) = \exp\left(+i \frac{Z_P}{v} \ln(s_k v - \mathbf{s}_k \cdot \mathbf{v})\right). \quad (5b)$$

La amplitud de transición en la forma prior es

$$A_{if}^-(\rho) = -i \lim_{t \rightarrow -\infty} \int_t^{+\infty} dt \left\langle \Psi_f^- \left| H - i \frac{\partial}{\partial t} \right| \chi_i^+ \right\rangle, \quad (6)$$

considerando que debe cumplirse la condición

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \left\langle \Psi_f^- \left| \chi_i^+ \right. \right\rangle = 0.$$

Aproximando la función de onda exacta $\Psi_f^-(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ por la función de onda distorsionada χ_f^- , la amplitud de transición resulta

$$A_{if}^-(\rho) = (v \rho)^{2i \frac{Z_P Z_T}{v}} B_{if}^-(\rho), \quad (7)$$

donde ρ es el parámetro de impacto y

$$B_{if}^-(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\varepsilon t) \times \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{1f}^*(\mathbf{x}_1) \varphi_{1i}(\mathbf{x}_1) \varphi_{2f}^*(\mathbf{x}_2) \varphi_{2i}(\mathbf{x}_2) \times [L_f^*(s_1) L_i^+(s_1) L_f^*(s_2) P_2 L_i^+(s_2) + L_f^*(s_2) L_i^+(s_2) L_f^*(s_1) P_1 L_i^+(s_1)] \quad (8)$$

En la expresión (8) de la amplitud de transición B_{if}^- , las funciones dielectrónicas $\Phi_{i,f}$ de los estados ligados del He fueron reemplazadas por funciones aproximadas, construidas con productos de funciones de onda monoeléctricas $\varphi_{ki,f}$ de tipo hidrogénicas.

Las energías inicial y final del átomo de He, $\varepsilon_{i,f}$, se obtienen usando el método de Rayleigh y Ritz, como los valores mínimos correspondientes a cargas efectivas del núcleo atómico; $Z_{T1} = Z_{T2} = 1.6875$, para el estado inicial del átomo dielectrónico y Z_{T1}^* y Z_{T2}^* , para el estado final. $\varepsilon = \varepsilon_f - \varepsilon_i$ y $P_{1,2}$ son los operadores de perturbación en la aproximación Simmetric Eikonal, dados por la expresión:

$$P_k = -\frac{\nabla_k^2}{2} - (\nabla_k \ln \varphi_{ki}) \cdot \nabla_k \quad (9)$$

La ecuación (8) puede llevarse a la forma

$$B_{if}^-(\rho) = S_{2if}(\rho) B_{1if}^-(\rho) + S_{1if}(\rho) B_{2if}^-(\rho) \quad (10)$$

donde

$$S_{kif}(\rho) = \int d\mathbf{r}_k \varphi_{kf}^*(\mathbf{x}_k) \varphi_{ki}(\mathbf{x}_k) L_f^*(s_k) L_i^+(s_k) = \left\langle \varphi_{kf} \left| (v \rho s_k)^{-2i \frac{Z_P}{v}} \right| \varphi_{ki} \right\rangle \quad (11)$$

y

$$B_{kif}^-(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\varepsilon t) \times \int d\mathbf{r}_k \varphi_{kf}^*(\mathbf{x}_k) \varphi_{ki}(\mathbf{x}_k) L_f^*(s_k) P_k L_i^+(s_k) \quad (12)$$

La expresión (12) de B_{kif}^- corresponde a una forma típica de la amplitud de transición monoeléctrica dentro de la aproximación SE. Sin embargo debe tenerse en cuenta que, en este

análisis, la transferencia de energía corresponde al proceso atómico completo.

En la expresión (11), ρ_{Sk} se define como el parámetro de impacto del proyectil respecto al electrón k-ésimo, considerando a éste último como fijo en la posición \mathbf{x}_k .

El término $(v\rho_{Sk})^{-2i\nu}$ (con $\nu=Zp/v$) de la expresión (11), representa la amplitud de dispersión elástica del proyectil respecto al electrón k-ésimo, considerado como una carga puntual. Las distribuciones espaciales del electrón en sus estados inicial y final están consideradas en la amplitud de dispersión S_{kif} .

Para grandes parámetros de impacto ($\rho \gg \langle x_k \rangle$), $\rho_{Sk} \cong \rho$, y

$$S_{kif}(\rho) \cong (v\rho)^{-2i\nu} \langle \varphi_{kf} | \varphi_{ki} \rangle \quad (13)$$

Para el caso en que el electrón k-ésimo se excita a un estado con $l \neq 0$, este término tiende a cero. Cuando este electrón se promueve desde el estado fundamental a un estado $1s^*$ con carga efectiva final $Z_{T_k}^*$, este término resulta:

$$S_{kif}(\rho) \cong (v\rho)^{-2i\nu} \frac{8(Z_{T_k} Z_{T_k}^*)^{3/2}}{(Z_{T_k} + Z_{T_k}^*)^3} \quad (14)$$

Cuando el parámetro de impacto es pequeño, ($\rho \ll \langle x_k \rangle$), y si hay transición a un estado con $l \neq 0$, S_{kif} tiende a cero. Pero si el electrón k-ésimo se promueve al estado final $1s^*$, el módulo de S_{kif} toma la forma.

$$|S_{kif}| \cong \frac{8(Z_{T_k} Z_{T_k}^*)^{3/2}}{(Z_{T_k} + Z_{T_k}^*)^3} \left(\frac{\pi v}{\sinh(\pi v)} \right) \sqrt{1+v^2} \quad (15)$$

Esta última depende sólo de la velocidad de impacto del proyectil a través de v .

La probabilidad de doble excitación puede calcularse con:

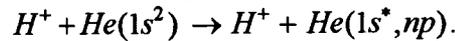
$$|B_{if}^-(\rho)|^2 = |S_{2if}(\rho)|^2 |B_{1if}^-(\rho)|^2 + |S_{1if}(\rho)|^2 |B_{2if}^-(\rho)|^2 + \text{Re}[S_{2if}(\rho) S_{1if}^*(\rho) B_{1if}^-(\rho) B_{2if}^*(\rho)] \quad (16)$$

Donde $|S_{kif}|^2$ se puede interpretar como la probabilidad de dispersión elástica integrada sobre las posiciones espaciales inicial y final del electrón k-ésimo y $|B_{kif}|^2$ es la probabilidad de excitación del electrón k-ésimo en la aproximación SE.

La probabilidad total resulta la suma de las probabilidades de excitación de cada electrón multiplicadas por las probabilidades de dispersión elástica debida al otro electrón, mas un término de interferencia entre los dos sumandos de la amplitud total.

Resultados y aplicaciones

En este trabajo se presentan resultados para excitación simple en:



En el presente análisis suponemos arbitrariamente que el electrón 2 es el que se excita a un estado np y el otro electrón se promueve a un estado $1s^*$ con una carga efectiva final $Z_{T_1}^*$. Todos los resultados se multiplican por el factor 2 para tener en cuenta la simetrización de la función de onda del estado final.

Las amplitudes de dispersión elástica, en este caso son :

$$S_{1if}(\rho) = \int d\mathbf{r}_1 \varphi_{1f}^*(\mathbf{x}_1) \varphi_{1i}(\mathbf{x}_1) L_f^*(\mathbf{s}_1) L_i^+(\mathbf{s}_1) = \frac{(Z_{T_1} Z_{T_1}^*)^{3/2}}{\pi} \int d\mathbf{r}_1 \exp[-(Z_{T_1} + Z_{T_1}^*)x_1] \times (v\rho_{s_1})^{-2i\nu} \quad (17)$$

$$S_{2if}(\rho) = \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{2f}^*(\mathbf{x}_2) \varphi_{2i}(\mathbf{x}_2) L_f^*(\mathbf{s}_2) L_i^+(\mathbf{s}_2) = \frac{(Z_{T_2})^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int d\mathbf{r}_2 \exp[-Z_{T_2} x_2] \varphi_{2f}^*(\mathbf{x}_2) \times (v\rho_{s_2})^{-2i\nu} \quad (18)$$

En la figura 1 se representa $|S_{Iif}|^2$ con un estado inicial $1s$ y un estado final $1s^*$. Esta probabilidad resulta cercana a la unidad para valores grandes del parámetro de impacto, como correspondería a una dispersión de Rutherford, y

va disminuyendo a medida que ρ decrece. Por otro lado, para valores grandes de la energía de colisión, $|S_{Jif}|^2$ se aproxima a la unidad, para cualquier valor de ρ .

La probabilidad de transición $\rho|B_{2if}|^2$ es mayor que el producto $\rho|A_{Jif}B_{2if}|^2$. Podría decirse entonces, que la probabilidad de transición del electrón 2 se ve afectada por la presencia del otro electrón, y en una proporción mayor en los parámetros de impacto pequeños. Esta influencia aumenta cuando disminuye la energía del proyectil.

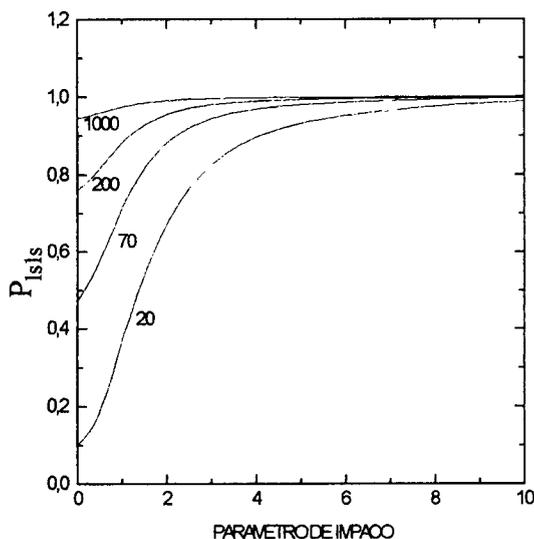


Figura 1. Probabilidad de dispersión elástica para energías del proyectil de 20 a 1000 keV.

Se calcularon las secciones eficaces de excitación simple del He a estados $(1s, np)$, con n variando de 2 a 5. También se hizo el cálculo en la aproximación SE con un modelo de tres cuerpos considerando cargas efectivas del núcleo del helio para el electrón activo. Ambos cálculos se comparan con datos experimentales en la figura 2. En ésta se ve que las secciones eficaces totales de excitación simple del átomo de He, usando el modelo de cuatro cuerpos, disminuyen y ajustan mejor los puntos experimentales para valores intermedios de colisión, respecto al cálculo hecho con un modelo monoeléctrico o de tres cuerpos.

Para la excitación simple el primero y el tercer término de la ecuación (16) resultan despreciables respecto al segundo, cuando el

estado inicial y final del electrón 1 son $1s$ y $1s^*$ respectivamente, y son nulos cuando éste se supone congelado en el estado $1s$.

Todos los resultados presentados en la figura 2, corresponden al caso en que uno de los electrones queda congelado durante la colisión en su estado inicial dando un buen acuerdo con los datos experimentales en las secciones eficaces totales en la zona de altas energías y mejorando el acuerdo, en la zona de energías intermedias, respecto al cálculo con la aproximación SE y con un modelo de tres cuerpos.

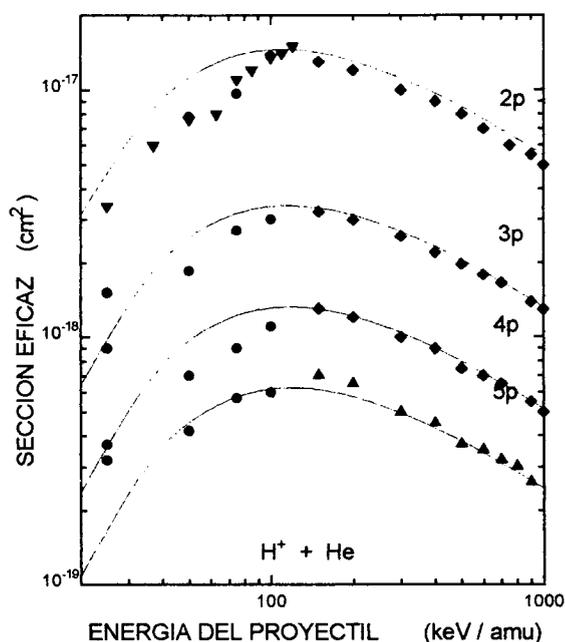


Figura 2. Secciones eficaces totales de excitación simple de He a estados finales $(1s, np)$, con n variando de 2 a 5, por impacto de H^+ : línea llena, SE cuatro cuerpos; Línea de trazos, SE tres cuerpos. Datos experimentales: triángulo, referencia [2]; triángulo invertido [3]; diamante [4]; círculo en 2p [5]; círculo en 3p a 5p [6]. Las líneas entre puntos experimentales están para mayor claridad.

También se calcularon secciones eficaces de excitación doble de He a los estados $(2s^2)^1S$, $(2s2p)^1P$, $(2p^2)^1S$, $(2p^2)^1D$. En este caso la amplitud de transición a estos estados es una combinación lineal de las B_{if} para cada estado final $(nl, n'l')$. Estos resultados no se presentan en este trabajo.

Referencias

- 1- Deco G. R., Fainstein P. D., y Rivarola R. D., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19**, 213 (1986).
- 2- Thomas E. W. y Bent G. D., *Phys. Rev. A* **164**, 143 (1967).
- 3- Park J.T. y Schowengerdt F. D., *Phys. Rev. A* **185**, 152 (1969).
- 4- Hippler R. y Schartner R.-H., *J. Phys. B* **7**, 618 (1974).
- 5- Kvale T. J., Seely D. G., Blankenship D. M. y otros, *Phys. Rev. A* **32**, 1369 (1985).
- 6- Van den Bos J., Winter G. J., de Heer F. J., *Physica* **40**, 357 (1968).