

# Efectos de Dos Centros en Excitación Electrónica

C.A. RAMIREZ<sup>#</sup> Y R.D. RIVAROLA<sup>#</sup>

INSTITUTO DE FÍSICA DE ROSARIO (CONSEJO NACIONAL DE INVESTIGACIONES  
CIENTÍFICAS Y TÉCNICAS), UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO,  
AV. PELLEGRINI 250, 2000 ROSARIO, ARGENTINA.  
*e.mail: colision@jfir.edu.ar*

Se calculan secciones eficaces totales de excitación del átomo de hidrógeno desde el estado fundamental a estados finales  $np$  con el número cuántico principal  $n$  variando desde 2 hasta 6, por impacto de protones y partículas alfa. Estos resultados, obtenidos con la aproximación Symmetric Eikonal [1], se comparan con recientes mediciones. La existencia de efectos de distorsión predichos por Bugacov y colaboradores [2] es probada mediante la comparación de las secciones eficaces totales teóricas y experimentales divididas por el cuadrado de la carga neta del proyectil.

## Introducción

La existencia de efectos de ligadura en la ionización de blancos atómicos por impacto de núcleos livianos fué encontrado por Basbas y colaboradores [3,4] hace ya cerca de veinte años. Cuando la reacción es descripta por el primer orden de la serie de Born, se obtiene una dependencia  $Z_p^2$  (donde  $Z_p$  es la carga nuclear del proyectil) para la probabilidad de ionización en función del parámetro de impacto y la correspondiente sección eficaz total. El efecto de ligadura contribuye en forma sustractiva (con una dependencia  $Z_p^3$ ) a la sección eficaz total para sistemas asimétricos con  $Z_p < Z_T$ , donde  $Z_T$  es la carga nuclear del blanco. El comportamiento en  $Z_p^3$  ha sido interpretado como una interferencia entre el primero y el segundo orden de la serie de Born [5]. La interpretación física que respalda la existencia de este mecanismo es que a velocidades de impacto bajas e intermedias, respecto a la velocidad de orbitación del electrón en el canal de entrada, donde estos efectos aparecen, la reacción de ionización es dominada por la colisión a pequeños parámetros de impacto, aumentando la energía de ligadura inicial y decreciendo entonces la correspondiente sección eficaz total.

<sup>#</sup> Departamento de Física, Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario.

El efecto de ligadura fué también estudiado para sistemas con  $Z_p > Z_T$  usando la aproximación Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State (CDW-EIS) [6]. La buena descripción que da la aproximación CDW-EIS de los datos experimentales se debe esencialmente a la inclusión en la teoría de una fase eikonal, asociada a la interacción electrón-proyectil. Esta fase distorsiona multiplicativamente la función de onda ligada inicial en el canal de entrada, representando al electrón en la presencia simultánea de los campos del proyectil y el blanco. Para estos sistemas, la ionización se produce principalmente a parámetros de impacto más grandes que el radio medio de orbitación inicial del electrón [7,8,9]. Esta zona de parámetros de impacto se desplaza hacia valores mayores cuando  $Z_p$  aumenta, a energías de colisión para las cuales el efecto de ligadura se espera que aparezca.

Debido al carácter de larga distancia del proceso preferimos invocar en este caso, un efecto de distorsión en lugar de un efecto de ligadura.

La posible existencia de efectos de distorsión en la excitación a estados ligados del blanco, debidos a la carga del proyectil, fué predicha por Bugacov y colaboradores [2] para sistemas con  $Z_p > Z_T$ . Estos autores usaron una aproximación Simmetric Eikonal (SE) [1] para estudiar la excitación de un blanco atómico de hidrógeno. En dicha aproximación las funciones

de onda ligadas inicial y final son distorsionadas multiplicativamente por fases eikonaes electrón-proyectil, que verifican correctas condiciones asintóticas salientes y entrantes, permitiendo así una adecuada descripción del proceso a grandes distancias. La intención de este trabajo es probar la existencia de efectos de distorsión en excitación dipolar electrónica mediante la comparación de secciones eficaces teóricas con valores experimentales recientemente obtenidos.

## Teoría

Se calculan las secciones eficaces de excitación de hidrógeno atómico usando la aproximación SE [1]. Las funciones de onda de los estados ligados inicial  $\varphi_i$  y final  $\varphi_f$  son distorsionadas por fases eikonaes electrón-proyectil en ambos estados:

$$\Psi_i = \varphi_i(\mathbf{x}) \exp\left[-i \frac{Z_P}{v} \ln(sv + \mathbf{s} \cdot \mathbf{v})\right], \quad (1a)$$

$$\Psi_f = \varphi_f(\mathbf{x}) \exp\left[+i \frac{Z_P}{v} \ln(sv - \mathbf{s} \cdot \mathbf{v})\right], \quad (1b)$$

donde  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{s}$  son los vectores posición del electrón respecto al núcleo del blanco y al núcleo del proyectil respectivamente y  $\mathbf{v}$  es la velocidad del proyectil.

Las secciones eficaces, para los estados finales hidrogénicos  $np$ , con el número cuántico principal  $n$  variando de 2 a 6, se obtuvieron a partir de la expresión:

$$\sigma = \int d\eta \left| R_{if}^-(\eta) \right|^2, \quad (2)$$

donde  $R_{if}^-(\eta)$  es la transformada de Fourier, función de la componente transversal del momento lineal transferido  $\eta$ , de la amplitud de transición  $A_{if}^-(\rho)$ , función del parámetro de impacto  $\rho$ :

$$R_{if}^-(\eta) = (2\pi)^{-1} \int d\rho \exp(-i \eta \cdot \rho) A_{if}^-(\rho). \quad (3)$$

Las probabilidades de transición en función del parámetro de impacto se calculan usando la expresión:

$$P(\rho) = \left| A_{if}^-(\rho) \right|^2 \quad (4)$$

Para realizar estos cálculos, se considera la función generatriz

$$\varphi(\beta, \mu, \mathbf{x}) = \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \exp[-\beta r] \exp[-i\mu \cdot \mathbf{x}], \quad (5)$$

como función de onda del estado final, obteniéndose así una transformada  $R_{if}^-(\beta, \mu, \eta)$ , función de los parámetros  $\beta$  y  $\mu$  y del momento  $\eta$ .

Los estados hidrogénicos  $\varphi_{n,l,\pm m}$  pueden obtenerse aplicando a la función  $\varphi$ , definida en la ec.(5), un operador  $D_{n,l,\pm m}$  de derivación en los parámetros  $\beta$  y  $\mu$  ( $l$  y  $\pm m$  son los números cuánticos de momento angular y su proyección en la dirección de la velocidad de colisión):

$$\varphi_{n,l,\pm m}(\mathbf{x}) = D_{n,l,\pm m} \varphi(\beta, \mu, \mathbf{x}) \Big|_{\left(\beta = \frac{Z_T}{n}, \mu=0\right)}, \quad (3)$$

donde

$$D_{n,l,\pm m} = C_{n,l} D_{n,l}^{(1)} D_{l,m}^{(2)} D_{\pm m}^{(3)}, \quad (4)$$

con

$$C_{n,l} = \frac{\left(\frac{iZ}{n}\right)^l}{n^2 l!} \sqrt{(2l+1) \frac{(l+n)!}{(n-l-1)!}}, \quad (5)$$

$$D_{n,l}^{(1)} = \sum_{q=0}^{n-l-1} \binom{n-l-1}{q} \frac{\left(\frac{2Z}{n}\right)^q}{(2l+1+q)!} \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^q, \quad (6)$$

$$D_{l,m}^{(2)} = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \sum_{k=0}^{PE} \binom{l}{k} \frac{(2l-2k)!}{(l-2k-m)!} \times \left(\frac{\partial}{\partial \mu_z}\right)^{l-2k-m} \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^{2k}, \quad (7)$$

(PE es la parte entera de  $(l-m)/2$ )

y

$$D_{\pm m}^{(3)} = (-1)^{\frac{1 \pm l}{2} m} \left( \frac{\partial}{\partial \mu_x} \pm i \frac{\partial}{\partial \mu_y} \right)^m \quad (8)$$

El operador  $D_{n,l,\pm m}$  se deduce a partir de las expresiones de las funciones de onda del hidrógeno escritas en función del módulo del vector posición  $\mathbf{x}$  del electrón y de sus componentes cartesianas.

Aplicando entonces este operador a  $R_{if}(\beta, \mu, \eta)$  e integrando numéricamente su módulo al cuadrado en el espacio de los momentos transferidos transversales  $\eta$  se obtienen las correspondientes secciones eficaces y usando la ecuación (4) se obtienen las probabilidades de excitación a cada estado final.

### Resultados y conclusiones

Datos experimentales muy recientes [10] apoyan las predicciones hechas por Bugacov [2] y colaboradores, sobre la existencia de efectos de distorsión de dos centros en la excitación de blancos por impacto de proyectiles más pesados.

Estos datos experimentales, que se representan en las figuras 1 y 2, muestran la existencia de efectos de distorsión por la carga del proyectil a medida que la energía de impacto disminuye. Las mediciones corresponden a excitación de hidrógeno a los estados  $np$  con el número cuántico principal  $n$  variando de 1 a 6, por impacto de protones y partículas  $\alpha$ . Se representan las secciones eficaces totales divididas por  $Z_p^2$ . Se calculan estas secciones eficaces usando la aproximación SE. Se observa que los resultados teóricos convergen para los distintos proyectiles a medida que la energía crece y para todos los estados analizados. Se comprueba una vez más la validez de la dependencia en  $Z_p^2$  de la aproximación de Born para grandes energías de impacto. Sin embargo, cuando la energía de impacto decrece, las secciones eficaces para las partículas  $\alpha$  se separan de las correspondientes a los proyectiles  $H^+$ . Este efecto de distorsión se observa para los números cuánticos principales  $n=2, 3, 4$  y  $5$ , no resultando tan claro para  $n=6$ .

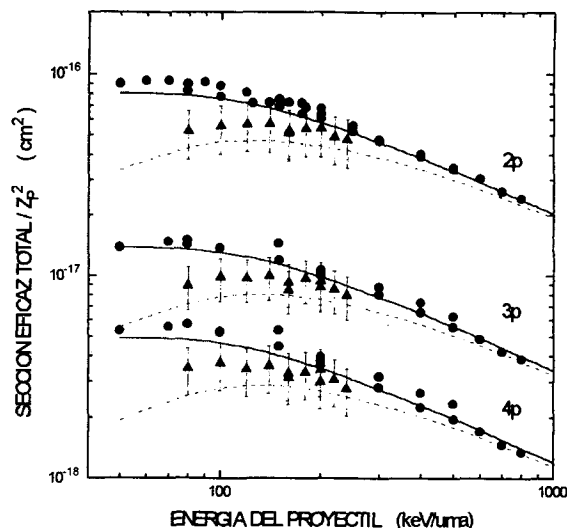


Figura 1: Secciones eficaces totales (divididas por el cuadrado de la carga del proyectil) de excitación de  $H(1s)$  a los estados  $2p, 3p$  y  $4p$  por impacto de iones  $H^+$  y  $He^{2+}$  a energías de colisión desde 50 a 800 keV/uma. Curvas SE: línea llena,  $H^+$ ; línea quebrada  $He^{2+}$ . Datos experimentales extraídos de la referencia [10]: círculos,  $H^+$ ; triángulos  $He^{2+}$ .

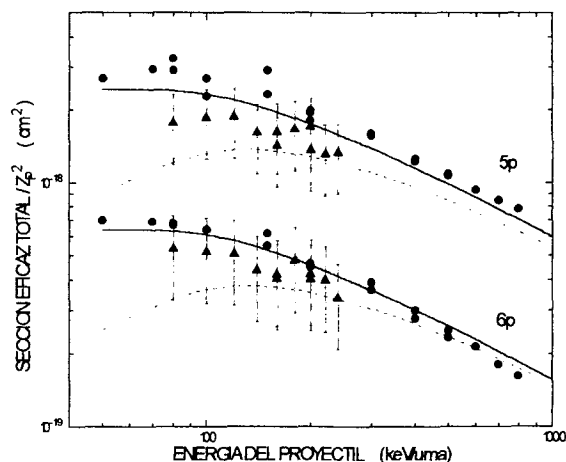


Figura 2: Idem a figura 1 para excitación a los estados  $5p$  y  $6p$ . La sección eficaz para el estado  $6p$  se presenta dividida por el factor 2.

En la figura 3 se representan las probabilidades de excitación multiplicadas por el parámetro de impacto (probabilidad reducida) y divididas por la carga del proyectil al cuadrado, para impacto de partículas  $\alpha$  y protones a energías de colisión de 60 y 400 keV/uma. Puede observarse un decrecimiento de la probabilidad para impacto de partículas  $\alpha$  respecto al caso de protones, produciéndose

una desviación de la dependencia en  $Zp^2$  predicha por la primera aproximación de Born. Este efecto es más pronunciado cuando la energía de impacto disminuye. La figura 3 muestra que la mayor colaboración a las secciones eficaces totales proviene de parámetros de impacto más grandes que el radio medio de orbitación inicial del electrón, como para el caso de ionización.

En conclusión podemos decir que tanto los datos experimentales como los cálculos teóricos SE, prueban la existencia de una desviación sustractiva de la dependencia en  $Zp^2$  de las secciones eficaces totales y probabilidades de excitación a medida que disminuye la energía del proyectil, respaldando la aparición de efectos de distorsión para excitación electrónica a estados ligados del blanco.

### Referencias

- 1- Deco G. R., Fainstein P. D., y Rivarola, R. D., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19**, 213 (1986).
- 2- Bugacov, A., Maidagan, J. M., Rivarola, R. D. y Shingal, R., *Phys. Rev. A* **47**, 1052 (1993).
- 3- Basbas, G., Brandt, W. y Laubert, R., *Phys. Rev. A* **7**, 983 (1973).
- 4- Basbas, G., Brandt, W. y Laubert, R., *Phys. Rev. A* **17**, 1655 (1978).
- 5- Martin, M. H., Ford, A. L., Reading J. y Becker, R. L., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15**, 1729 (1982).
- 6- Fainstein, P. D., Ponce, V. H., y Rivarola, R. D., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **36**, 3639 (1987).
- 7- Fainstein, P. D., Ponce, V. H., y Rivarola, R. D., *Phys. Rev. A* **45**, 6417 (1992).
- 8- Olson, R. E. y Salop, A., *Phys. Rev. A* **14**, 579 (1976).
- 9- Grozdanov, T. P. y Janev, R. K., *Phys. Rev. A* **17**, 880 (1978).
- 10- Detleffsen, D., Anton, M., Werner, A. and Schartner, K-H., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **27**, 4195 (1994).

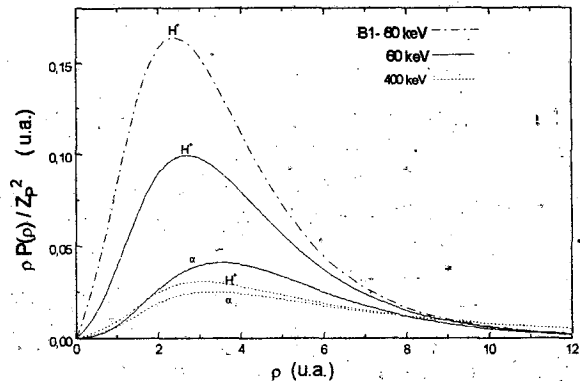


Figura 3: Probabilidad reducida (dividida por el cuadrado de la carga del proyectil) de excitación de  $H(1s)$  al estado  $2p$ , en función del parámetro de impacto, para proyectiles  $H^+$  y  $He^{2+}$  a energías de 60 y 400 keV/uma.