

# CAPTURA ELECTRÓNICA POR DISPERSIÓN DOBLE EN LAS COLISIONES IÓN-ÁTOMO

H. F. Busnengo<sup>1</sup>, A. E. Martínez<sup>1,2</sup>, R. D. Rivarola<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Rosario (CONICET-U.N.R.), Avenida Pellegrini 250 (2000) Rosario.

<sup>2</sup> Centro Atómico Bariloche (CENEA) (8400) Bariloche.

<sup>3</sup> Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, U.N.R.

Se estudia el comportamiento de las secciones eficaces diferenciales para captura electrónica simple por impacto de protones sobre  $H(1s)$  a energías de impacto altas. Se analizan las reacciones de doble dispersión para estados finales selectivos  $nlm$  dentro de las aproximaciones Continuum Distorted Wave, Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State y Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State. Se comparan resultados teóricos con las secciones eficaces diferenciales experimentales para captura a cualquier estado final resultante. Se analiza la dependencia asintótica con la velocidad de las secciones eficaces totales para captura a estados  $nl$ .

## I. INTRODUCCIÓN

El análisis mecánico clásico<sup>1</sup> de la reacción de captura electrónica simple en las colisiones ión-átomo a energías de impacto altas muestra la necesidad de la descripción del proceso mediante una dispersión en dos pasos sucesivos. En una primera colisión elástica el proyectil impacta sobre el electrón a ser capturado desviándolo hacia el núcleo blanco (al cual se halla inicialmente ligado), como consecuencia de lo cual se produce una segunda colisión elástica entre el electrón y este núcleo. El electrón, es así desviado con un vector velocidad de intensidad y dirección similares al del proyectil, resultando entonces capturado por éste. El ángulo  $\Theta_c$  de dispersión del proyectil es determinado por la primera colisión, resultando en el sistema de laboratorio:  $\Theta_c \cong \frac{\sqrt{3}}{2M_p}$ , donde  $M_p$  es la masa del proyectil.

En un análisis mecánico cuántico, esta reacción de doble dispersión resulta entonces asociada con un cálculo de segundo orden de la serie de Born (B2) correspondiente<sup>2-5</sup>. Debido a su complejidad computacional los primeros cálculos exactos de secciones eficaces diferenciales B2 fueron realizados más de cincuenta años más tarde de la modelización clásica introducida por Thomas<sup>6-7</sup>. Miraglia *et al.*,<sup>6</sup> y Rivarola y Miraglia<sup>8</sup> estudiaron también el proceso utilizando un primer orden de la serie *Continuum Distorted wave* (CDW)<sup>9</sup> y Briggs *et al.*,<sup>10</sup> lo hicieron pero dentro de la aproximación impulso (IA). En todos los modelos y para energías suficientemente altas se observa un pico en las secciones eficaces diferenciales en la región de los ángulos  $\Theta$  de dispersión del proyectil determinada por  $\Theta_c$  ( $\Theta \cong \Theta_c$ ). Este pico fue medido experimentalmente por primera vez para el impacto de protones sobre blancos He

por Horsdal-Pedersen *et al.*,<sup>11</sup>. Mediciones posteriores de esta estructura fueron realizadas por Vogt *et al.*<sup>12</sup> para el sistema protón-blanco H atómico. En general el análisis teórico de los resultados experimentales de secciones eficaces diferenciales se ha basado en el cálculo de la captura electrónica desde capa  $\kappa$  del blanco a capa  $\kappa$  del proyectil. Dubé<sup>13</sup> ha obtenido secciones eficaces diferenciales (SED) para estados electrónicos diferentes al  $1s$ , usando distintas aproximaciones dentro de los modelos B2 e IA.

En el presente trabajo se analiza el comportamiento de la SED de captura electrónica desde un estado inicial  $1s$  a un estado final  $nlm$  para el sistema  $H^+ + H$ . A tal efecto se emplean tres diferentes aproximaciones de onda distorsionada: CDW, *Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State* (CDW-EIS)<sup>14</sup> y *Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State* (CDW-EFS)<sup>15</sup>. Como es bien conocido, en la aproximación CDW, las funciones inicial y final que describen al electrón ligado al núcleo blanco y al proyectil son distorsionadas por factores del continuo electrón-proyectil y electrón-núcleo blanco respectivamente. En la aproximación CDW-EIS (CDW-EFS) el canal inicial (final) es distorsionado reemplazando el factor del continuo electrón-proyectil (electrón-núcleo blanco) de CDW por una fase eikonal correspondiente a dicha interacción mientras que el otro canal es distorsionado como en CDW.

Dado que la energía de colisión para la que se centra el trabajo es suficientemente alta (5 MeV/amu en el sistema de laboratorio), se utiliza la aproximación de parámetro de impacto para la descripción del movimiento relativo de las partículas pesadas que constituyen el sistema (proyectil y núcleo blanco), al mismo tiempo que se desprecian los efectos ocasionados por la repulsión electrostática entre

ambos núcleos. Como es bien sabido, esta interacción se refleja en la aparición de una fase  $\rho^{2iZ_T Z_P / v}$  en las amplitudes de transición; donde  $\rho$  es el parámetro de impacto,  $Z_T$  ( $Z_P$ ) es la carga del núcleo blanco (proyectil) y  $v$  es la velocidad de la colisión.

## II. RESULTADOS Y DISCUSIONES

En las Figs. 1a, b, c, d se presentan los cálculos de las SED correspondientes al proceso:

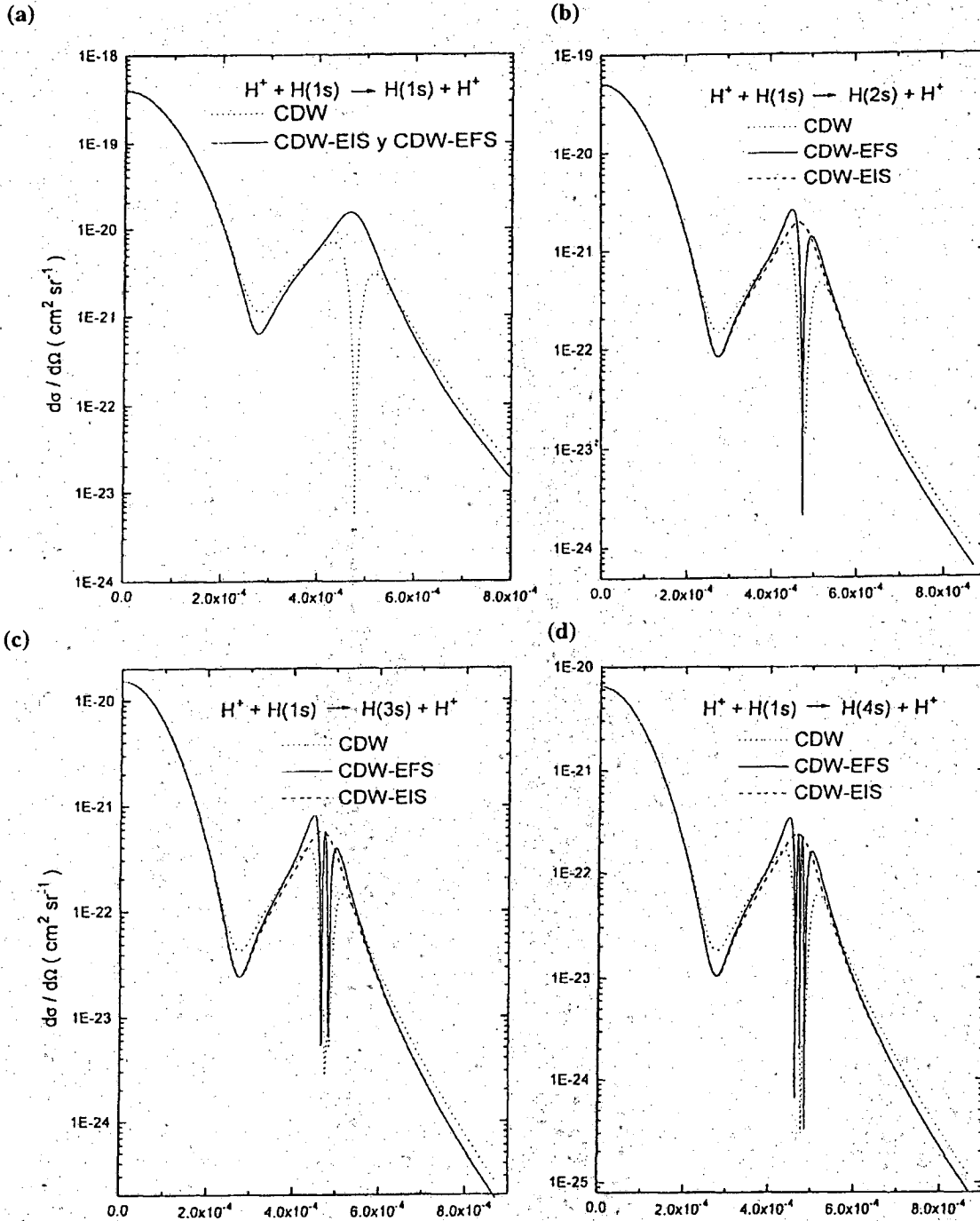
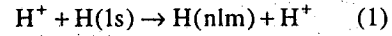


Fig. 1: a), b), c), d). Secciones eficaces diferenciales de captura electrónica a estados  $H$  ( $ns$ ) con  $n=1, 2, 3, 4$  respectivamente para impacto de protones sobre blancos atómicos de hidrógeno en estado  $1s$ . Resultados:-----CDW-EIS; —CDW-EFS; .....CDW.

con  $n = 1, 2, 3, 4$  respectivamente y  $l, m = 0, 0$ .

En todos los casos puede observarse que las tres aproximaciones CDW, CDW-EIS y CDW-EFS se encuentran, en general, en muy buen acuerdo excepto en la zona del pico de Thomas de doble dispersión, donde tanto CDW como CDW-EFS pre-

sentan estructuras adicionales. En la aproximación CDW aparece un valle profundo para el caso del proceso  $1s \rightarrow 1s$  el cual ha sido detalladamente estudiado por Rivarola y Miraglia<sup>8,16</sup>. En el modelo CDW-EFS se observa una estructura compuesta de valles superpuestos al pico de Thomas. El número de ellos coincide con el número de nodos de la parte

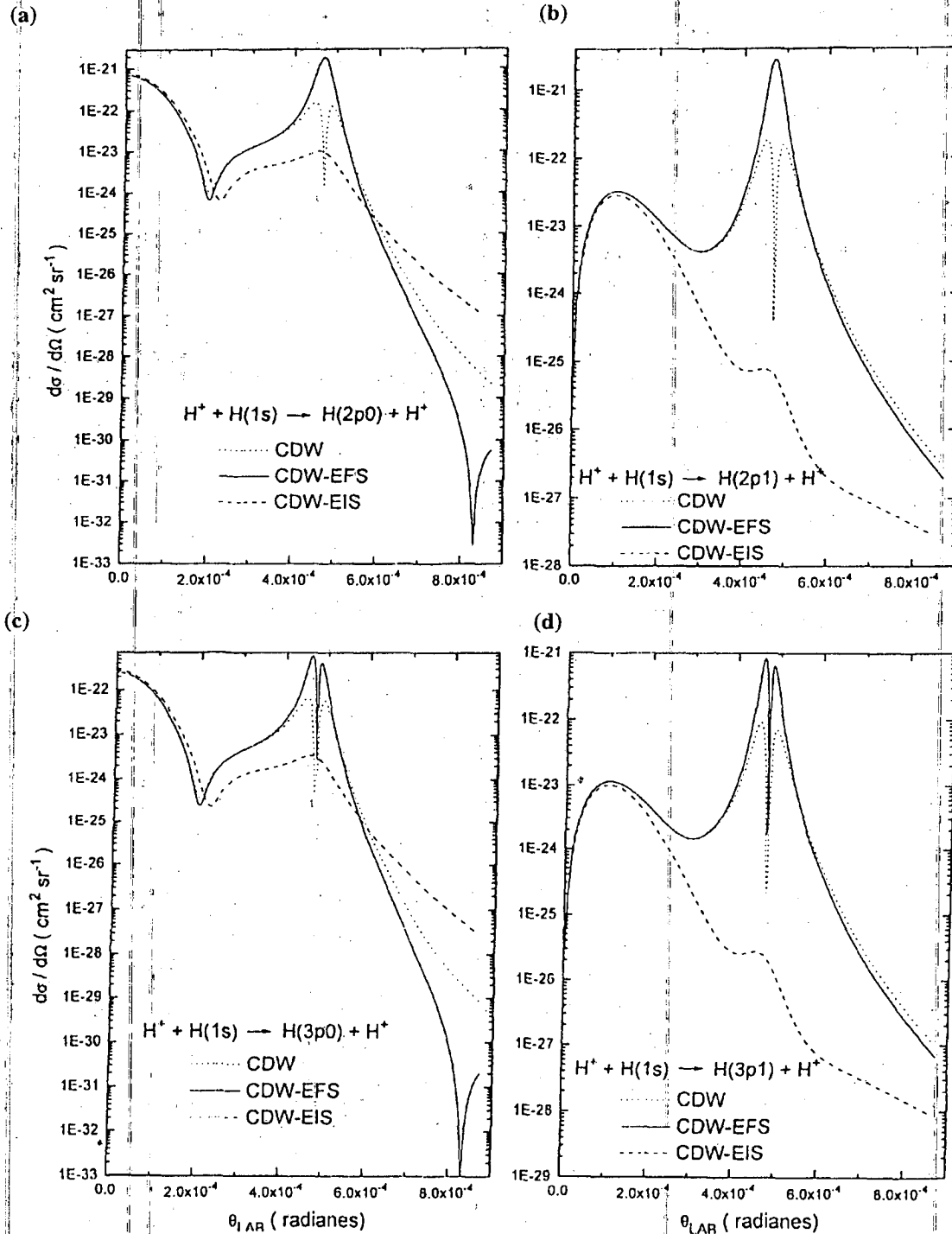


Fig. 2: a), b), c), d). Idem Fig. 1 para captura a estados  $H(npm)$  con  $n = 2, m = 0, 1; n = 3, m = 0, 1$  respectivamente.

radial de la función de onda que describe el estado ligado final  $ns$ . Por el contrario, para la aproximación CDW aparecen más estructuras en la zona de Thomas para  $n \neq 1$  respecto del caso  $n = 1$ , las cuales no muestran ninguna regularidad aparente.

Para el estado final  $1s$  mostrado en la parte *a*, de la Fig. 1 no existe discrepancia alguna entre los modelos CDW-EIS y CDW-EFS debido a que el proceso descrito es simétrico.

Por último cabe remarcar que el cerrado acuerdo que en general muestran las tres aproximaciones estudiadas (hechas las salvedades correspondientes) para la captura a estados finales  $s$  justifican los comportamientos similares encontrados en los cálculos de las secciones eficaces totales (SET) para estas reacciones<sup>15</sup> a energías de colisión suficientemente altas.

Un estudio detallado de la dependencia asintótica de la SET con la velocidad de impacto, nos permite determinar que:

$$\sigma_{(1s \rightarrow ns)}^{CDW} = \sigma_{(1s \rightarrow ns)}^{CDW-EIS} = \sigma_{(1s \rightarrow ns)}^{CDW-EFS} = v^{-11}$$

lo cual ya había sido estudiado detalladamente para CDW por Crothers<sup>17</sup>.

En las Figs. 2*a-2d* se muestran los resultados de SED para estados finales  $2p0$ ,  $2p1$ ,  $3p0$ ,  $3p1$  respectivamente, correspondientes al sistema (1).

Para ángulos de dispersión suficientemente

pequeños las aproximaciones CDW, CDW-EIS y CDW-EFS presentan un buen acuerdo. Sin embargo, para ángulos en la región del pico de Thomas, CDW y CDW-EFS sobreestiman de manera importante las SED calculadas dentro de la aproximación CDW-EIS. Nuevamente, CDW y CDW-EFS presentan valles en la zona del pico de Thomas y el

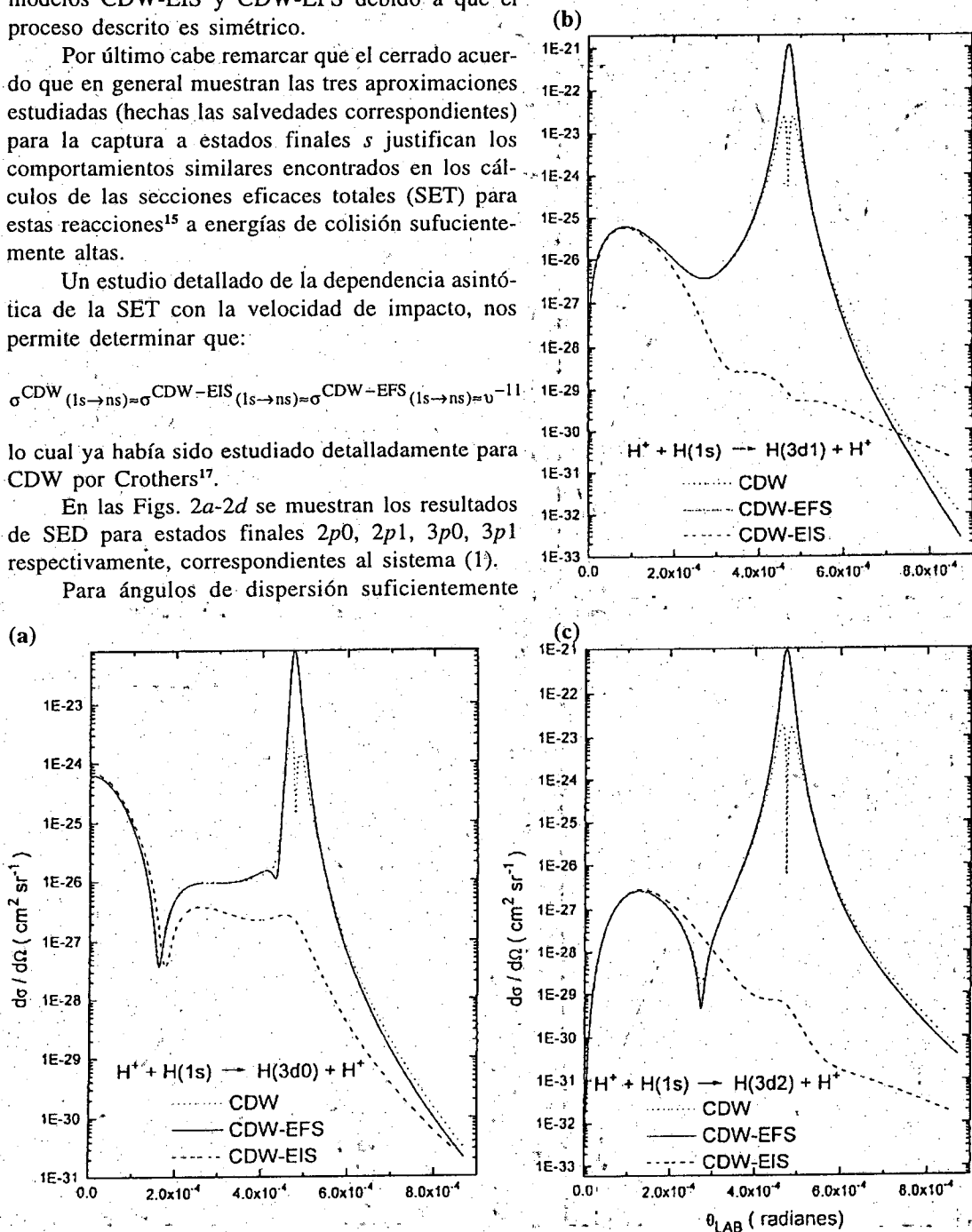


Fig. 3: *a*), *b*), *c*). Idem Fig. 1 para captura a estados  $H(3dm)$  con  $m=0, 1, 2$ , respectivamente.

número de ellos en la aproximación CDW-EFS coincide nuevamente con el número de nodos de la función radial del estado ligado final.

La aproximación CDW-EIS muestra para todos los casos analizados, una estructura tenue de doble dispersión. Debemos también notar que, dentro de las aproximaciones CDW y CDW-EFS y en contraste con los estados finales  $ns$ , el pico de Thomas juega un rol importante en la determinación de las SET para captura a estados  $np$  a la energía de colisión considerada. Este efecto es aún más marcado para los estados con  $m=1$ . Para estados con  $m=0$  la aproximación CDW-EFS presenta también un valle pronunciado para ángulos mayores a los correspondientes a la zona de Thomas.

Por su parte, en las Figs. 3a-3c donde se estudia el proceso (1) para los casos  $n=3$ ,  $l=2$  y  $m=0,1,2$  respectivamente, las discrepancias entre CDW y CDW-EFS respecto de CDW-EIS son aún más importantes cuando  $m \neq 0$ . Nuevamente los modelos CDW y CDW-EFS poseen comportamientos cualitativamente similares excepto en la zona de Thomas. Sin embargo, ésta es la región que proporciona la mayor contribución al cálculo de las correspondientes SET para ambos modelos y así es como las tres aproximaciones discrepan marcadamente aún para altas energías de colisión<sup>15</sup>. Como en el estado de casos finales  $np$ , la aproximación CDW-EIS presenta una estructura de Thomas pequeña.

Por último, vale remarcar que en estos casos la

aproximación CDW-EFS no presenta estructura de valles así como tampoco tienen nodos las correspondientes partes radiales de las funciones de onda que representan los distintos estados ligados finales.

Un análisis del comportamiento asintótico de las SET para los estados  $np$  y  $nd$  permite determinar una dependencia con la velocidad de impacto de la

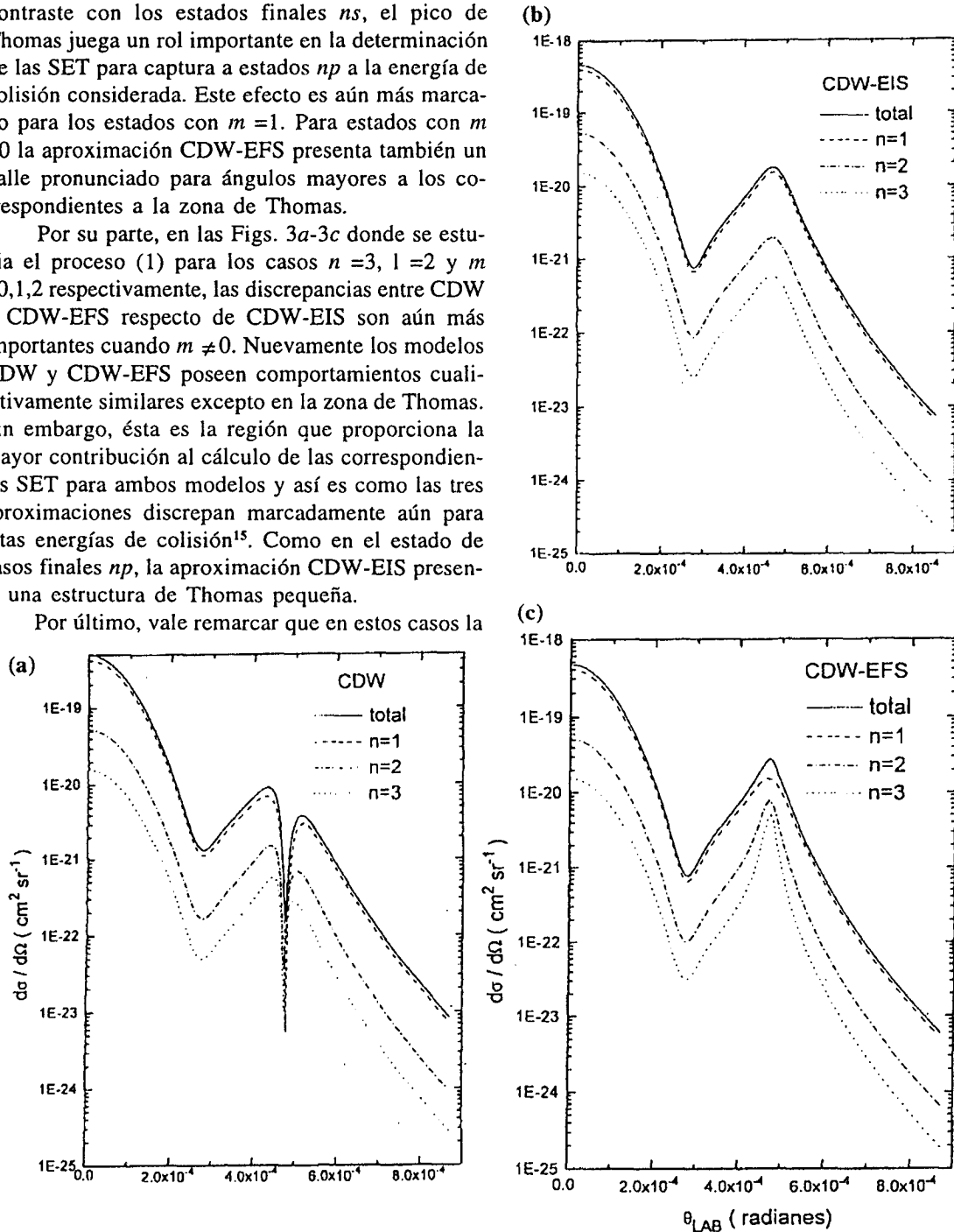


Fig. 4: a), b), c). Secciones eficaces diferenciales de captura electrónica para el sistema  $H^+ + H(1s)$  calculadas CDW, CDW-EIS y CDW-EFS respectivamente: ----- estado final  $n=1$ , ..... estado final  $n=2$ , ..... estado final  $n=3$ , — suma de estados finales  $n=1, 2, 3$ .

forma:

$$\sigma^{\text{CDW}}(1s \rightarrow nl) \approx \sigma^{\text{CDW-EFS}}(1s \rightarrow nl) \approx$$

$$\sigma^{\text{CDW}}(1s \rightarrow nl) \approx \sigma^{\text{CDW-EIS}}(1s \rightarrow nl) \approx$$

$$\approx v^{-11} \gamma \sigma^{\text{CDW-EIS}}(1s \rightarrow nl) \approx v^{-11-21}$$

El comportamiento de altas velocidades obtenido dentro de la aproximación CDW-EIS es similar (igual exponente de  $v$ ) al de la correspondiente versión de la aproximación *peaking* impulso (PIA)<sup>18</sup>.

En las Figs. 4a-4c se presenta la colaboración a la SED de la captura a estados ligados finales con  $n = 1, 2, 3$  (sumados sobre los correspondientes números cuánticos  $l$  y  $m$ ) calculadas dentro de las aproximaciones CDW, CDW-EIS y CDW-EFS respectivamente. Debemos notar que la aproximación CDW presenta un marcado valle superpuesto al pico de Thomas para los estados  $m = 2$  y  $n = 3$  como ocurría para el estado  $n = 1$ <sup>8</sup>.

Finalmente en la Fig. 5, las SED teóricas correspondientes a sumar las colaboraciones a estados finales  $n = 1, 2, 3$  en los tres modelos analizados se comparan con resultados experimentales<sup>12</sup>. Las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS parecen presentar un mejor acuerdo con los experimentos, si bien para un mejor contraste teorías-mediciones sería necesario realizar una convolución de las curvas teóricas sobre la resolución angular experimental.

En conclusión, hemos estudiado el comportamiento de las secciones eficaces diferenciales de captura electrónica simple a estados selectivos  $nlm$ , para el sistema  $H^+ + H(1s)$ , lo cual permite un estudio detallado del proceso de captura en dos pasos de Thomas. Se comparan secciones eficaces diferenciales teóricas y experimentales observándose una adecuada representación de las mediciones. Se determinó también, la dependencia asintótica con la velocidad de las secciones eficaces totales a estados finales  $nl$  dentro de las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS.

## REFERENCIAS

1. L. H. Thomas, Proc. R. Soc. A **114**, 561 (1927).
2. R. M. Drisko, Thesis Carnegie Institute of Technology (no publicada), (1955).
3. K. Dettmann y G. Leibfried, Z. Phys. **210**, 43 (1968).

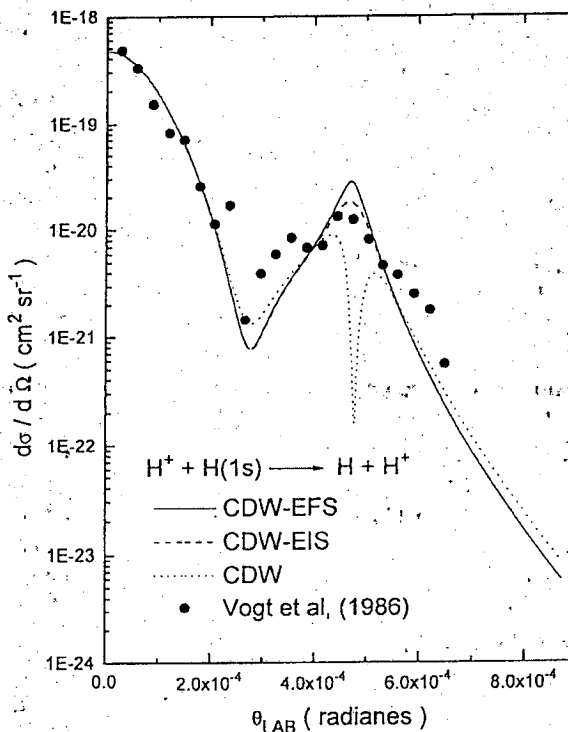


Fig. 5: Secciones eficaces diferenciales de captura electrónica para el sistema  $H^+ + H(1s)$ . Resultados teóricos sumando la contribución de captura hasta estados con  $n = 3$ : --- CDW-EIS; — CDW-EFS; ..... CDW. Experimento para captura a todos los estados finales del proyectil: •<sup>12</sup>.

4. K. Dettmann y G. Leibfried, Z. Phys. **218**, (1969).
5. R. Shakeshaft y L. Spruch, Rev. Mod. Phys. **51**, 369 (1979).
6. J. E. Miraglia, R. D. Piacentini, R. D. Rivarola y A. Salin, J. Phys. **B14**, 1198 (1981).
7. SP. R. Simony y J. H. McGuire, J. Phys. **B14**, L737 (1981).
8. R. D. Rivarola y J. E. Miraglia, J. Phys. **B15**, 222 (1982).
9. I. M. Cheshire, Proc. Phys Soc. **84**, 89 (1964).
10. J. S. Briggs, P. T. Greenland y L. K. Kocbach, J. Phys. **B15**, 3085 (1982).
11. E. Horsdal-Pedersen, C. L. Cocke, J. L. Rausmunssen, S. L. Varghese y W. Waggoner, J. Phys. **B16**, 1799 (1983).
12. H. Vogt, R. Schuch, E. Justiniano, M. Schulz y W. Schwab, Phys. Rev. Lett. **57**, 2256 (1986).
13. L. J. Dubé, *Electronic and Atomic Collisions* (Editores: D. C. Lorents, W. E. Meyerhof y J. R. Peterson, Elsevier Science Publishers B. V.) (1986) 345.
14. A. E. Martínez y R. D. Rivarola, J. Phys. **B23**, 4165 (1990).
15. H. F. Busnengo, A. E. Martínez y R. D. Rivarola, ANALES AFA vol. IV (1992).
16. R. D. Rivarola, Phys. Rev. **A30**, 1122 (1984).
17. D. S. F. Crothers, J. Phys. **B18**, 2879 (1985).
18. L. J. Dubé, J. Phys. **B16**, 1783 (1983).