

IONIZACION DE ATOMOS DE HIDROGENO POR IMPACTO DE IONES DESNUDOS

Gustavo H. Olivera, Roberto D. Rivarola,
*Instituto de Física Rosario (CONICET-Universidad Nacional de Rosario),
Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario*

Pablo D. Fainstein y Víctor H. Ponce,
*División Colisiones Atómicas, Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica,
CC-439, 8400 San Carlos de Bariloche.*

Utilizando la aproximación continuum-distorted-wave—eikonal-initial-state se calculan secciones eficaces totales para ionización, de átomos de hidrógeno en estado inicial de número cuántico principal $n = 1-5$. Se estudia su dependencia con la energía y la carga del proyectil, y con el número cuántico principal; los resultados son comparados con las predicciones obtenidas con una primera aproximación de Born.

I. INTRODUCCION

El proceso de ionización de átomos de hidrógeno por impacto de iones pesados ha sido estudiado desde hace mucho tiempo en base a desarrollos perturbativos como la serie de Born. En los últimos años ha resurgido su interés debido a requerimientos básicos y aplicados. El desarrollo de grandes aceleradores y nuevas fuentes de iones múltiplemente cargados a altas energías ha permitido la realización de mediciones de secciones eficaces que muestran discrepancias¹ con las predicciones obtenidas con un primer orden de la serie de Born (B1) de excitación al continuo coulombiano del blanco.

Una de sus aplicaciones más importantes es la irradiación de materia biológica por impacto de iones pesados muy energéticos en tratamientos médicos. La emisión de electrones secundarios es el mecanismo más importante en la deposición de energía de tejido orgánico. Otra posible aplicación está relacionada con el diseño de los reactores de Fusión controlada. En éstos, el plasma confinado contiene impurezas originadas por la interacción del plasma con las paredes del reactor. Estas impurezas degradan los haces neutros de hidrógeno que se utilizan para calentar el plasma. Por otra parte, los haces neutros contienen átomos de hidrógeno en estados excitados, que aunque se encuentran en pequeñas porciones tienen una probabilidad de ionización mucho mayor que la del átomo de hidrógeno en el estado fundamental.

En el presente trabajo se utiliza el modelo continuum-distorted-wave—eikonal-initial-state (CDW-EIS) extendiendo el cálculo de secciones eficaces totales de ionización (SET) previamente presentadas para estados de número cuántico principal¹ $n = 1, 2$, a los

estados de número cuántico principal $n = 3$ y 5 , de hidrógeno atómico colisionando con iones desnudos. Se estudia la dependencia de las SET con la energía y la carga del proyectil, y con el número cuántico principal n .

II. RESULTADOS Y DISCUSIONES

En la Fig. 1 se presentan las SET en función de la energía de impacto para $H^+ + H(n = 1-3)$ calculadas en las aproximaciones CDW-EIS y B1. Se muestran también las SET para la colisión $e^- + H(n = 1-3)$ calculadas² dentro de la aproximación B1, para energías de H^+ y e^- correspondientes a velocidades iguales.

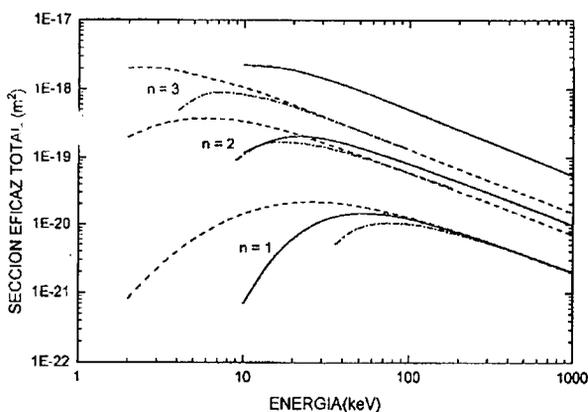


Fig. 1: Secciones eficaces totales de ionización de los estados $n = 1, 2$ y 3 en función de la energía. Línea continua: CDW-EIS, línea de trazos: B1 para protones, línea de trazos y puntos: B1 para electrones.

Para el estado fundamental se puede observar que a energías intermedias los valores correspondientes a

impacto de protones o electrones, dentro de la aproximación B1, son mayores o menores, respectivamente, que los del cálculo CDW-EIS para protones. Las tres curvas tienden al mismo valor asintótico para velocidades de colisión altas. Se debe notar que los resultados CDW-EIS dan una muy buena representación de los resultados experimentales en todo el rango energético¹.

Las SET para $n = 2$ son mayores que para $n = 1$ debido a la menor energía de ligadura del electrón. Las Set correspondientes a la aproximación CDW-EIS resultan mayores que la B1 de protones, excepto para energías menores a 20 keV. Esta diferencia es notable aún a energías de colisión muy altas.

La inclusión en CDW-EIS de órdenes superiores a B1, debido a la distorsión introducida en los canales inicial y final, indicaría que la aproximación B1 no sería válida aún a altas velocidades. Debemos notar también que el máximo de las SET para $n = 2$ se presenta a menores energías de impacto que para ionización desde el estado fundamental.

Para $n = 3$, la aproximación CDW-EIS sobrestima los resultados B1 de SET, al menos para las energías de colisión aquí consideradas para el cálculo CDW-EIS. Debemos observar que como sucedía para el caso $n = 1$, las SET para $n = 2$ y 3 correspondientes a electrones y protones convergen asintóticamente en altas velocidades de impacto dentro de la aproximación B1. La diferencia entre los resultados obtenidos con modelos CDW-EIS y B1 a altas energías de colisión se incrementa cuando n crece.

Para estudiar la dependencia de la SET con la carga del proyectil y el número cuántico principal del estado ligado inicial, en las Figs. 2, 3 y 4 se ha graficado el cociente entre la SET correspondientes a impacto de un ión de carga Z_p y un protón con la misma velocidad, en función de la carga del proyectil. Las Figs. 2-4 corresponden a energías de 50 KeV amu^{-1} , 300 KeV amu^{-1} y 1 MeV amu^{-1} , respectivamente. La aproximación B1 predice que este cociente tiene una dependencia Z_p^2 independiente del número cuántico principal del estado inicial y la energía de impacto.

Los resultados CDW-EIS muestran desviaciones respecto a este comportamiento. Las desviaciones observadas para un n fijo crecen cuando la energía de impacto disminuye. Esto es consistente con la condición de validez de B1 $Z_p/v \ll 1$ para $n = 1$ donde v es la velocidad de impacto. Vemos que CDW-EIS depende del estado inicial y que las diferencias con B1 decrecen cuando aumenta el número cuántico principal. El efecto más notable es que para una energía fija los cocientes de SET dentro de la aproximación CDW-

EIS crecen monótonamente a la curva dada por la ley Z_p^2 , a medida que crecen.³ El acercamiento es más rápido a medida que la velocidad de impacto crece. Observamos que a pesar que las SET calculadas en B1 y CDW-EIS difieren en valor absoluto, el comportamiento Z_p^2 resulta válido en CDW-EIS para números cuánticos n suficientemente grandes.

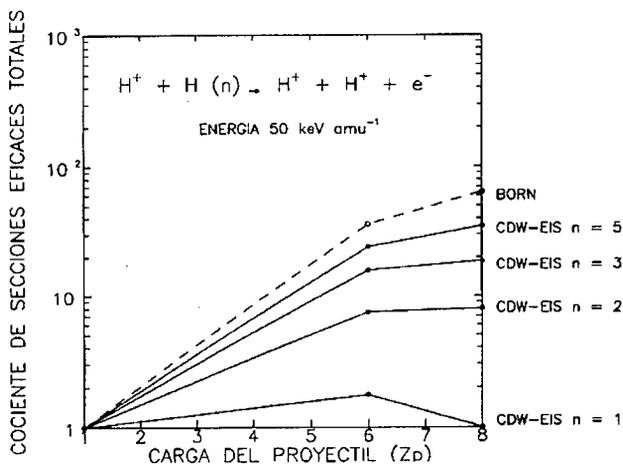


Fig. 2: Cociente entre la sección eficaz total de ionización de hidrógeno por impacto de iones de carga Z_p con energía 50 keV amu^{-1} respecto de las secciones eficaces totales de ionización por impacto de protones a la misma velocidad en función de Z_p . \bullet : CDW-EIS, \circ : B1.

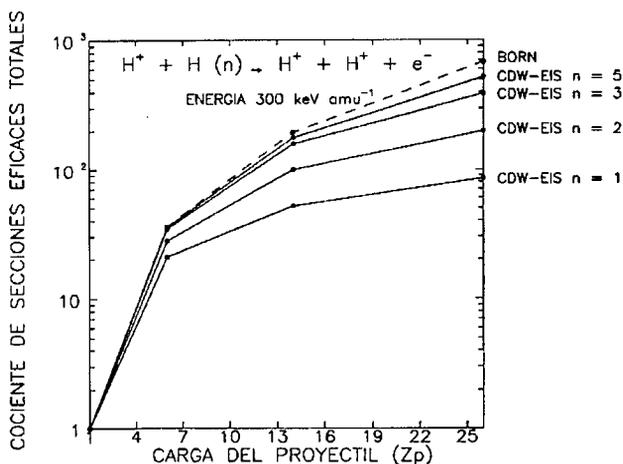


Fig. 3: Idem Fig. 2 para 300 keV amu^{-1}

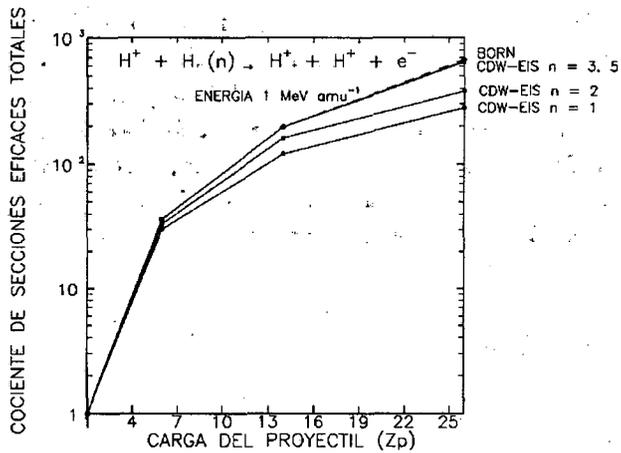


Fig. 4: Idem Fig. 2 para 1 MeV amu⁻¹

III. CONCLUSIONES

Se analiza la ionización electrónica de hidrógeno en estados de número cuántico principal $n = 1-5$, por

impacto de iones desnudos múltiplemente cargados.

Se calculan SET utilizando las aproximaciones CDW-EIS y B1.

Se observan diferencias entre las predicciones CDW-EIS y B1 para SET para $n \neq 1$, aún a energías de impacto muy altas, donde usualmente la aproximación B1 es supuesta válida.

Se demuestra que las SET para CDW-EIS escalan según una ley Zp^2 cuando n crece suficientemente.

REFERENCIAS

1. P.D. Fainstein, V.H. Ponce y R.D. Rivarola, J. Phys. B: Atom. Molec. Opt. Phys. **24**, 3091 (1991).
2. K. Omidvar, Phys. Rev. **140** 1A, A26 (1965).
3. P.D. Fainstein, V.H. Ponce y R.D. Rivarola, J. Phys. B: Atom. Molec. Opt. Phys. **23**, 1481 (1990).