

IMPACTO DE PARTICULAS ALFA SOBRE HIDROGENO MOLECULAR

S.E. Corchs, R.D. Rivarola

Instituto de Física Rosario, (CONICET - Universidad Nacional de Rosario),
Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario

J.H. McGuire Y.D. Wang

Department of Physics, Tulane University, USA

Se estudia la captura electrónica simple por impacto iones desnudos sobre blancos moleculares a energías de impacto altas utilizando una aproximación a dos centros efectivos. Se calculan secciones eficaces simple diferenciales (en función del ángulo formado por el eje molecular y el vector velocidad inicial de impacto) y secciones eficaces totales para el proceso $He^{2+}+H_2$. Se analizan los patrones de interferencia para captura al estado nl ($n=1,2; l=0,1$) del He^+ . A los efectos de estudiar la dependencia de estas reacciones con la carga del proyectil, los resultados obtenidos se comparan con los correspondientes a la colisión $H^+ + H_2$.

I. INTRODUCCION

Mediciones recientes, realizadas por Cheng y colaboradores¹, de captura electrónica simple por impacto de iones O^{8+} sobre blancos de hidrógeno molecular en coincidencia con la determinación de la orientación del eje molecular motivan el estudio de procesos de captura electrónica en colisiones ion-molécula. Siguiendo el trabajo de Tuan y Gerjuoy², este tipo de reacciones ha sido estudiado teóricamente por diferentes autores^{3,5}. Wang y McGuire⁵, trabajando en una aproximación a dos centros efectivos y utilizando un modelo Oppenheimer-Brinkman-Kramers (OBK) reprodujeron los patrones de interferencia experimentales, aunque sus valores teóricos difieren en un orden de magnitud de los correspondientes datos experimentales.

En el presente trabajo utilizamos una aproximación a dos centros efectivos (cada centro asociado a cada uno de los núcleos de la molécula) y empleamos la primera aproximación de Born con correctas condiciones de contorno (B1)⁶, en el lugar del modelo OBK, para describir las colisiones con blancos moleculares. Es decir, extendemos el modelo B1, previamente utilizado para blancos atómicos, al caso de blancos moleculares. En particular calculamos secciones eficaces simple diferenciales (en función de la orientación del eje molecular) para captura al estado nl del proyectil en colisiones $He^{2+}+H_2$, siendo éstos los primeros cálculos existentes para captura a estados excitados del proyectil desde un blanco de hidrógeno

molecular. Se evalúan además, secciones eficaces totales para dicho sistema.

II. TEORIA

Consideremos la captura electrónica simple por impacto de un ion desnudo con carga Z_p sobre un blanco molecular dielectrónico. Siguiendo el trabajo de Wang y colaboradores³ describimos el blanco molecular como un sistema de dos centros efectivos, cada uno de ellos asociado a cada uno de los núcleos de la molécula. Supondremos que el vector internuclear ρ de la molécula permanece constante durante el proceso de colisión dado que trabajamos a altas velocidades de impacto. Recientemente Corchs y colaboradores⁷ demostraron que, dentro de la formulación de parámetro de impacto, las interacciones entre el proyectil y los núcleos del blanco molecular pueden ser excluidas del tratamiento.

Representemos la función de onda inicial no distorsionada en el estado fundamental como combinación lineal de productos de orbitales electrónicos de un centro

$$\Phi_i = N_M [\varphi_i^1(1)\varphi_i^2(2) + \varphi_i^1(2)\varphi_i^2(1)] \exp[i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R}_i] \quad (1)$$

donde $\varphi_i^j(1)$ y $\varphi_i^j(2)$ (con $j=1,2$) son los orbitales iniciales correspondientes a los electrones 1 y 2 en el centro efectivo j y N_M es el factor de normalización molecular. Además \mathbf{K}_i es el momento inicial total (en el sistema de laboratorio) y \mathbf{R}_i el vector posición inicial

del proyectil respecto al centro de masa del blanco.

Suponemos que el electrón 1 es capturado y solamente introducimos distorsiones correspondientes a dicho electrón. Luego, la función de onda distorsionada inicial se elige como

$$\epsilon_i = N_M [\varphi'_i(1)\varphi_i^2(2)L_i^2 + \varphi'_i(2)\varphi_i^2(1)L_i^2] \exp[i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R}_i] \quad (2)$$

donde L_i^j es el factor de distorsión inicial asociado al centro j .

Si φ_f denota la función de onda estacionaria no perturbada del electrón ligado al proyectil, escribimos la función de onda distorsionada final

$$\epsilon_f^\pm = \varphi_f N_i^\pm [\tau_1(2) \pm \tau_2(2)] \exp[i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{R}_f] L_f^1 L_f^2 \quad (3)$$

En ec. (3) $N_i^\pm [\tau_1(2) \pm \tau_2(2)]$ representa el estado molecular final del electrón 2, con $\tau_j(2)$ el orbital correspondiente al electrón 2 y centro j . Los signos + y - corresponden a los estados *gerade* y *ungerade* del ion molecular residual y N_i^\pm es el correspondiente factor de normalización. Además, \mathbf{K}_f es el momento final total, \mathbf{R}_f el vector posición final del proyectil respecto al centro de masa del blanco y L_f^j representa el factor de distorsión final correspondiente al electrón 1 y centro j .

La amplitud de transición $T_{if}^{M,\pm}$ dentro del presente formalismo de onda distorsionada está dada por

$$T_{if}^{M,\pm} = \langle \epsilon_f^\pm | H - E | \epsilon_i \rangle \quad (4)$$

donde H y E representan el Hamiltoniano y energía total del sistema.

A fin de obtener una aproximación a dos centros efectivos como la obtenida por Wang y colaboradores³ despreciaremos, en el cálculo de $T_{if}^{M,\pm}$, aquellos términos que contengan la influencia de un centro molecular sobre otro y asumiremos⁸ que el electrón 2 no influencia el proceso de captura del electrón 1. Luego,

$$T_{if}^{M,\pm} \equiv N_i^\pm N_M \sum_{j=1}^2 N_{iM}^{j,\pm}$$

$$\langle \varphi_f \exp[i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{R}_f] L_f^j | W_i^j | \varphi'_i(1) \exp[i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R}_i] L_i^j \rangle$$

donde W_i^j es la perturbación correspondiente al factor

de distorsión utilizado y $N_{iM}^{j,\pm}$ la constante de solapamiento entre los estados inicial y final del electrón 2.

Wang y colaboradores³ trabajaron en la aproximación Oppenheimer-Brinkman-Kramers(OBK); es decir eligieron

$$L_i^j = L_f^j = 1 \quad W_i^j = -\frac{Z_P}{s} \quad (6)$$

donde s es la coordenada del electrón 1 respecto al proyectil.

Si queremos considerar correctamente el largo alcance de los potenciales Coulombianos presentes en la reacción, debemos elegir en la formulación los factores de distorsión asociados al primer orden de la serie de Born con correctas condiciones de contorno (B1)⁶

$$L_i^j = (R_j) = \exp\left[-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{z_j} dz_j \frac{Z_P}{R_j}\right] \quad (7)$$

$$L_f^j = (R_j) = \exp\left[-\frac{i}{v} \int_{z_j}^{\infty} dz_j \frac{Z_j}{R_j}\right] \quad (8)$$

$$W_i^j = -\frac{Z_P}{s} + \frac{Z_P}{R_j} \quad (9)$$

donde \mathbf{R}_j es el vector posición del proyectil respecto al centro j ; Z_j es la carga nuclear de dicho centro y Z_j la componente de \mathbf{R}_j en la dirección dada por la velocidad inicial de impacto v .

La sección eficaz doble diferencial en función de la orientación del eje molecular, dada por el ángulo sólido Ω_φ , se calcula como

$$\frac{d\sigma_M^\pm}{d\Omega_\varphi d\Omega} = \frac{M_P(M_P+1)}{4\pi^2} \frac{K_f}{K_i} |T_{if}^{M,\pm}|^2 \quad (10)$$

con Ω el ángulo sólido subtendido por el proyectil en cada final y M_P la masa del proyectil. La sección eficaz diferencial $d\sigma_M^\pm / d\Omega_\varphi$ se obtiene integrando la expresión (10) en el ángulo sólido Ω .

III. RESULTADOS

En el presente trabajo se calculan secciones eficaces

ces simple diferenciales $d\sigma_M^\pm / d(\cos\theta_\phi)$ en función del ángulo formado por el vector molecular ϕ y la velocidad de impacto v . Se presentan resultados para el proceso de captura $He^{2+} + H_2(^1\Sigma_g^+) \rightarrow He^+(nl) + H_2^+(\sigma_g 1s)$ con $n=1,2$; $l=0,1$ a una energía de impacto de 1MeV/amu. En Fig. 1 se presentan los patrones de interferencia, típicos del scattering a dos centros, obtenidos para captura al estado nl del proyectil utilizando la aproximación B1. Se observa que la dependencia de la sección eficaz diferencial $d\sigma_M^\pm / d(\cos\theta_\phi)$ con la orientación del eje molecular es esencialmente la misma para los estados $2s$ y $2p$ mientras que para el caso de captura al estado $1s$ la dependencia obtenida es levemente diferente (notar un corrimiento de los mínimos en las curvas de captura al estado con $n=1$ respecto a los correspondientes a $n=2$)

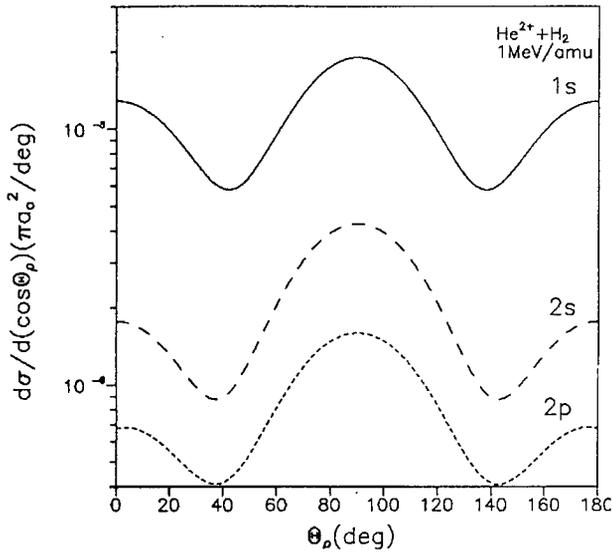


Fig. 1: Secciones eficaces simple diferenciales en función de la orientación molecular para captura al estado nl del He^+ en colisiones $He^{2+} + H_2$. Los resultados corresponden a una energía de impacto de 1 MeV/amu y fueron obtenidos utilizando el modelo B1.

A los efectos de estudiar la dependencia de estas reacciones con la carga del proyectil, los resultados obtenidos para la colisión $He^{2+} + H_2$ se comparan con los correspondientes al proceso $H^+ + H_2$ en la Fig. 2. Se incluyen también los cálculos obtenidos utilizando el modelo OBK. Se observa que $d\sigma_M^\pm / d(\cos\theta_\phi)$ resulta aproximadamente independiente de la carga del proyectil a la velocidad de impacto analizada.

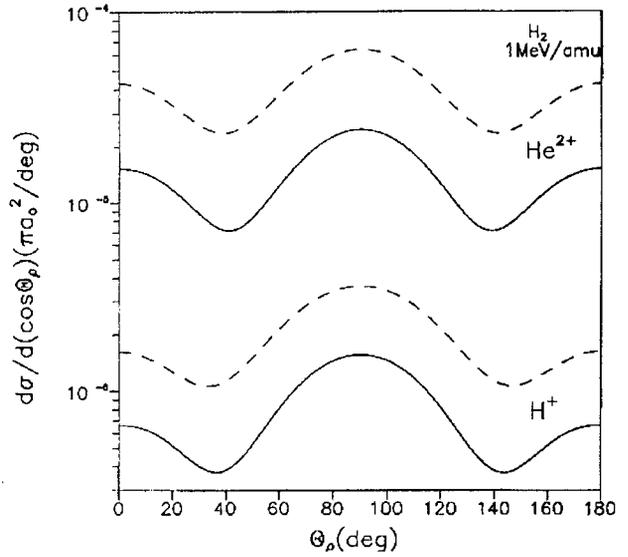


Fig. 2: Secciones eficaces simple diferenciales en función de la orientación molecular para impacto de protones y partículas alfa sobre H_2 a una energía de impacto de 1MeV/amu. Resultados teóricos: - - - OBK, — B1.

En la Fig. 3 se muestran secciones eficaces totales (obtenidas integrando la sección doble diferencial dada por la ec. (10) en Ω y promediando sobre Ω_p) para el proceso $He^{2+} + H_2$ utilizando las aproximaciones OBK y B1. Los resultados teóricos se comparan con datos experimentales⁹. El modelo B1 es el que mejor acuerdo presenta con los experimentos.

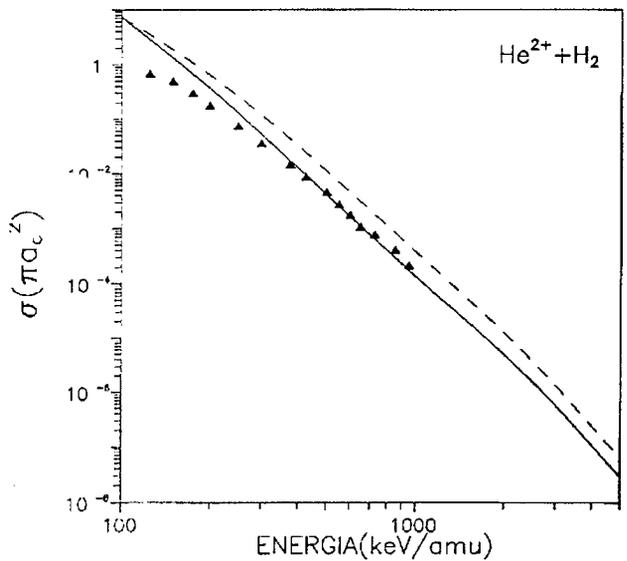


Fig. 3: Secciones eficaces totales para el sistema $He^{2+} + H_2$. Resultados teóricos: - - - OBK, — B1. Resultados experimentales \blacktriangle de la Ref. 9.

REFERENCIAS

1. S. Cheng, C.L. Cocke, V. Frohne, E.Y. Kamber y S. L. Varghese, Nucl. Instrum. Methods **B56/57**, 90 (1991).
2. T. F. Tuan y E. Gerjuoy, Phys. Rev. **117**, 756 (1960).
3. Y.D. Wang, J.H. McGuire y R.D. Rivarola, Phys. Rev. A **40**, 3673 (1989).
4. R. Shingal y C.D. Lin, Phys. Rev. A **40**, 1302 (1989).
5. Y.D. Wang y J.H. McGuire, Phys. Rev. A **44**, 367 (1991).
6. Dz Belkić, R. Gayet y A. Salin, Phys. Rep. **56**, 279 (1979).
7. S.E. Corchs, R.D. Rivarola y J.H. McGuire, enviado a publicación (1992).
8. S.E. Corchs, R.D. Rivarola y J.H. McGuire y Y.D. Wang, Phys. Rev. A **47** (1993) en prensa.
9. P. Hvelplund y E.H. Pedersen, J. Phys. B **9**, 491 (1976) y P. Hvelplund y A. Andersen, Phys. Scripta **26**, 375 (1982).