

Captura y excitación simultáneas en colisiones $O^{8+} + H_2$

S.E. CORCHS, H.F. BUSNENGO y R.D. RIVAROLA

INSTITUTO DE FÍSICA ROSARIO (CONICET-UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO)
AV. PELLEGRINI 250 - (2000) ROSARIO - ARGENTINA

e-mail: busnengo@unrctu.edu.ar

En el presente trabajo se estudia el proceso de captura y excitación simultáneas en colisiones $O^{8+} + H_2$. Se aplica un modelo de eventos independientes para describir el proceso de dos electrones activos. Se supone que en primer lugar se produce la captura electrónica desde el blanco H_2 y posteriormente el proyectil (desnudo) excita al ion molecular residual H_2^+ . El proceso de captura se modeliza con una aproximación de centros independientes y se utiliza el modelo *Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State* para el cálculo de las amplitudes atómicas. La probabilidad de excitación del H_2^+ se evalúa utilizando la primera aproximación de Born. La probabilidad del proceso de dos electrones se expresa entonces, como el producto de la probabilidad de captura desde H_2 y la correspondiente probabilidad de excitación del H_2^+ . Se calculan secciones eficaces diferenciales en función de la orientación molecular y se comparan con los datos experimentales disponibles.

In the present work the simultaneous capture and excitation process in $O^{8+} + H_2$ collisions is studied. An independent event model is used to describe the two active electron process. It is supposed that in a first step one electron is captured from the H_2 target and then the (bare) projectile excites the residual molecular H_2^+ . The capture process is described within an independent center approximation using the Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State approximation for the calculation of the atomic amplitudes. The probability of excitation of the H_2^+ is computed employing the first Born approximation. Then, the probability of the two electron process is written as the product of the capture probability from H_2 and the corresponding probability of excitation of the H_2^+ . Differential cross sections as a function of the molecular orientation are calculated and compared with the available experimental data.

Introducción

Las colisiones ion-molécula han sido estudiadas por numerosos autores y en particular se ha analizado la dependencia de las secciones eficaces simple diferenciales (SED) con la orientación molecular¹⁻⁷. Existen datos experimentales de SED correspondientes al proceso de captura electrónica simple en coincidencia con la disociación del ion molecular residual en colisiones $O^{8+} + H_2$ para energías de impacto desde 2 a 16 MeV^{8,9}.

Wang *et al*¹⁰ propusieron un modelo de eventos independientes para estudiar el proceso de captura y excitación simultáneas en colisiones con H_2 . Ambos subprocesos fueron evaluados en primera aproximación de Born (OBK). Los cálculos, realizados para impacto de protones a altas energías de colisión, indicarían que la

dependencia angular de las SED está gobernada principalmente por el proceso de captura electrónica simple independientemente del estado final del blanco residual.

En lo que respecta a secciones eficaces totales de captura, la aproximación de Born sobreestima los valores experimentales para la reacción $O^{8+} + H_2$ en un orden de magnitud⁶. Por lo tanto es de utilidad el empleo de un nuevo modelo para la descripción de tal proceso.

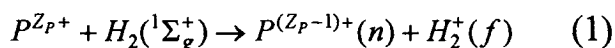
Dado que se trata de colisiones en las que interviene un proyectil multicargado, el modelo *Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State*¹¹ (CDW-EFS) es adecuado para ser usado en la descripción de tal sistema. Recientemente

Busnengo *et al*¹² calcularon secciones eficaces totales de captura simple para el sistema mencionado encontrando un buen acuerdo con las correspondientes mediciones¹³.

El presente trabajo tiene por objeto comparar la dependencia angular de las SED de captura calculadas con las aproximaciones CDW-EFS y OBK. También se estudia la influencia de considerar el proceso de excitación del ion molecular residual H_2^+ a un estado disociativo.

Teoría

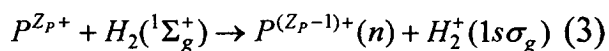
En este trabajo estudiamos el siguiente proceso de captura y excitación simultáneas en colisiones con blancos de H_2



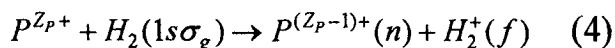
donde P^{Z_p+} indica al proyectil de carga Z_p , n es el número cuántico principal del electrón capturado y $H_2^+(f)$ indica el estado final excitado del ion molecular H_2^+ .

Suponemos que el proyectil interactúa con cada uno de los electrones del blanco en forma independiente. Extendiendo el modelo de eventos independientes, previamente desarrollado para el caso de blancos atómicos dielectrónicos¹⁴, la probabilidad P^{CE} del proceso de captura y excitación puede escribirse como $P^{CE}(\mathbf{b}) = P^C(\mathbf{b})P_f^{ex}(\mathbf{b})$ (2)

donde \mathbf{b} representa el parámetro de impacto referido al punto medio del eje internuclear ρ . Además, $P^C(\mathbf{b})$ es la probabilidad del proceso de captura simple



y $P_f^{ex}(\mathbf{b})$ es la probabilidad correspondiente al proceso de excitación electrónica del ion residual H_2^+



Es decir, hemos supuesto que el proyectil captura primero un electrón del blanco H_2 y posteriormente el proyectil (desnudo) excita al blanco residual H_2^+ desde su estado fundamental $1s\sigma_g$ a un estado final disociativo f .

Cálculo de $P^C(\mathbf{b})$:

Para describir el proceso (3) utilizamos una aproximación a dos centros, suponiendo que el electrón fue capturado desde el centro 1 ó desde el centro 2 en forma independiente. La amplitud de captura se evalúa entonces como

$$a_M^C(\mathbf{b}) = \frac{1}{2} [a_1^C(\mathbf{b}) + a_2^C(\mathbf{b})] \quad (5)$$

donde $a_1^C(\mathbf{b})$ y $a_2^C(\mathbf{b})$ indican las amplitudes de captura desde el centro 1 y 2 respectivamente.

Introduciendo los parámetros de impacto \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 referidos a los centros 1 y 2 respectivamente queda

$$a_M^C(\mathbf{b}) = \frac{1}{2} \left[\exp\left(-i\frac{\alpha_z \rho_z}{2}\right) a_1^C(\mathbf{b}_1) + \exp\left(i\frac{\alpha_z \rho_z}{2}\right) a_2^C(\mathbf{b}_2) \right] \quad (6)$$

donde el factor de fase introduce un término de interferencia de la forma

$$\alpha_z \rho_z = \left(\frac{v}{2} - \frac{\Delta E}{v} \right) \rho \cos \theta_\rho \quad (7)$$

siendo v es la velocidad inicial del proyectil y θ_ρ el ángulo polar de orientación del eje molecular ρ (el eje z está dado por la dirección de v). Además, en la ecuación (7)

$$\Delta E = \frac{Z_p^2}{2n^2} + \varepsilon_{H_2^+} - \varepsilon_{H_2} \quad (8)$$

con ε_{H_2} ($\varepsilon_{H_2^+}$) la energía de la molécula H_2 (H_2^+) en el estado fundamental.

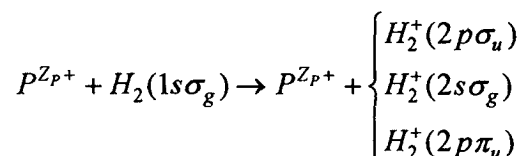
Finalmente, la probabilidad P^C se obtiene a partir de a_M^C

$$P^C(\mathbf{b}) = |a_M^C(\mathbf{b})|^2 \quad (9)$$

Como en el presente trabajo nos interesamos en el proceso de captura por un proyectil altamente cargado, las amplitudes atómicas a_1^C y a_2^C serán calculadas en la aproximación *Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State*¹¹ (CDW-EFS).

Cálculo de $P_f^{ex}(\mathbf{b})$:

Consideremos la excitación del blanco H_2^+ desde su estado fundamental a los tres primeros estados excitados



Para evaluar la amplitud de transición $a_M^{ex}(\mathbf{b})$ correspondiente a este proceso empleamos el cálculo en primer orden de Born desarrollado por Wang *et al*¹⁰. La aproximación consiste en expresar las funciones de onda inicial Φ_i y final Φ_f del H_2^+ como combinación lineal de orbitales atómicos, ϕ_i y ϕ_f , centrados en cada uno de los centros de la molécula

$$\Phi_i = N_i [\phi_i(\mathbf{x}_1) + (-1)^{g_i} \phi_i(\mathbf{x}_2)] \quad (10)$$

$$\Phi_f = N_f [\phi_f(\mathbf{x}_1) + (-1)^{g_f} \phi_f(\mathbf{x}_2)] \quad (11)$$

donde \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 representan la coordenada electrónica respecto a los núcleos 1 y 2 del blanco H_2^+ respectivamente. Además, $g_{i,f}$ designa el estado *gerade* o *ungerade* de $\Phi_{i,f}$ y $N_{i,f}$ es la constante de normalización correspondiente.

Para el estado fundamental $1s\sigma_g$ se tiene que $\phi_i = |1s\rangle$ y $g_i = 0$. Para los posibles estados finales $\phi_f = |1s\rangle$, $g_f = 1$ para $2p\sigma_u$; $\phi_f = |2s\rangle$, $g_f = 0$ para $2s\sigma_g$ y $\phi_f = |2p_{\pm 1}\rangle$, $g_f = 0$ para $2p\pi_u$.

En primera aproximación de Born, la amplitud de transición a_M^{ex} , en el método de parámetro de impacto, resulta

$$a_M^{ex}(\mathbf{b}) = -Z_p N_i N_f \left[\exp\left(-i \frac{\Delta E \rho_z}{2v}\right) a_1(\mathbf{b}_1) + (-1)^{g_i + g_f} \exp\left(i \frac{\Delta E \rho_z}{2v}\right) a_2(\mathbf{b}_2) + (-1)^{g_i} a_{12}(\mathbf{b}) + (-1)^{g_f} a_{21}(\mathbf{b}) \right] \quad (12)$$

donde $a_j(\mathbf{b}_j)$ puede interpretarse como una amplitud de excitación atómica y $a_{12}(\mathbf{b})$ y $a_{21}(\mathbf{b})$ indican términos de dos centros. Estos últimos se cancelan para la excitación al estado $2p\sigma_u$. Para el caso de excitación a los otros dos estados finales, la suma de los términos de dos centros es evaluada en forma aproximada por una amplitud atómica asociada a un centro efectivo en el punto medio del eje molecular¹⁰. Además, en la ecuación (12), ΔE indica la diferencia de energía entre los estados final e inicial del H_2^+ .

Finalmente, la probabilidad de excitación del blanco H_2^+ desde el estado fundamental a un estado final excitado f se calcula como

$$P_f^{ex}(\mathbf{b}) = |a_M^{ex}(\mathbf{b})|^2 \quad (13)$$

A partir de la probabilidad $P^C(\mathbf{b})$ se calculan las secciones eficaces simple diferenciales de captura (SEDC)

$$\frac{d\sigma^C}{d \cos \theta_\rho} = \int_0^{2\pi} d\phi_\rho \int d\mathbf{b} P^C(\mathbf{b}) \quad (14)$$

y a partir de la probabilidad $P^{CE}(\mathbf{b})$ se evalúan las secciones eficaces diferenciales de captura y excitación simultáneas (SEDCE)

$$\frac{d\sigma^C}{d \cos \theta_\rho} = \int_0^{2\pi} d\phi_\rho \int d\mathbf{b} P^{CE}(\mathbf{b}) \quad (15)$$

Resultados y discusiones

En esta sección se presentan SED por impacto de iones O^{8+} sobre moléculas de H_2 para energías de colisión de 10 MeV y 16 MeV. Se comparan las correspondientes SEDC, calculadas dentro de las aproximaciones CDW-EFS (presente trabajo) y OBK. Los resultados OBK⁹ corresponden a captura hasta $n=19$. Los cálculos teóricos están normalizados a los experimentos en $\theta_\rho = 90^\circ$.

También se presentan resultados de SEDCE utilizando el modelo CDW-EFS para la captura y OBK para la excitación. Los resultados se comparan con datos experimentales existentes de Cheng *et al*⁹. Los cálculos CDW-EFS corresponden a captura hasta $n=5$ y hemos supuesto válida la ley n^{-3} para estimar la contribución de los restantes estados excitados¹⁵.

En la figura 1 ($E = 10$ MeV) puede verse que los resultados de las SEDC CDW-EFS dan una mejor descripción de la dependencia angular encontrada experimentalmente que los obtenidos con OBK. En la figura 2 ($E = 16$ MeV) se observa que ninguna de las dos aproximaciones describe adecuadamente los datos experimentales.

Para 10 MeV, los resultados de las SEDCE no difieren en un modo significativo respecto de las SEDC calculadas dentro de la aproximación CDW-EFS. Notemos que el modelo de captura

y excitación simultáneas mejora la descripción de las SED experimentales.

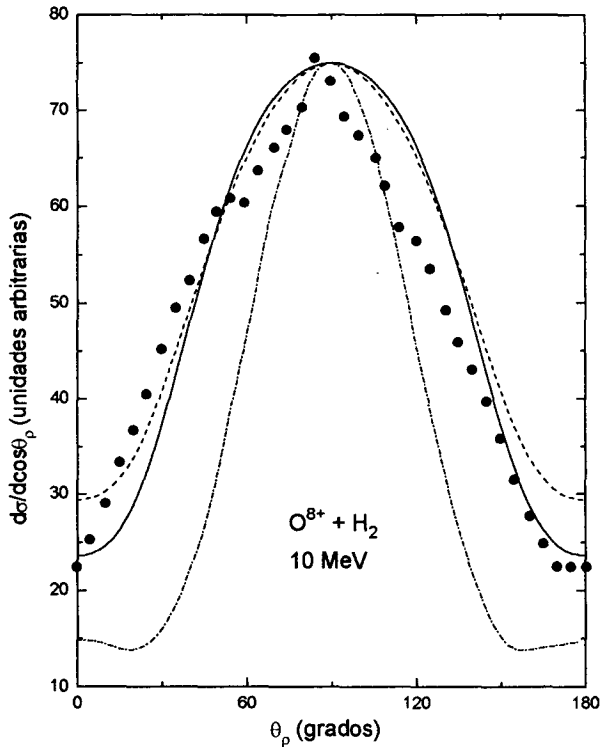


Figura 1: Secciones eficaces diferenciales para colisión de O^{8+} sobre H_2 a 10 MeV. Secciones eficaces de captura: - - - CDW-EFS; - · - · - OBK; secciones eficaces de captura y excitación simultáneas: - · - · - . Datos experimentales: • Cheng et al.⁹

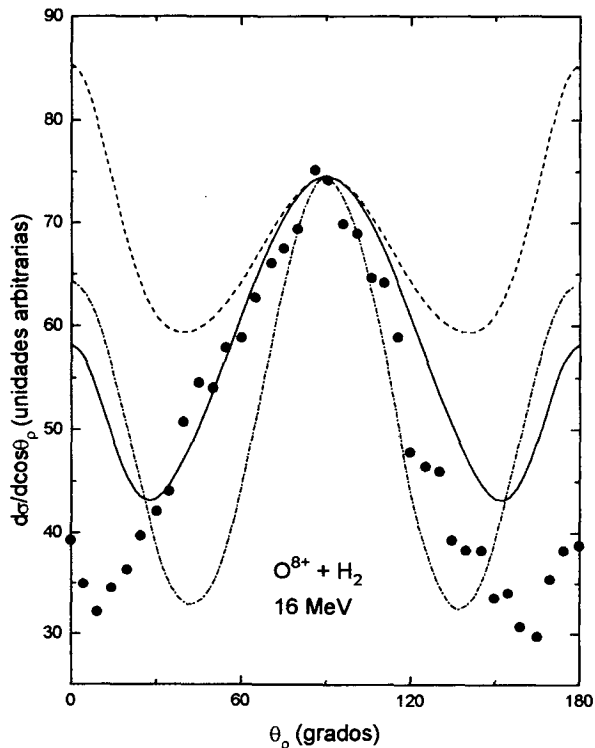


Figura 2: Idem Figura 1 pero para energía de colisión de 16 MeV.

Para 16 MeV la diferencia observada entre las SEDCE y las SEDC CDW-EFS es importante. La inclusión del proceso de excitación en los cálculos de las SED mejora la descripción de los valores experimentales.

La diferencia entre los valores mínimo y máximo en las SEDCE es menor que la diferencia mostrada por los experimentos.

Conclusiones

En el presente trabajo se ha estudiado el proceso de captura electrónica por impacto de iones O^{8+} sobre blancos H_2 en coincidencia con la disociación del ion molecular residual H_2^+ . En particular se han analizado energías de impacto de 10 y 16 MeV, para las cuales existen datos experimentales de SED en función del ángulo de orientación molecular.

Se ha encontrado que la influencia del proceso de excitación sobre la dependencia angular de las SED crece al aumentar la energía de colisión. Para $E = 10$ MeV, los perfiles de las SEDCE resultan similares a las correspondientes SEDC CDW-EFS y a la vez presentan un muy buen acuerdo con los experimentos. Es decir, la dependencia angular de las SED está dada principalmente por la captura. Para $E = 16$ MeV, las SEDCE no reproducen los resultados experimentales como en el caso anterior. Sin embargo, la inclusión de la descripción del proceso de excitación mejora notablemente los resultados encontrados con las SEDC CDW-EFS.

Referencias

- 1- Tuan T. F. y Gerjuoy E., Phys. Rev. **117**, 756 (1960).
- 2 - Ray, T.P. y Saha, B.C., Phys. Lett. **A71**, 415 (1979).
- 3 - Ray, T.P. y Saha, B.C., Phys. Rev. **A23**, 1807 (1981).
- 4 - Shingal, R. y Lin, C.D., Phys. Rev. **A40**, 1302 (1989).
- 5 - Wang, Y.D., McGuire, J.H. y Rivarola, R.D., Phys. Rev. **A40**, 3673 (1989).
- 6 - Wang, Y.D. y McGuire, J.H., Phys. Rev. **A44**, 367 (1991).
- 7 - Corchs, S.E., Rivarola, R.D., McGuire, J.H. y Wang, Y.D., Phys. Rev. **A47**, 201 (1993).
- 8 - Cheng, S., Cocke, C.L., Frohne, V., Kamber, E.Y. y Varghese, S.L., Nucl. Instr. Meth. **B56/57**, 78 (1991).

- 9 - Cheng, S., Cocke, C.L., Frohne, V., Kamber, E.Y., McGuire, J.H. y Wang, Y.D., Phys. Rev A47, 3923 (1993).
- 10 - Wang, Y.D., McGuire, J.H., Weaver, O.L., Corchs, S.E. y Rivarola, R.D., Phys. Rev. A47, 3966 (1993).
- 11 - Busnengo, H.F., Martinez, A.E. y Rivarola, R.D., Physica Scripta 51, 190 (1995).
- 12 - Busnengo, H.F., Corchs, S.E., Rivarola, R.D. y McGuire, J.H., Nucl. Instr. and Meth. B98, 227 (1995).
- 13 - Cheng, S., Cocke, C.L., Kamber, E.Y., Hsu, C.C. y Varghese, S.L., Phys. Rev. A42, 214 (1990).
- 14 - Crothers, D.S.F. y Mc Carroll, R., J. Phys. B20, 2835 (1987).
- 15 - Belkic, Dz., Gayet, R. y Salin, A., Phys. Rep. 56, 279 (1979).