

ORDENES SUPERIORES DE APROXIMACION DE ONDA DISTORSIONADA PARA CAPTURA ELECTRONICA

A. E. Martínez y R. Rivarola

Instituto de Física Rosario, CONICET y Universidad Nacional de Rosario
Avda. Pellegrini 250, 2000 Rosario.

En el presente trabajo se analiza el proceso de captura electrónica simple de capa K del blanco a capa K del proyectil para energías de colisión intermedio-altas y altas, a través de la utilización del modelo de segundo orden Onda Distorsionada del Continuo-Estado Inicial Eikonal (CDW-EIS2). Se calculan secciones eficaces diferenciales y totales comparándolas con otros resultados teóricos, así como con datos experimentales.

Introducimos el modelo CDW-EIS2 a través de un formalismo de Dodd y Greider (1966) modificando, en el cual se incluyen correctas condiciones asintóticas para las funciones de onda inicial ϕ_α y final ϕ_β , eliminándose de esta manera la aparición de divergencias asociadas con los potenciales perturbadores coulombianos (Martínez y Rivarola, 1989). Trabajamos dentro de la versión de línea recta de la aproximación de Parámetro de Impacto, bajo al condición $M_T, M_p \gg m$ (donde M_T, M_p y m indican las masas del blanco, proyectil y electrón respectivamente). Tendremos entonces que $R(t) = \rho + v \cdot t$, donde R es la separación internuclear, v la velocidad de la colisión y ρ el parámetro de impacto. La amplitud de transición a calcular resulta:

$$\mathcal{A}_{\beta\alpha}^+ = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \phi_\beta | \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)^+ | \Psi_\alpha^+ \rangle \quad (1)$$

donde $H_{el} = -\frac{V^2}{2} + V_{Te} + V_{Pe} + V_{TP}$ y Ψ_α^+

es la solución exacta de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo correspondiente a H_{el} , que verifica condiciones asintóticas de onda saliente.

Eligiendo potenciales de distorsión ω_α y ω_β y funciones de onda distorsionadas asociadas χ_α y χ_β y siguiendo el trabajo de Briggs y Dubé (1980), la amplitud de transición puede escribirse en segundo orden bajo la forma:

$$\mathcal{A}_{\beta\alpha}^{(2)+}(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left(\langle \chi_\beta^*(t) | \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) | \chi_\alpha^*(t) \rangle - i \langle \chi_\beta^*(t) | \right.$$

$$\left. \left(H_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \int_{-\infty}^t dt' U_k(t, t') \left(H_{el} - \frac{\partial}{\partial t'} \right) | \chi_\alpha(t') \rangle \right) \quad (2)$$

donde $U_k(t, t')$ es el propagador de partícula libre.

La amplitud de transición se relaciona con la amplitud de dispersión $T_{\beta\alpha}^+$, en función del momento transversal transferido η , a través de la expresión:

$$\mathcal{A}_{\beta\alpha}^+(\rho) = \frac{i}{4\pi^2 v} \int d\eta T_{\beta\alpha}^+(\eta) \exp(i\rho \cdot \eta) \quad (3)$$

pudiendo obtenerse las secciones eficaces total y diferencial mediante las relaciones:

$$\sigma = \frac{1}{(2\pi v)^2} \int d\eta |T_{\beta\alpha}^+(\eta)|^2 \quad (4)$$

y

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\mu}{2\pi} \right)^2 |T_{\beta\alpha}^+(\eta)|^2 \quad (5)$$

En nuestro caso las funciones de onda distorsionadas se eligen como (Martínez et al., 1988, 1989):

$$\chi_j(t) = \phi_j(t) \mathcal{L}_j(t) \quad j = \alpha, \beta \quad (6)$$

$$\phi_\alpha(t) = \phi_\alpha(r_T) \exp \left[-i \left(E_\alpha t + \frac{1}{8} v^2 t + \frac{1}{2} v r \right) \right] \quad (7)$$

con

$$\mathcal{L}_\alpha(t) = \exp \left\{ -1 \left[\frac{Z_p}{v} \ln(v \cdot r_p + v r_p) - \frac{Z_t Z_p}{v} \ln(v \cdot R + v R) \right] \right\} \quad (8)$$

$$\phi_\beta(t) = \Phi_\beta(r_p) \exp \left[-i \left(E_\beta t + \frac{1}{8} v^2 t - \frac{1}{2} v r \right) \right] \quad (9)$$

$$\mathcal{L}_\beta(t) = \Gamma \left(1 - i \frac{Z_T}{v} \right) \exp \left(\frac{\pi Z_T}{2v} \right) {}_1F_1 \left(-i \frac{Z_T}{v}; 1; -i v \cdot r_T - i v r_T \right) \quad (10)$$

$$\times \exp \left[-i \frac{Z_T Z_P}{v} \ln (v R + v \cdot R) \right]$$

donde Φ_α (Φ_β) representa el estado estacionario ligado inicial (final), r_T (r_P) indica la posición del electrón respecto del blanco (proyectil) y E_α (E_β) es la energía de ligadura inicial (final),

Reemplazando las ecuaciones (6) a (10) en la ecuación (2) y teniendo en cuenta la expresión (3), obtenemos:

$$\begin{aligned} f_{\beta\alpha}^{(CDW-EIS2)+}(\rho) &= \frac{I}{4\pi^2 v} \int d\eta T^{(CDW-EIS2)+}(\eta) \exp(i\rho \eta) = \\ &= \frac{I}{4\pi^2 v} \int d\eta T^{(CDW-EIS2)+}(\eta) + \\ &+ T'(\eta) \exp(i\rho \eta) \end{aligned} \quad (11)$$

donde CDW-EIS1y CDW-EIS2 indican que las amplitudes así señaladas corresponden a las aproximaciones de primer y segundo orden del modelo CDW-EIS. Utilizando el método de las transformadas de Fourier y la resolución de una integral general de tres denominadores (Lewis, 1956), hallamos finalmente una expresión analítica sencilla para la amplitud de dispersión $T^{(CDW-EIS2)+}$.

En el caso de blancos multielectrónicos, la función ligada inicial se toma como una función hidrogenica de carga efectiva dada según los cálculos de Froese-Fischer (1972). La energía inicial de ligadura E_α se toma como una orbital electrónica de Roothaan-Hartree-Fock (Clementi y Roetti, 1974). En el canal de salida el continuo de distorsión electrón activo-blanco residual se simula con un continuo hidrogenico de carga efectiva del blanco dada por la prescripción $\zeta_T = (-2E_\alpha)^{1/2}$

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En la figura 1 se presentan resultados de secciones eficaces diferenciales de las aproximaciones CDW-EIS2, segundo orden de Onda Distorsionada del Continuo (CDW2, Crothers y McCann, 1984) y segundo orden de Eikonal Simétrica (SE2, Deco y Rivarola, 1985), comparándolas con datos experimentales. Se obtiene un mejor acuerdo con los resultados experimentales para el modelo CDW-EIS2, presentando la aproximación CDW2 cierta estructura en el pico de doble dispersión de Thomas relacionada con la inclusión simultánea de los continuos blanco-electrón y proyectil-electrón (Rivarola y Miraglia, 1982; Rivarola, 1984). Se hace necesario sin embargo, para una mejor comparación, realizar la convolución de los cálculos teóricos

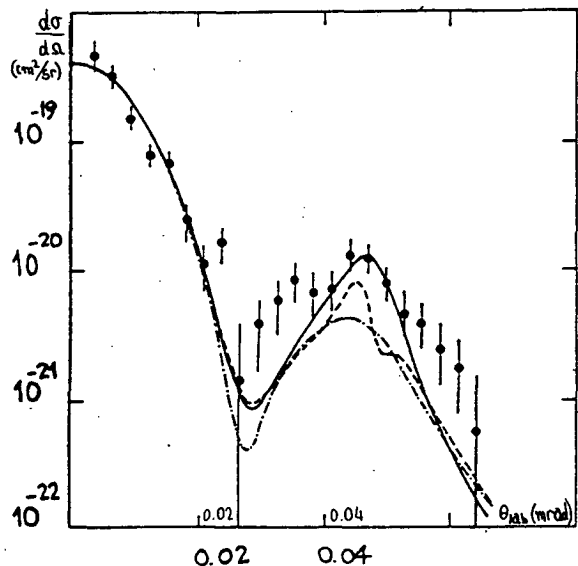


Figura 1: Sección eficaz diferencial en el sistema laboratorio para el proceso:

$H^+ + H(ls) \rightarrow H(ls) + H^+$
a una energía de colisión de 5 MeV.

Teoría:

(—) CDW-EIS2, (---) SE2, (- - -) CDW2.

Experimentos: • Vogt et al (1986).

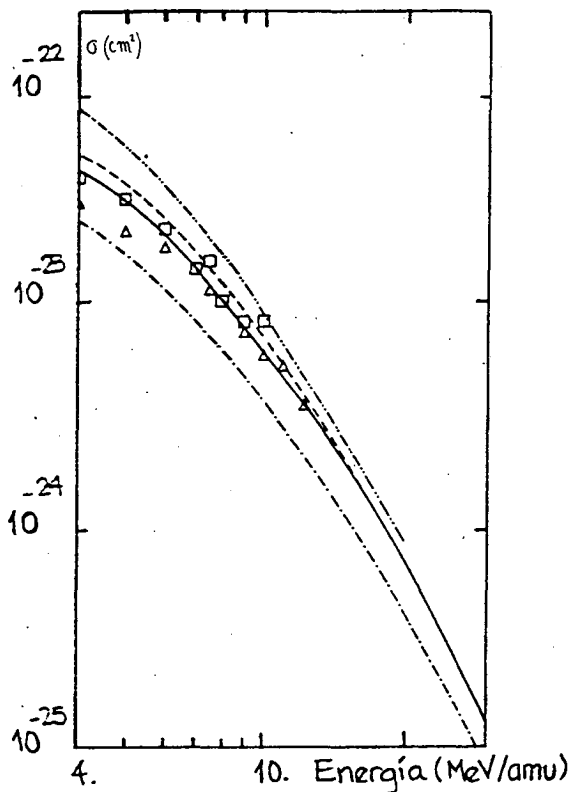


Figura 2: Sección eficaz total de captura para el proceso:

$H^+ + Ar(ls) \rightarrow H(ls) + Ar^+$

Teoría:

(---) CDW-EIS1, (—) CDW-EIS2,

(- - -) SE1, (- . . -) CDW1 (tomado de Belkic et al, 1979).

Experimentos: Δ McDonald et al (1974).

□ Horsdal-Pedersen et al (1983).

teniendo en cuenta la resolución angular experimental.

En la figura 2 se presentan resultados de secciones eficaces totales para un sistema que verifica $Z_T \gg Z_p$, comparándose las aproximaciones CDW-EIS1, CDW-EIS2, primer orden de Onda Distorsionada del Continuo (CDW1, Cheshire, 1964) y primer orden de Eikonal Simétrica (SE1, Maidagan y Rivarola, 1984). El mejor acuerdo con los datos experimentales se obtiene para la aproximación CDW-EIS2, subestimándolos la aproximación SE1 y sobreestimándolos la aproximación CDW1. Por otro lado, puede observarse que las aproximaciones CDW-EIS de primer y segundo orden difieren en a lo sumo un 16%, mostrando un muy cerrado acuerdo para energías de impacto mayores.

En conclusión, hemos presentado el modelo CDW-EIS2 aplicándolo a la descripción de procesos de intercambio de carga de capa K del blanco a capa K del proyectil. Se ha puesto en evidencia la flexibilidad del modelo para la representación de secciones eficaces totales y diferenciales correspondientes a tales procesos, así como la convergencia del segundo orden al primero, lo cual nos permite prever un buen comportamiento de la serie perturbativa asociada al modelo.

REFERENCIAS

1. Belkic Dz, Gayet R. y Salin A.; Phys. Rep. 56 (1979); 279.
2. Briggs J. y Dubé L.; J. Phys. B 13 (1980); 771.
3. Cheshire I. M.; Pro. Phys. Soc. 84 (1964); 89.
4. Clementi E. y Roetti C.; Atom. Data Nucl. Data Tables 14 (1974). 177.
5. Crothers D. S. F. y McCann J. F.; J. Phys. B 17 (1984); L177.
6. Deco G. R. y Rivarola R. D.; J. Phys. B 18 (1985); 2283.
7. Dodd L. R. y Greider K. R.; Phys. Rev. 146 (1966); 675.
8. Froese-Fischer Ch.; Atom. Data 4 (1972); 301.
9. Horsdal-Pedersen E., Cocke C. L., Rasmussen J. L, Varghese S. L. y Waggoner W.; J. Phys. B 16 (1983); 1799.
10. Lewis R. R.; Phys. Rev. 102 (1956); 537.
11. Macdonald J. R., Cocke C. L. y Eidson W. W.; Phys. Rev. Lett. 32 (1974); 648.
12. Maidagan J. M. y Rivarola R. D.; J. Phys. B. 17 (1984); 2477
13. Martínez A. E., Deco G. R., Rivarola R. D. y Fainstein P. D.; Nucl. Inst. and Meth. B 34 (1988); 32.
14. Martínez A. E., Deco G. R., Rivarola R. D. y Fainstein P. D.; Nucl. Inst. and Meth. B 43 (1989); 24.
15. Martínez A. E. y Rivarola R. D.; enviado al J. Phys. B (1989)
16. Rivarola R. D.; Phys. Rev. A 30 (1984); 1122.
17. Rivarola R. D. y Miraglia J. E.; J. Phys. B 15 (1982); 2221.
18. Vogt H., Schuch R., Justiniano E., Schulz M. y Schwab W.; Phys. Rev. Lett. 57 (1986); 2256.