

# COMPARACIÓN ENTRE DESCRIPCIONES CLÁSICA, SEMICLÁSICA Y CUÁNTICA DE UN PROCESO DE AUTOIONIZACIÓN INDUCIDO POR COLISIÓN

I. Samengo, R. O. Barrachina\*

*Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo y Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, (8400) S. C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.*

Cuando un átomo es ionizado en la proximidad de una partícula cargada se produce un enfoque de los electrones emitidos. El efecto ha sido observado en procesos de autoionización inducida por colisión (Swenson *et al.* 1989). Existe también una descripción teórica en el marco de la teoría de onda distorsionada (Barrachina y Macek, 1989). En ella se observa que la probabilidad de emisión electrónica posee un máximo o un mínimo pronunciados en la dirección hacia adelante, dependiendo del signo de la carga del proyectil. Un análisis clásico, en términos de trayectorias, permite interpretar este comportamiento como los efectos de GLORIA y ARCO IRIS, respectivamente. En este trabajo, estudiamos las similitudes y diferencias de los tratamientos clásico y cuántico de éstos procesos. Además, a través de un análisis semiclassical interpretamos el comportamiento oscilatorio de la amplitud cuántica con el ángulo de observación, como debido a la interferencia entre dos posibles trayectorias clásicas de distintos caminos ópticos, indistinguibles en el proceso de medición.

When an atom is ionized in the presence of a charged particle the emitted electrons may be influenced by its Coulomb field. The effect has been observed in an autoionization process induced by collision (Swenson, 1989). In the frame of the Distorted Wave Approximation, a theoretical description has also been elaborated (Barrachina and Macek, 1989). There, it can be seen that the number of particles emitted in the forward direction shows a sharp enhancement or depletion, depending on the sign of the charge of the projectile. A classical analysis, in terms of trajectories, allows to associate to these maximum and minimum to the classical FORWARD GLORY and RAINBOW effects. The aim of the present work is to focus attention on the similarities and discrepancies between a quantum-mechanical and a classical description of these phenomena. Moreover, through a semiclassical model we interpret the oscillatory behaviour with the observation angle of the quantum-mechanical emission amplitude as due to the interference of two possible classical trajectories, which are indistinguishable in the measuring process.

## I. DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA

Si un átomo se encuentra en un estado autoionizante puede decaer ya sea en forma radiactiva, o emitiendo un electrón de energía muy bien definida y dejando el ion residual en su estado fundamental. Nosotros estudiaremos esta segunda posibilidad. La distribución angular de electrones emitidos tendrá la simetría característica del estado autoionizante inicial.

En este trabajo estudiaremos el caso en que la autoionización es inducida por la colisión de una partícula cargada con un átomo. En esta situación, el electrón emitido por el blanco se ve sometido a los campos coulombianos tanto del blanco que queda ionizado como del proyectil que se está alejando. Si el estado autoionizante tiene una energía tal que la velocidad del electrón emitido es mayor que la del proyectil, es de esperar que la interacción entre ambos sea importante. Esta interacción post-coli-

sional puede deflectar al electrón, de forma que la distribución angular en el infinito no tenga la misma simetría que el estado autoionizante inicial. Nuestro trabajo consistirá en analizar como se *modifica* la distribución angular, debido a la presencia del proyectil. Para ello, trataremos el problema como una *colisión* entre los electrones emitidos y el proyectil que se está alejando. Sin embargo, nuestro problema presenta facetas distintas a las de la teoría usual de colisiones por dos motivos: por un lado, como los electrones son emitidos a una distancia finita del proyectil, no se puede decir que en el estado inicial el electrón evolucione libremente. Por otro, no es cierto que lo que incide sobre el proyectil sea una onda plana: se tratará de una onda saliente desde un punto, con una simetría determinada.

En primer lugar, haremos el análisis suponiendo que la distancia  $d$  entre el blanco y el proyectil es fija, lo cual nos permitirá hacer una comparación directa entre los resultados clásicos y cuánticos. En

\* Miembro del CONICET

la sección 4 se incluirá la evolución temporal del proyectil.

## II. ANÁLISIS CLÁSICO

En un análisis clásico la descripción de la colisión electrón-proyectil se hace en términos de trayectorias. Estrictamente, deberíamos resolver el movimiento del electrón en los campos tanto del blanco como del proyectil. Sin embargo, cuando el electrón es emitido, la fuerza que el blanco ejerce inicialmente sobre él es paralela a su velocidad. En consecuencia lo frena, pero no lo deflecta. Sólo cuando el proyectil haya modificado la trayectoria del electrón podrá el blanco ejercer una fuerza que no sea paralela a la velocidad. Vemos entonces que, en lo que respecta al comportamiento angular del electrón, la influencia del blanco es a segundo orden de aproximación, y no la tendremos en cuenta.

En la Fig. 1 definimos las variables que son relevantes en nuestro problema.

Una vez despreciada la interacción electrón-blanco, debemos encontrar la trayectoria del electrón en el campo del proyectil. Este problema puede resolverse exactamente. En la Fig. 2 mostramos las trayectorias para proyectiles de carga positiva y negativa. Es importante notar que existen dos ángulos de emisión  $\alpha$  correspondientes a dos trayectorias distintas que terminan en la misma dirección  $\theta$ . A partir de las ecuaciones para las trayectorias, haciendo tender la coordenada  $r$  a  $+\infty$  se obtiene la relación entre  $\theta$  y  $\alpha$ .

Para calcular la sección eficaz, haremos uso de:

$$\sigma(\theta) = \sum \frac{d(\cos \alpha)}{d(\cos \theta)} = \sum \frac{\sin \alpha d\alpha}{\sin \theta d\theta} \quad (1)$$

Esta expresión nos da el número de partículas en cada ángulo sólido por unidad de flujo incidente. Debemos destacar que este flujo incidente no proviene del infinito -como ocurre en la teoría usual de colisiones- sino que emerge de un punto  $O$  con una dada distribución angular. La sumatoria se efectúa sobre todas las ramas posibles, en el caso de que la función  $\alpha$  vs.  $\theta$  no sea univaluada. Al efectuar estas derivadas obtenemos las secciones eficaces graficadas en línea llena en la Fig. 3. En el caso de un proyectil de carga positiva, vemos que la sección eficaz diverge a ángulo cero. Esta divergencia tiene origen en el hecho de que el denominador de la ecuación (1) diverge para  $\theta = 0$ , aún cuando no ocurra nada extraño con las trayectorias. Es un efecto

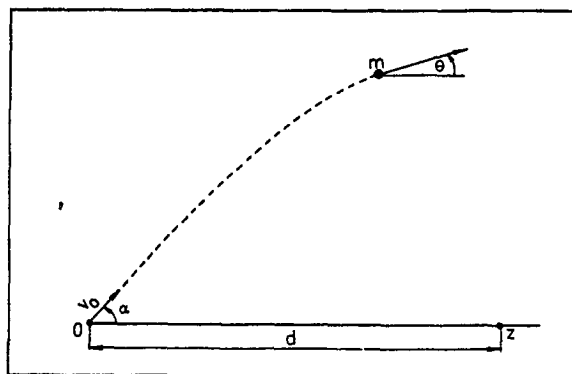


Fig. 1: Definición de las variables relevantes del problema.

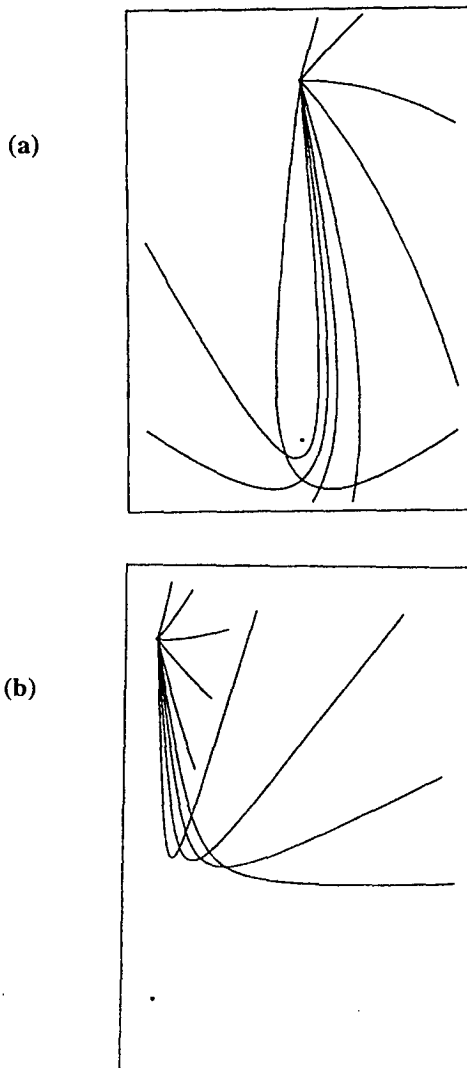


Fig. 2: Trayectorias clásicas para (a)  $Z_p > 0$ , (b)  $Z_p < 0$ . En cada caso, se muestran dos trayectorias distintas que terminan en la misma dirección de observación.

geométrico, y es conocido como *Efecto Gloria Hacia Adelante*. Para proyectiles de carga negativa, encontramos que en la dirección hacia adelante, no tenemos partículas dispersadas. De hecho, existe un ángulo mínimo a partir del cual se pueden encontrar partículas. Esto se llama *Efecto Arco Iris*, y el ángulo en cuestión, ángulo de Arco Iris. Para este ángulo la relación  $\theta$  vs.  $\alpha$  posee un mínimo, por lo tanto, la sección eficaz de la ecuación (1) diverge (I. Samengo y R. O. Barrachina, 1993).

### III. ANÁLISIS CUÁNTICO

Haremos un cálculo cuántico de la sección eficaz para el caso de distancia proyectil-blanco  $d$  fija. Esto nos permitirá una comparación directa con el caso clásico.

Según la teoría cuántica de colisiones la amplitud de transición es:

$$A(d) = \langle \psi_f(d) | V | \psi_i \rangle \quad (2)$$

donde  $\psi_i$  es el estado autoionizante inicial y  $\psi_f$  es el estado final de dispersión.

Escribimos  $\psi_f$  como un producto

$$\psi_f(r) = F(r, d) \psi^-(r)$$

donde  $\psi^-$  es la función de onda del continuo del sistema electrón-blanco, y  $F$  es una distorsión debida a la interacción coulombiana con el proyectil. Esta distorsión aportará a la distribución final de electrones aquella dependencia angular que no corresponda a la simetría del estado autoionizante inicial. Reemplazando este producto en la expresión (2) para la amplitud de emisión por autoionización, vemos que debido a la presencia de  $\psi_i$ , el integrando está fuertemente confinado alrededor de  $r=0$ . Esta observación nos permite hacer la aproximación

$$\psi_f(r) \approx F(0, d) \psi^-(r).$$

Con ella, la integral (2) puede escribirse de la forma

$$A(d) = F^*(0, d) A_0$$

donde  $A_0 = \langle \psi^- | V | \psi_i \rangle$ . Si no tenemos en cuenta el hecho de que el proyectil distorsiona el estado final del electrón ( $F=1$ ), obtenemos  $A=A_0$ . En cambio, efectuando una aproximación eikonal,  $F$  contribuirá a la amplitud con una fase. Sin embargo, esta fase

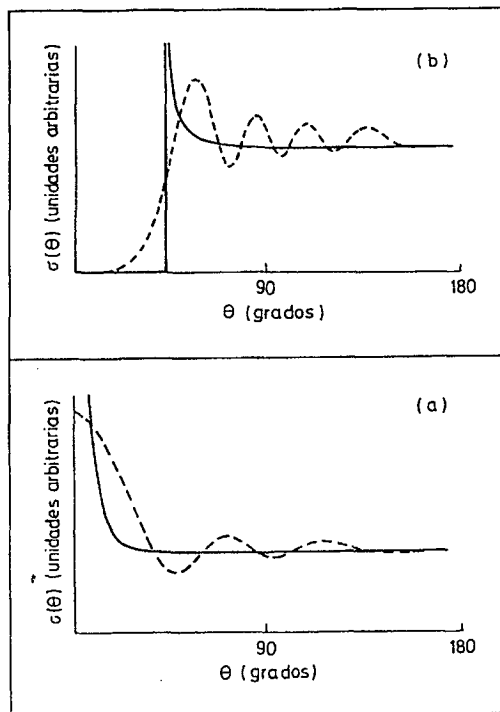


Fig. 3: Secciones eficaces (a) para un proyectil de carga positiva, y (b) para un proyectil de carga negativa. La línea llena corresponde al cálculo clásico, y la punteada al cuántico.

no modificará la probabilidad de emisión por autoionización  $|A(d)|^2$ . Por ello, es necesario contar con una mejor descripción del estado final de tres cuerpos. Con la teoría de onda distorsionada (Ches-hire, 1964; Belkic *et al.*, 1979) se encuentra una dependencia no trivial en la distancia  $d$ , la velocidad final del electrón  $v$ , la carga del proyectil  $Z_p$  y el ángulo de dispersión  $\theta$  dada por

$$F_{CDW}(0, d) = \Gamma \left( 1 + \frac{iZ_p}{v} \right) e^{\frac{\pi Z_p}{2v}} {}_1F_1 \left[ \frac{iZ_p}{v}; 1; -ivd(1 - \cos\theta) \right]$$

En la Fig. 3 mostramos, en línea punteada, la sección eficaz cuántica por unidad de flujo incidente  $\sigma(\theta) = |F(0, d)|^2$  para los casos de proyectiles de carga positiva y negativa. Allí se observa que las divergencias de Gloria y Arco Iris que aparecían en el caso clásico se manifiestan cuánticamente como máximos. Si variamos los parámetros  $Z_p$ ,  $v_0$  y  $d$ , cambiará la posición del ángulo de Arco Iris clásico. Sin embargo, el máximo que aparece en la descripción cuántica se desplazará de la misma manera. Por otro lado, vemos que en el caso cuántico aparecen oscilaciones que no se encontraban clásicamente. Estas diferencias entre ambas descripciones son análogas a la de los estudios de Airy y Young para el Arco Iris óptico. Desde un punto de vista

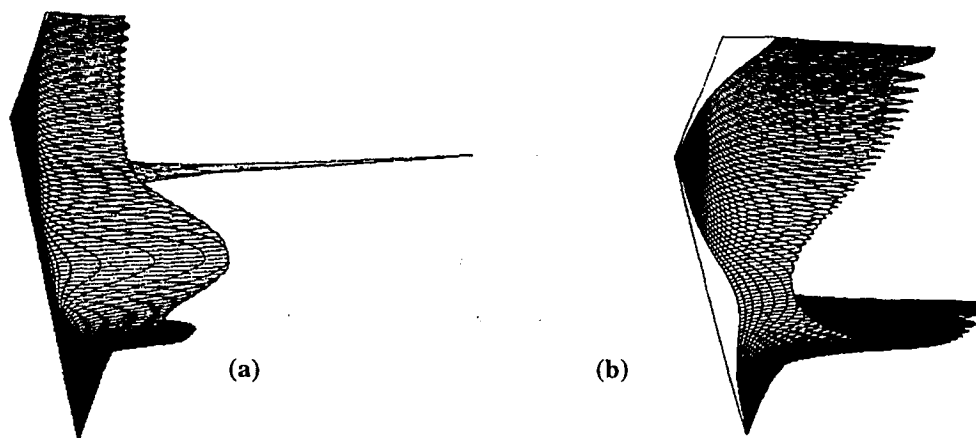


Fig. 4: Secciones eficaces doblemente diferenciales graficadas en el espacio de velocidades del electrón emitido. (a)  $Z_p > 0$ , y (b)  $Z_p < 0$ . En el caso de proyectil de carga positiva se ve el pico de captura al continuo. En ambos casos, el anillo describe el proceso de autoionización, mostrando un incremento o decremento del número de electrones emitidos hacia adelante.

semiclásico, las oscilaciones que aparecen en la sección eficaz cuántica pueden ser interpretadas como provenientes de la interferencia entre las dos trayectorias clásicas que terminan en la misma dirección (Swenson *et al.*, 1991). Cada una de ellas pasa a uno y otro lado del proyectil, con distintos caminos ópticos. Este concepto se denomina *near side-far side scattering*, y fue introducido por Fuller en 1975 en el marco de la física nuclear.

#### IV. DESCRIPCIÓN INCLUYENDO LA EVOLUCIÓN TEMPORAL

Por último, es necesario tener en cuenta el hecho de que la distancia  $d$  entre el proyectil y el blanco aumenta linealmente con el tiempo. En el marco de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo podemos escribir (Barrachina y Macek, 1991):

$$\sigma(\theta, E) = \left| \int_0^{\infty} A(\nu_p t) \exp \left[ \int_0^t \left[ E - \left( E_0 - \frac{Z_p}{\nu_p t'} + i \Gamma / 2 \right) dt' \right] dt \right]^2 \right.$$

donde  $E$  es la energía del electrón emitido,  $E_0$  es la energía del estado autoionizante, una vez tenido en cuenta el corrimiento de Fano,  $\Gamma$  es el ancho de la línea del estado autoionizante, y  $\nu_p$  es la velocidad a la cual se aleja el proyectil.

En la Fig. 4 se muestra la sección eficaz doble diferencial en el espacio de velocidades. Nuevamente encontramos oscilaciones en el ángulo y un incremento (para  $Z_p < 0$ ) o un decremento (para  $Z_p > 0$ ) del número de partículas emitidas en la dirección

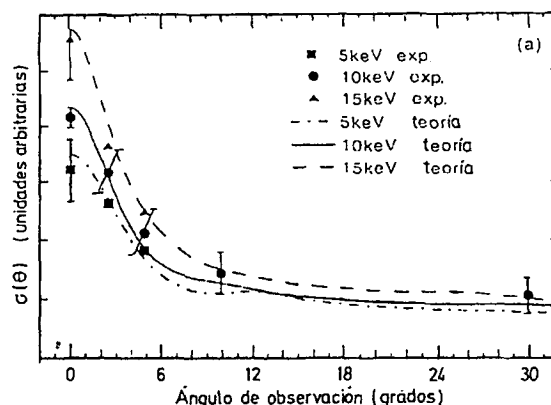


Fig. 5: Comparación entre los datos experimentales y la sección eficaz cuántica calculada teniendo en cuenta la evolución temporal.

hacia adelante. En la Fig. 5 mostramos la comparación de la sección eficaz simple diferencial  $\sigma(\theta) = \int \sigma(\theta, E) dE$  con los resultados experimentales (Cordrey and Macek, 1993).

#### REFERENCIAS

1. R.O. Barrachina y J. H. Macek. *J. Phys.* **B22**, 2151(1898).
2. Dz. Belkic, R. Gayet y A. Salin. *Pys.Rep.* **56**, 279 (1979).
3. I. M. Cheshire, *Proc. Phys. Soc.* **84**, 89(1964).
4. I. L. Cordrey y J. H. Macek, *Phys. Rev.* **A48**, 1264 (1993).
5. R. C. Fuller, *Pys. Rev.* **C12**, 1561 (1975).
6. I. Samengo y R.O. Barrachina, enviado a publicar.
7. J.K. Swenson, C. C. Havener, N. Stolerfoht, K. Sommer y F. W. Meyer. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 35 (1989).
8. J. K. Swenson, J. Burgdorfer, F. W. Meyer, C. C. Havener, D. C. Gregory y N. Stolerfoht. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 417 (1991).