

# CONDICIONES ASINTOTICAS COULOMBIANAS EN EL PROCESO DE CAPTURA ELECTRONICA

S.E.Corchs, J.M.Maidagan y R.D.Rivarola.

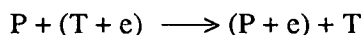
Instituto de Física Rosario, (CONICET - Universidad Nacional de Rosario),

Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario.

En el presente trabajo se estudian diversas aproximaciones perturbativas de primer orden a la amplitud de transición en el proceso de captura electrónica. Se analizan y comparan modelos en los cuales el largo alcance del potencial Coulombiano está representado, en las funciones de onda inicial y final, por distintas fases dependientes de la distancia internuclear.

## 1. TEORIA

Consideremos el proceso de captura electrónica



donde P (T) indica el núcleo del proyectil (blanco) con carga  $Z_p$  ( $Z_T$ ) y e representa al electrón. Dentro de la aproximación de parámetro de impacto, la ecuación de Schrödinger electrónica resulta

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}_T}^2 - \frac{Z_T}{r_T} - \frac{Z_p}{r_p} + \frac{Z_T Z_p}{R} - i \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi_{i,f}^{\pm}(t, \rho, \mathbf{r}_T) = 0 \quad (1.1)$$

donde  $\psi_i^+$  y  $\psi_f^-$  son las funciones de onda exactas salientes y entrantes correspondientes a los canales inicial y final respectivamente,  $\mathbf{r}_p$  ( $\mathbf{r}_T$ ) la coordenada del electrón respecto al núcleo del proyectil (blanco),  $\mathbf{R}$  el vector internuclear dado por

$$\mathbf{R} = \rho + \mathbf{v} t \quad (1.2)$$

y  $\rho$  el vector parámetro de impacto.

Debido al largo alcance del potencial Coulombiano, y para evitar amplitudes divergentes, las funciones de onda exactas inicial y final deben verificar correctas condiciones asintóticas<sup>(1,2,3)</sup>. Esto significa que dichas funciones deben incluir asintóticamente el comportamiento Coulombiano inicial o final de la colisión, tal que

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow -\infty} \psi_i^+(t, \rho, \mathbf{r}_T) &= \xi_i^+ = \\ &= \exp \left[ i \frac{Z_p(Z_T - 1)}{v} \ln(v R - v^2 t) \right] \Phi_i(\mathbf{r}_T, t) \end{aligned} \quad (1.3.a)$$

y

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \bar{\psi}_f(t, \rho, \mathbf{r}_p) &= \bar{\xi}_f = \\ &= \exp \left[ -i \frac{Z_T(Z_p - 1)}{v} \ln(v R + v^2 t) \right] \Phi_f(\mathbf{r}_p, t) \end{aligned} \quad (1.3.b)$$

donde  $\Phi_i(\mathbf{r}_T, t)$  y  $\Phi_f(\mathbf{r}_p, t)$  son los orbitales atómicos viajantes que representan al electrón ligado al núcleo del blanco y del proyectil respectivamente.

Trabajando dentro de la aproximación de primer orden de Born de onda distorsionada, la amplitud de transición resulta

$$a_{i,f}^{\pm} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \chi_f^{\pm} | V_{i,f} | \chi_i^{\pm} \rangle \quad (1.4)$$

donde  $\chi_{i,f}^{\pm}$  son las funciones de onda distorsionadas y  $V_{i,f}$  representan los correspondientes potenciales perturbadores.

Si elegimos  $\chi_i^+ = \xi_i^+$  y  $\chi_f^- = \bar{\xi}_f^-$ , se obtiene la aproximación TFBA calculada por Belkic y colaboradores<sup>(4)</sup>. Las correspondientes perturbaciones resultan

$$V_i = \frac{-Z_p}{r_p} + \frac{Z_p}{R} \quad V_f = \frac{-Z_T}{r_T} + \frac{Z_T}{R} \quad (1.5)$$

Tomando el límite asintótico de las fases logarítmicas que aparecen en las ecuaciones (1.3a) y (1.3b) obtenemos dos nuevas funciones de onda distorsionadas

$$\chi_i^{+AFBA} = \exp \left[ i \frac{Z_p(Z_T - 1)}{v} \ln(2vR) \right] \Phi_i(\mathbf{r}_T, t) \quad (1.6.a)$$

$$\chi_f^{-AFBA} = \exp \left[ -i \frac{Z_T(Z_p - 1)}{v} \ln(2vR) \right] \Phi_f(\mathbf{r}_p, t) \quad (1.6.b)$$

Denominaremos a esta nueva aproximación "Asymptotic First Born Approximation" (AFBA). Los potenciales  $V_i$  y  $V_f$  serán

$$V_i = \frac{Z_p(Z_T-1)}{R} \mathbf{v} \cdot \mathbf{R} - \frac{Z_p}{r_p} + \frac{Z_T Z_p}{R} \quad (1.7.a)$$

$$V_i = \frac{-Z_T(Z_p-1)}{R} \mathbf{v} \cdot \mathbf{R} - \frac{Z_T}{r_T} + \frac{Z_T Z_p}{R} \quad (1.7.b)$$

Observando las perturbaciones(1.7), notamos que la sección eficaz total, en la aproximación AFBA, depende de la interacción internuclear. Sin embargo, ha sido demostrado<sup>(2)</sup> que el tratamiento exacto de dicha interacción en la aproximación eikonal, conduce solamente a la presencia del factor  $\rho^{2iZ_T Z_p/v}$  en la amplitud de transición. Así, el potencial internuclear no debe contribuir a la sección eficaz total. Podemos, por lo tanto, definir una nueva aproximación, que denominaremos "Asymptotic Oppenheimer-Brinkman Kramers" (AOBK) a partir de las ecuaciones (1.6) y en la cual la interacción internuclear esté correctamente representada en las funciones de onda inicial y final

$$\chi_i^{+AOBK} = \exp\left[i \frac{Z_T Z_p}{v} \ln(vR-v^2t)\right] \exp\left[-i \frac{Z_p}{v} \ln(2vR)\right] \Phi_i(\mathbf{r}_T, t) \quad (1.8.a)$$

$$\chi_i^{+AOBK} = \exp\left[-i \frac{Z_T Z_p}{v} \ln(vR-v^2t)\right] \exp\left[i \frac{Z_T}{v} \ln(2vR)\right] \Phi_f(\mathbf{r}_p, t) \quad (1.8.b)$$

$$V_i = -\frac{Z_p}{r_p} - \frac{Z_p}{R} \mathbf{v} \cdot \mathbf{R} \quad V_f = -\frac{Z_T}{r_T} + \frac{Z_T}{R} \mathbf{v} \cdot \mathbf{R} \quad (1.9)$$

Rivarola y colaboradores<sup>(5)</sup> demostraron que la aproximación a dos estados (TSAE) elimina los problemas asociados con el comportamiento asintótico de los potenciales Coulombianos electrónicos. El primer orden de la serie de Bates (según ha sido definida por Rivarola y colaboradores<sup>(5)</sup>, correspondiente al límite de alta energía de impacto de la TSAE, se obtiene tomando

$$\chi_i^{+BATES} = \exp\left[i \frac{Z_T Z_p}{v} \ln(vR-v^2t)\right] \exp\left[-i \int_{-\infty}^t dt' \langle \Phi_i | \frac{-Z_p}{r_p} | \Phi_i \rangle\right] \Phi_i(\mathbf{r}_T, t) \quad (1.10.a)$$

$$\chi_i^{+BATES} = \exp\left[i \frac{Z_T Z_p}{v} \ln(vR-v^2t)\right] \exp\left[-i \int_t^{+\infty} dt' \langle \Phi_f | \frac{-Z_T}{r_T} | \Phi_f \rangle\right] \Phi_f(\mathbf{r}_p, t) \quad (1.10.b)$$

donde  $\Phi_i(\mathbf{r}_T)$  y  $\Phi_f(\mathbf{r}_p)$  son soluciones de

$$\left(-\frac{1}{2} \mathbf{V}_{r_T}^2 - \frac{Z_T}{r_T} - \epsilon_i\right) \Phi_i(\mathbf{r}_T) = 0$$

y

$$\left(-\frac{1}{2} \mathbf{V}_{r_p}^2 - \frac{Z_p}{r_p} - \epsilon_f\right) \Phi_f(\mathbf{r}_p) = 0$$

con  $\epsilon_i$  y  $\epsilon_f$  energías atómicas orbitales del electrón ligado al núcleo del blanco y del proyectil respectivamente. Los potenciales perturbadores resultantes son

$$V_i = -\frac{Z_p}{r_p} + \langle \Phi_i | Z_p/r_p | \Phi_i \rangle$$

$$V_f = -\frac{Z_T}{r_T} + \langle \Phi_f | Z_T/r_T | \Phi_f \rangle \quad (1.11)$$

Notemos que, en esta aproximación, la función de onda inicial está distorsionada por una fase exponencial que considera la interacción proyectil-electrón promediada sobre la distribución inicial del electrón. Análogamente, la función de onda final está distorsionada por una fase exponencial que considera la interacción electrón-núcleo del blanco promediada sobre la distribución final del electrón. En la aproximación TFBA podemos pensar que el electrón se mueve sujeto al núcleo del blanco en el canal de entrada y sujeto al núcleo del proyectil en la salida. Podría interpretarse entonces la aproximación TFBA como una degradación de la Bates, y análogamente, la AOBK como una degradación de la TFBA.

En todos los modelos presentados los potenciales perturbadores resultantes son de corto rango.

Recientemente, Corchs y colaboradores<sup>(6)</sup> han demostrado que, aún cuando las aproximaciones AOBK y AFBA pueden obtenerse dentro de la aproximación de parámetro de impacto, éstas no pueden ser derivadas a partir de la teoría formal.

## 2.RESULTADOS Y DISCUSIONES

Se calcularon secciones eficaces totales utilizando las diferentes aproximaciones presentadas en la sección anterior. También se realizó el cálculo correspondiente a la aproximación Oppenheimer-Brinkman Kramers (OBK), la cual no verifica las correctas condiciones asintóticas. En la figura 1 se presentan las curvas de secciones eficaces totales obtenidas para el proceso de captura



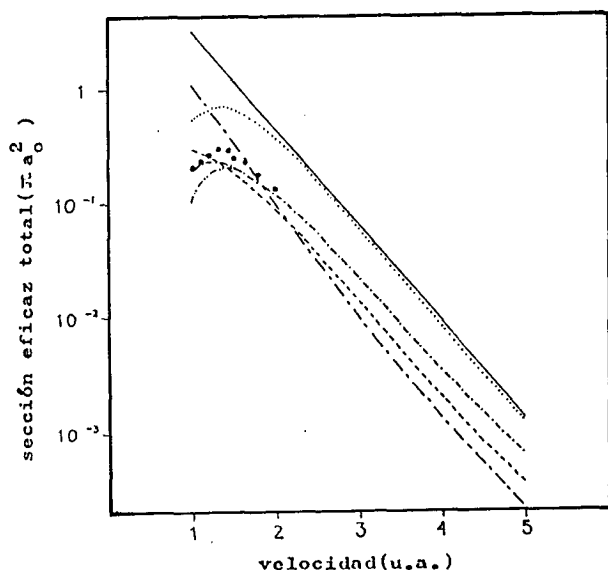


Figura 1: Secciones eficaces totales para captura electrónica por impacto de protones sobre He<sup>+</sup>. Resultados teóricos: - - - - TFBA, - · - AFBA, — AOBK, - - - - BATES, - · - TSAE, ······ OBK. Para velocidades mayores que 1.5 TSAE coincide con BATES. Datos experimentales: referencia 7.

Los cálculos teóricos se comparan con datos experimentales correspondientes a captura hacia todos los estados del proyectil. Comparando el primer orden de la serie de Bates con los otros modelos con buenas condiciones asintóticas, observamos que ésta es la aproximación que mejor acuerdo presenta con los datos experimentales. Además, en el rango de velocidades analizado, resulta una muy buena aproximación del modelo TSAE. Así el acuerdo de los experimentos con la aproximación de Bates, que describe mejor la región de interacción en la cual los agregados de la colisión se hallan próximos entre sí, podría pensarse como una indicación de la importancia de considerar tal dominio adecuadamente a energías de impacto intermedias e intermedias-altas.

En la figura 2 se analiza el sistema



Dado que los experimentos son mediciones para captura desde la capa K de argón neutro, las curvas teóricas de la reacción (2.2) están multiplicadas por un factor 2. Notemos que la aproximación AFBA presenta secciones eficaces muy diferentes a las calculadas con los otros modelos. Comparando las

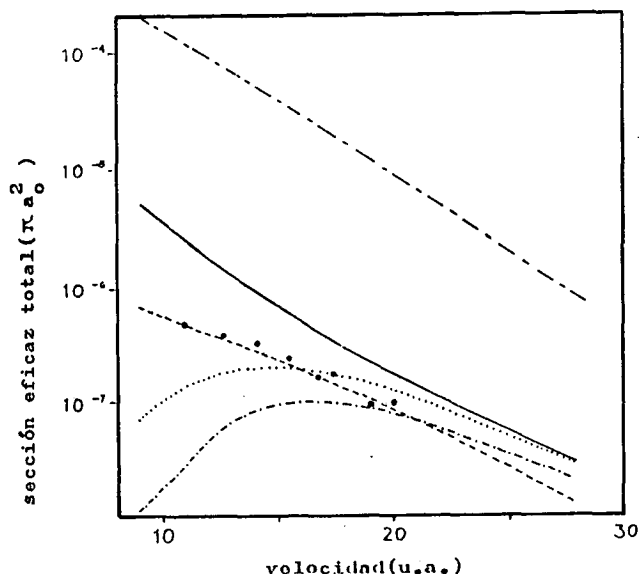


Figura 2: Secciones eficaces totales para captura electrónica por impacto de protones sobre Ar<sup>17+</sup>. Resultados teóricos: igual notación que en figura 1. Datos experimentales: referencia 8.

aproximaciones TFBA, AFBA y AOBK vemos que la única que presenta un acuerdo razonable con los experimentos para los dos sistemas estudiados es la TFBA. Contrariamente a lo esperado, la aproximación de Bates difiere mucho de los resultados experimentales. Más investigación se hace necesaria para clarificar este punto. Se observa una gran dispersión de los resultados calculados con las diferentes aproximaciones.

## REFERENCIAS

1. Cheschire I.M., 1964 Proc. Phys. Soc. **84** 89
2. Dz Belkic, Gayet R. y Salin A., 1979 Phys.Rep. **56** 279
3. Dewangan D. y Eichler J., 1985 J.Phys. B **18** L65
4. Dz Belkic, Gayet R., Hanssen J. y Salin A., 1986 J.Phys. B **19** 2945.
5. Rivarola R., Maidagan J. y Hanssen J., 1987 Nucl. Instrum. Methods B **27** 565
6. Corchs S., Dubé L., Maidagan J., Rivarola R. y Salin A. enviado a publicación.
7. Rinn K. Melchert y Salzborn E., 1985 J.Phys. B **18** 3783
8. Horsdal-Pedersen E., Cocke C. L., Rasmussen J.L., Varghese S.L. y Waggoner W., 1983 J.Phys. B **16** 1799.