

METODOS DE ONDA DISTORSIONADA PARA CAPTURA ELECTRONICA

H.F. Busnengo, A.E. Martínez y R.D. Rivarola

Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario. Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario, Instituto de Física Rosario (CONICET, Universidad Nacional de Rosario)

Se analiza la captura electrónica simple por iones desnudos que impactan sobre blancos atómicos a energías de colisión intermedias y altas. Se desarrolla un modelo de onda distorsionada del continuo-estado final eikonal y se analiza su discrepancia con respecto a otro modelo de onda distorsionada del continuo-estado inicial eikonal. Se calculan secciones eficaces totales para los sistemas $H^+ + H(1s) \rightarrow H(nl) + H^+$ y $He^2 + H(2s) + H^+$. Se comparan los resultados con los obtenidos utilizando otros modelos de onda distorsionada y datos experimentales.

INTRODUCCION

Se estudia la captura electrónica en colisiones entre iones desnudos y átomos (iones) monoeléctricos a energías de impacto intermedias ($v \sim e$) y altas ($v \gg v_e$). Con v y v_e indicamos la velocidad de colisión y la raíz cuadrada de la velocidad cuadrática media del electrón en su estado inicial, respectivamente.

Este proceso se ha analizado previamente¹⁻³ utilizando la aproximación de onda distorsionada del continuo-estado inicial eikonal (CDW-EIS). En dicho modelo la función de onda que representa el estado ligado inicial es distorsionada con una fase eikonal multiplicativa. Esta fase describe al electrón moviéndose en el campo del proyectil dentro de una aproximación eikonal del continuo. La función de onda final se toma como un producto de la función que representa al electrón ligado al proyectil y un factor del continuo coulombiano electrón-núcleo del blanco.

La versión *post* de la amplitud de transición (dentro de la aproximación de parámetro de impacto) resulta así, en un primer orden, de la forma:

$$a_{if}^+ = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^{C,-} \left| \left(H - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^+ \right| \chi_i^{E,+} \right\rangle \quad (1)$$

donde con $\chi_i^{E,+}$ y $\chi_f^{C,-}$ se indican los estados distorsionados en los canales de entrada y salida, respectivamente y con el H el hamiltoniano electrónico del sistema. Debemos notar que las funciones $\chi_i^{E,+}$ y $\chi_f^{C,-}$ contienen el posible comportamiento asintótico de largo rango debido a las interacciones coulombianas entre los agregados de la colisión en los canales inicial y final, respectivamente. Se dice entonces que la

aproximación CDW-EIS contiene correctas condiciones de contorno. Para obtener la expresión (1), la función de onda exacta Ψ_i^+ con condiciones salientes ha sido aproximada por la función de onda inicial distorsionada: $\Psi_i^+ \simeq \chi_i^{E,+}$. La función exacta debe ser aproximada por una función normalizada, para evitar sobreestimación de la amplitud de transición exacta⁴.

Este es el caso para $\chi_i^{E,+}$. La obtención de un primer orden de la versión *prior* del modelo CDW-EIS, para el cual la función exacta Ψ_f^- con condiciones entrantes debe ser aproximada en la forma $\Psi_f^- \simeq \chi_f^{C,-}$, será formalmente válida solamente a energías de impacto muy altas, para las cuales $\chi_f^{C,-}$ resulta normalizada⁴.

La aproximación CDW-EIS es asimétrica, en el sentido que preferencia a la interacción electrón-núcleo del blanco en el canal de salida respecto a la interacción electrón-proyectil en el canal de entrada. Los modelos de onda distorsionada del continuo (CDW)⁵ y eikonal simetrizado (SE)⁶ no contienen dicha asimetría. CDW utiliza un factor del continuo electrón-proyectil para distorsionar al estado ligado inicial y una función final como CDW-EIS. SE distorsiona el estado ligado final con una fase eikonal electrón-núcleo del blanco y considera un estado inicial como en CDW-EIS. Sin embargo, la aproximación de primer orden del modelo CDW sufre la falta de normalización de las funciones inicial y final citada anteriormente, excepto a energías muy altas. Por otro lado, la aproximación de primer orden del modelo SE es incapaz de describir el pico de Thomas de doble dispersión en las secciones eficaces diferenciales el cual da la contribución dominante a las secciones eficaces totales de captura a energías de impacto suficientemente altas⁷.

Debido a la asimetría del modelo CDW-EIS, es necesario establecer un criterio para la validez de la aproximación del sistema estudiado. Debemos pesar entonces la influencia relativa de los potenciales del proyectil y del blanco en los canales de entrada y salida, teniendo en cuenta los estados ligados inicial y final. Podría esperarse que la aproximación CDW-EIS sea válida entonces cuando: $(Z_p / Z_T)(\epsilon_f / \epsilon_i) < 1$, donde $Z_p(Z_T)$ y $\epsilon_i(\epsilon_f)$ son la carga del proyectil (núcleo del blanco) y la energía electrónica orbital inicial (final), respectivamente.

En el presente trabajo se desarrolla un modelo de onda distorsionada del continuo-fase eikonal final (CDW-EIS) donde el estado ligado inicial es distorsionado por un factor del continuo electrón-proyectil en el canal de entrada y el estado ligado final por una fase eikonal electrón-núcleo del blanco. Así, tendremos que la aproximación de primer orden de la amplitud de transición en su versión *prior* se puede escribir como:

$$a_{if}^- = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \chi_f^{E,-} \left| H - i \frac{\partial}{\partial t} \right| \chi_i^{C,+} \right\rangle \quad (2)$$

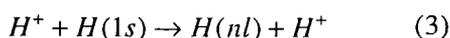
donde $\chi_i^{C,+}$ y $\chi_f^{E,-}$ representan las funciones distorsionadas inicial y final. Es obvio que en este caso, hemos utilizado la aproximación: $\Psi_f^- \sim \chi_f^{E,-}$.

Nuevamente, como en los modelos CDW-EIS, CDW y SE la aproximación CDW-EFS preservará las correctas condiciones de contorno para los canales de entrada y de salida. El carácter asimétrico de CDW-EFS impondrá ahora un nuevo criterio de validez de aplicación, tal que: $(Z_p / Z_T)(\epsilon_f / \epsilon_i) < 1$.

Una medida de la asimetría de las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS puede darse mediante la comparación del cálculo de secciones eficaces totales utilizando las versiones *post* de CDW-EIS y *prior* de CDW-EFS.

II. RESULTADOS Y DISCUSIONES

En las Figs. 1-3 se presentan secciones eficaces totales para la colisión:



En la Fig. 1 se muestran los resultados para $l = 0$, con $2 \leq n \leq 4$; en la Fig. 2, los cálculos correspondientes a $l = 1$ y $n = 2, 3$ y en la Fig. 3 se analiza un estado final resultante $n = 3, l = 2$.

El estado final resultante $1s$ no es estudiado aquí ya que en este caso no existe discrepancia alguna entre los modelos CDW-EIS y CDW-EFS.

Cálculos existentes correspondientes a los modelos CDW^{8,9} y SE¹⁰, juntamente con resultados experimentales^{8,12}, también son mostrados en las figuras.

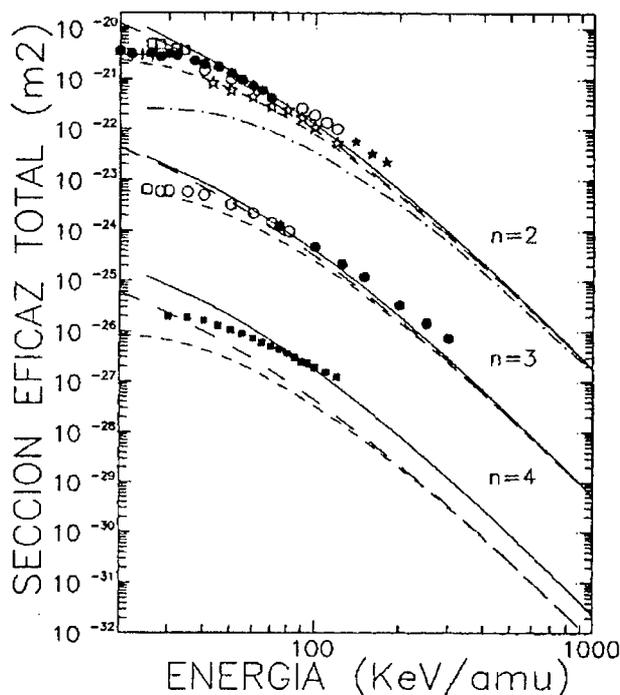


Fig. 1: Secciones eficaces totales de captura electrónica a estados $H(ns)$ ($n=2,3,4$) para impacto de protones sobre blancos atómicos de hidrógeno en estado fundamental. Resultados teóricos (---) CDW-EIS; (—) CDW-EFS; (-·-) CDW^{8,9}; (-·-·) SE¹⁰. Resultados experimentales.^{8,10,12}

En todos los casos analizados las secciones eficaces obtenidas con la aproximación CDW-EFS son mayores que los correspondientes a la aproximación CDW-EIS. Para los estados ns , los resultados de CDW-EFS son menores que los presentados por la aproximación CDW y los de CDW-EIS, mayores que los valores obtenidos a partir del modelo SE. En altas energías la discrepancia *post-prior* entre las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS tiende a desaparecer. Mas aún, para los estados finales $2s$ y $3s$ todas las aproximaciones presentadas tienden a dar los mismos valores de la sección eficaz cuando la energía crece lo suficiente. Sin embargo, para el estado final $4s$ la aproximación CDW da secciones eficaces más grandes que las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS, aún para altas energías de impacto. Debemos notar también para los estados $2s$ y $3s$ las aproximaciones CDW-EFS y CDW-EIS están en muy buen acuerdo a estas velocidades.

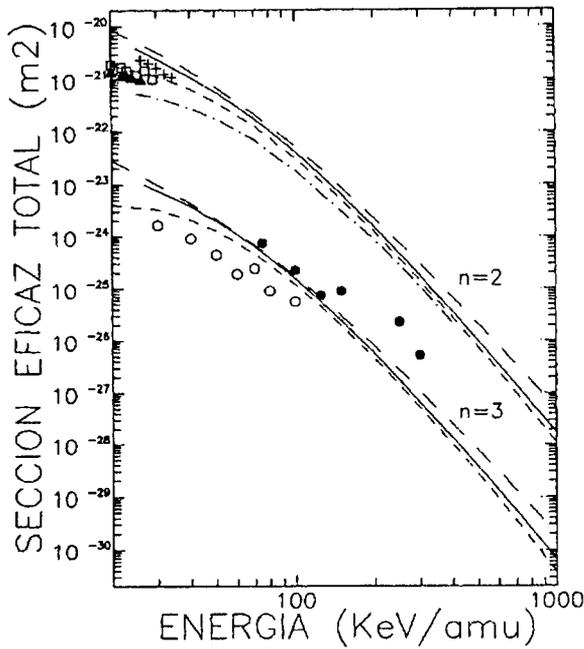


Fig. 2: Idem Fig. 1 para captura a estados H(np) (n=2,3) Todos los datos para el estado final 3p están multiplicados por un factor 10⁻².

La comparación con los resultados experimentales es dificultosa debido a que en la mayoría de los casos, las secciones eficaces corresponden a blancos moleculares H₂. Como ha sido recientemente demostrado por Corchs y colaboradores¹¹, las secciones eficaces correspondientes a blancos moleculares resultan mayores al doble que las secciones eficaces totales correspondientes a blancos atómicos H para las mismas energías de impacto. La forma general de las secciones eficaces experimentales es mejor representada por la aproximación CDW-EIS para todo el rango energético.

Para los estados np las secciones eficaces dadas por CDW y CDW-EFS están razonable acuerdo a energías intermedias. A altas energías de colisión la aproximación CDW-EFS sobreestima los resultados dados por los otros modelos debido a que representa un pico de Thomas de doble dispersión *exageradamente* grande. Como en los casos correspondientes a los estados finales s, la aproximación CDW-EIS da valores más bajos que los modelos CDW y CDW-EFS y mayores que SE. Es válido notar que para procesos de captura a estados con l > 1 no se obtiene una convergencia entre las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS aún a energías de impacto elevadas. Así las discrepancias *post-prior* entre CDW-EIS y CDW-EFS es más notable para estados finales p. Los pocos puntos experimentales existentes para el caso 2p y la dispersión de los mismos para el caso 3p hace difícil la

comparación entre las teorías con los experimentos. Esta dispersión es aún más notable para el estado final 3d (Fig. 3). La diferencia entre los resultados teóricos obtenidos con las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS se hace, en este caso, muy notable.

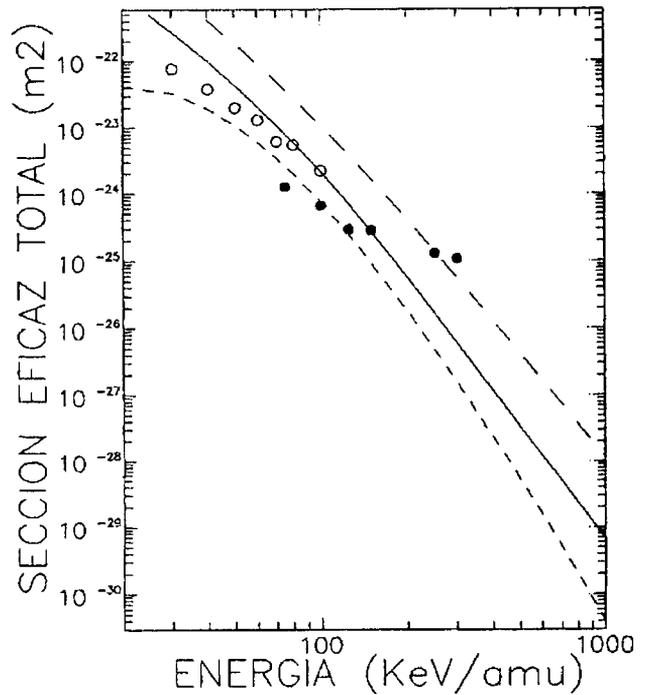
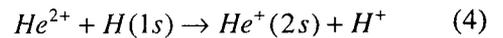


Fig. 3 para captura al estado H(3d).

En la Fig. 4 se presentan secciones eficaces totales para la reacción:



Los resultados teóricos correspondientes a las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS se comparan con los anteriormente calculados en la Ref.9 para el modelo CDW y con datos experimentales extraídos de la Ref.12. La aproximación CDW-EFS da un excelente acuerdo con los experimentos y con los resultados CDW a energías de impacto suficientemente altas. La aproximación CDW-EIS subestima las secciones eficaces experimentales a energías intermedias.

La discrepancia entre CDW-EIS y CDW-EFS desaparece cuando la velocidad de colisión crece. El mejor acuerdo entre el modelo CDW-EFS y los datos experimentales era predecible ara este sistema según el criterio de validez anteriormente establecido en el presente trabajo.

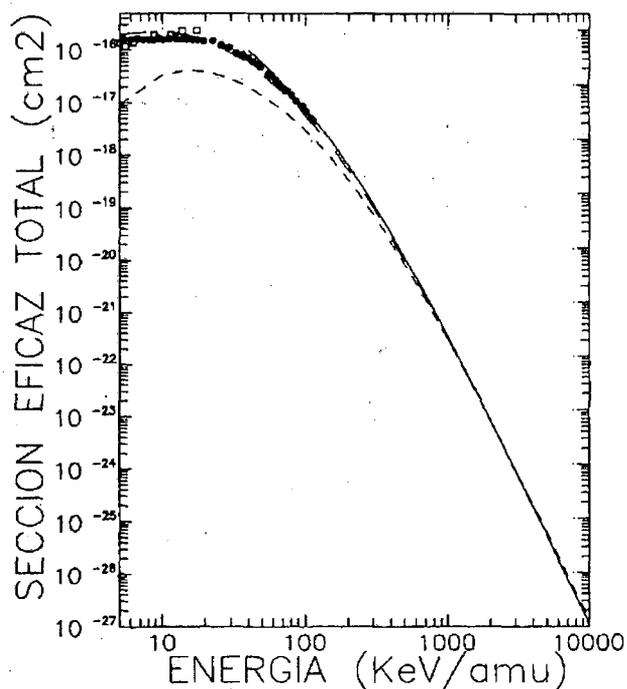


Fig. 4: Secciones eficaces totales de captura electrónica al estado $\text{He}^+(2s)$ para impacto de partículas He^{2+} sobre blanco atómico de hidrógeno en estado fundamental. Resultados teóricos: (- - -) CDW-EIS; (— —) CDW-EFS; (—) CDW. Resultados experimentales extraídos de la Ref. 12.

REFERENCIAS

- 1- A.E. Martínez, G.R. Deco, R.D. Rovarola y P.D. Fainstein, NIMB **34**, 3236, (1988); NIMB **43**, 24-28, (1989).
- 2- A.E. Martínez y R.D. Rovarola, J. Phys. B **23**, 4165-80 (1990).
- 3- A.E. Martínez, J.A. Bullrich, J.M. Maidagan y R.D. Rivarola, J. Phys. B **25**, 1883-91 (1992).
- 4- D.S.F. Crothers, J. Phys. B **15**, 2061-74 (1982).
- 5- I.M. Cheshire, Proc. Phys. Soc. **84**, 89-98 (1964).
- 6- J.M. Maidagan y R.D. Rivarola, J. Phys. B **17**, 2477-87 (1984).
- 7- G.R. Deco y R.D. Rivarola, J. Phys. B **18**, 2283-9 (1985).
- 8- Dž. Belkić, R. Gayet y A. Salin, Phys. Rep. **56**, 279-369 (1979).
- 9- Dž. Belkić, R. Gayet y A. Salin, Atom. Data Nucl. Data Tables **51**, 59-150 (1992).
- 10 G.R. Deco, J. Hansen y R.D. Rivarola, J. Phys. B **19**, L635-8 (1986).
- 11 S.E. Corchs, R.D. Rivarola, J.H. McGuire e Y.D. Wang. Phys. Rev.