

ANÁLISIS DE LA SECCIÓN EFICAZ TRIPLE DIFERENCIAL DE EMISIÓN ELECTRÓNICA EN LA COLISIÓN ION-ATOMO

M. D. Sánchez*

CONICET - Instituto Balseiro (IB) - Dpto. de Física - Universidad Nacional del Sur
Av. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca.
email: dsanchez@criba.edu.ar

W. Cravero y C. R. Garibotti

CONICET - Centro Atómico Bariloche (CAB)
Av. Bustillo 9500, (9400) S. C. de Bariloche.

La aproximación de onda distorsionada del continuo con estado inicial eikonal (CDW - EIS) es usada en el cálculo de las secciones eficaces triple diferenciales (SETD) de ionización para blancos multielectrónicos en coincidencia con la dirección del proyectil saliente y con el momento del blanco en retroceso. Para la obtención de las respectivas matrices de transición se utiliza el método del estado generatriz. Se comparan las estructuras presentes en ambas SETD haciendo especial hincapié en el mecanismo de doble colisión. Por último, se comparan los resultados obtenidos en la aproximación CDW - EIS con cálculos de trayectorias clásicas Monte Carlo (CTMC) extraídos de la literatura.

Continuum distorted wave - eikonal initial state (CDW - EIS) is used to calculate the triple differential cross section (TDCS) for ionization of the multielectronic targets in coincidence with the outgoing projectile direction and recoil momentum of the target. Transitions matrixs are evaluated through generatrix state method. The structures presented in both TDCS are compared standing out the double collision mechanisms. At last, the results obtained in CDW - EIS approximation are compared with classical trajectories Monte Carlo (CTMC) calculations extracted from literature.

I. INTRODUCCIÓN

El avance en las técnicas de espectroscopía de blancos en retroceso ha abierto un nuevo camino en el estudio de las interacciones Coulombianas de tres cuerpos, permitiendo la determinación del estado final de movimiento de todas las partículas intervinientes.

La más completa información desde el punto de vista cinemático en el proceso de ionización simple de átomos por impacto de iones, toma en cuenta la determinación simultánea de cinco de las nueve componentes de momento en el estado final. Las restantes cuatro componentes son determinadas a través de leyes de conservación de energía y momento. Esta información está contenida en la Sección Eficaz Triple Diferencial (SETD). Esta sección eficaz ya fue ampliamente estudiada en un trabajo previo¹ para la ionización de hidrógeno atómico por impacto de iones en Primera Aproximación de Born (FBA) y en la aproximación de Onda Distorsionada del Continuo con Es-

tado Inicial Eikonal (CDW - EIS). Los cálculos se desarrollaron tomando en cuenta la SETD definida como $\frac{d\sigma}{dE_k d\Omega_k d\Omega_K}$, donde $dE_k = kdk$ y $d\Omega_k$ dan, respectivamente, el momento y el elemento de ángulo sólido del electrón saliente, y $d\Omega_K$ determina el elemento de ángulo sólido del proyectil dispersado. Esta sección eficaz así definida es en realidad una quintuple diferencial y ha sido medida y calculada para el caso de ionización por impacto de electrones pero no, al menos de nuestro conocimiento, para el caso de la colisión ion - átomo.

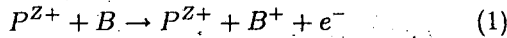
En los últimos años se han realizado numerosos trabajos teóricos en diferentes aproximaciones dedicados al estudio de distribuciones electrónicas en función de los retrocesos longitudinales del blanco para el proceso de ionización en la colisión de iones desnudos sobre blancos atómicos^{2,3}. Rodríguez *et al.*⁴ mostraron, usando la aproximación CDW - EIS, que los mecanismos de ionización más importantes en la colisión ion - átomo pueden ponerse de manifiesto a partir de las distribuciones de momentos de blancos en retroceso. Recientemente Dörner *et al.*⁵, presentaron un estudio experimental para la ionización en la colisión protón - helio para energías entre 5 - 15 keV, consiguiendo imágenes bidimensionales de la distribución electrónica en el es-

* Autor a quien debe dirigirse la correspondencia

pacio de momentos con la determinación simultánea del parámetro de impacto y la orientación del plano de colisión. En el presente trabajo usamos la aproximación CDW - EIS⁶, para obtener las distribuciones electrónicas de ionización en coincidencia con la dirección de dispersión del proyectil y con el momento de retroceso del blanco residual, focalizando el análisis para el caso de blancos multielectrónicos. Los cálculos se desarrollan sin tomar en cuenta la interacción internuclear, lo cual es correcto dado que su contribución no es apreciable para energías de impacto altas y momentos transversales del blanco en retroceso pequeños⁷.

II. SECCIONES EFICACES

Consideremos el proceso de ionización simple de un átomo neutro por el impacto de iones desnudos rápidos, según:



De las nueve componentes de momento que gobiernan este proceso cuatro son determinadas a través de leyes de conservación de energía y momento. Por lo tanto, considerando la sección eficaz en momento y ángulo de salida del electrón, y la dirección final del proyectil, tenemos para el proceso (1):

$$\frac{d^5\sigma}{dkd\Omega_k d\Omega_K} = \frac{\mu^2}{(2\pi)^2} |T_{if}|^2 \quad (2)$$

donde μ es la masa reducida del sistema proyectil - blanco y T_{if} es el elemento de matriz de la transición. En casos tales como colisiones entre partículas pesadas resulta conveniente utilizar una sección eficaz que relacione componentes de momento transferido y componentes de momento del electrón, tal como:

$$\frac{d^5\sigma}{d\eta dk} = \frac{1}{(2\pi)^2 v^2} |T_{if}|^2 \quad (3)$$

donde η es el momento transferido transversal, k el momento del electrón y v es la velocidad del proyectil. Aplicando leyes de conservación de momento y energía se puede transformar (3) para obtener una sección eficaz en términos del momento del blanco en retroceso, R y del momento k del electrón:

$$\frac{d^5\sigma}{dk_{\perp} dR_{\perp} dR_{\parallel}} = \frac{v}{\sqrt{v^2 + 2\varepsilon_i + 2R_{\parallel}v - k_{\perp}^2}} \frac{d^5\sigma}{d\eta dk} \quad (4)$$

Como puede observarse en (2) y (3) el problema se reduce al cálculo del elemento de matriz T_{if} , de acuerdo con la teoría a utilizar.

III. CÁLCULO DE LA MATRIZ DE TRANSICIÓN CDW-EIS PARA ÁTOMOS MULTIELECTRÓNICOS

Crothers y McCann⁶ mostraron que la matriz de transición CDW-EIS puede obtenerse, en función del momento transferido transversal η , a partir de:

$$T_{if}(\eta) = -\frac{N(\zeta)N(\xi)}{(2\pi)^{5/2}v} \mathbf{A}(q) \cdot \mathbf{B}(q) \quad (5)$$

donde $\mathbf{A}(q)$ y $\mathbf{B}(q)$, con q igual al módulo de momento transferido, están dados por:

$$\mathbf{A}(q) = \int ds e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{s}} e^{-i\nu \ln(v\mathbf{s} + \mathbf{v}\cdot\mathbf{s})} \nabla_{\mathbf{s}} {}_1F_1(i\zeta; 1; i(\mathbf{p}\mathbf{s} + \mathbf{p}\cdot\mathbf{s})) \quad (6)$$

$$\mathbf{B}(q) = \int dx e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}} \phi_i(x) \nabla_{\mathbf{x}} {}_1F_1(i\xi; 1; i(\mathbf{k}\mathbf{x} + \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})) \quad (7)$$

con

$$\xi = \frac{Z_B}{k}, \quad \zeta = \frac{Z_P}{p}, \quad \mathbf{p} = \mathbf{k} - \mathbf{v}, \quad y$$

$$N(b) = \exp\left(\frac{\pi b}{2}\right) \Gamma(1 - ib)$$

La integral (6), es independiente del estado inicial y puede ser evaluada fácilmente dando⁸:

$$\mathbf{A}(q) = -\frac{2\pi i Z_P N(\nu)}{\alpha \beta_e} \left(\frac{\alpha}{\gamma}\right)^{i\zeta} \left|\frac{\alpha}{\beta_e}\right|^{i\nu} e^{-\nu\pi} \{\mathbf{q}F_I - i\nu\mathbf{Q}F_{II}\} \quad (8)$$

donde

$$\begin{aligned} F_I &= {}_2F_1(i\nu, i\zeta; 1; z) \\ F_{II} &= {}_2F_1(i\nu + 1, i\zeta + 1; 2; z) \\ \mathbf{Q} &= \frac{\alpha}{\beta_e \gamma} \left[\delta\mathbf{q} + \gamma \frac{v}{p} (\mathbf{p} - p\mathbf{v}) \right] \\ z &= 1 - \frac{\alpha\delta}{\beta_e \gamma} \\ \alpha &= \frac{1}{2} q^2 \\ \beta_e &= -\Delta\varepsilon = -\left(\frac{k^2}{2} - \varepsilon_i\right) \\ \gamma &= \alpha + (\mathbf{q} \cdot \mathbf{p}) \\ \delta &= \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - pv + \beta_e \end{aligned}$$

Consideremos ahora la integral (7). Siguiendo el método desarrollado por Ramirez et al⁹, para el caso de estados hidrogénicos, se propone reemplazar el estado ligado inicial por una función de onda generatriz dada por:

$$\phi_i^g(x) = \frac{Z_{\lambda}^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \exp[-i\mu \cdot \mathbf{x} - \beta x] \quad (9)$$

donde Z_{λ} es la carga del estado RHF¹⁰ y β , μ son parámetros a determinar. Puede verse que tomando $\mu=0$ y $\beta = Z_B$ ó Z_{λ} obtenemos el estado 1s para el

caso monoeléctrico hidrogénico o de Slater, respectivamente. A partir del estado base (9) podemos obtener cualquier estado ligado de tipo Slater por la aplicación del operador:

$$D_{n,l,\pm m} = C_{n,l} D_{n,l}^{(1)} D_{|m|,l}^{(2)} D_{\pm m}^{(3)} \quad (10)$$

donde

$$C_{n,l} = \frac{(iZ_\lambda)^l}{l!} \left(\frac{2(2l+1)}{(2n)!} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$D_{n,l}^{(1)} = (-2Z_\lambda)^{n-l-1} \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \right)^{n-l-1}$$

$$D_{|m|,l}^{(2)} = \left(\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{l-|m|}{2} \rfloor} \binom{l}{j} \frac{(2l-2j)!}{(l-2j-|m|)!} \times \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \right)^{2j} \left(\frac{\partial}{\partial \mu_z} \right)^{l-2j-|m|}$$

$$D_{\pm m}^{(3)} = |m|! \sum_{k=0}^{|m|} \binom{|m|}{k} \left(\frac{\partial}{\partial \mu_x} \right)^k \left(\pm i \frac{\partial}{\partial \mu_y} \right)^{|m|-k}$$

de donde se observa que la obtención de cualquier estado con números cuánticos $n, l, \pm m$ está dado por simple derivación paramétrica de la función base (9) respecto de los parámetros β y μ .

Reemplazando (9) en (7), ésta puede ser evaluada como:

$$B_{\beta\mu}(\mathbf{q}) = \frac{Z_\lambda^{3/2} 4\sqrt{\pi} i \xi k}{\gamma_{\beta\mu}^2} (1 - G_{\beta\mu})^{-i\xi-1} \times \left[\mathbf{q} + \mu + k \left(1 + i \frac{\beta}{k} \right) \right] \quad (11)$$

donde

$$\gamma_{\beta\mu} = \frac{1}{2} \left[\beta^2 + (\mathbf{q} + \mathbf{k} + \mu)^2 \right]$$

$$G_{\beta\mu} = \frac{\mathbf{k} \cdot \left[\mathbf{q} + \mu + k \left(1 + i \frac{\beta}{k} \right) \right]}{\gamma_{\beta\mu}}$$

Reemplazando (8) y (11) en (5) obtenemos la matriz de transición generatriz dada por:

$$T_{\beta\mu}(\eta) = \frac{N(\zeta) N(\xi) N(\nu) Z_P Z_B}{2\pi \alpha \beta_e \nu} \left(\frac{\alpha}{\gamma} \right)^{i\xi} \left| \frac{\alpha}{\beta_e} \right|^{i\nu} \times \left(12 \right)$$

$$e^{-\nu\pi} (1 - G_{\beta\mu})^{i\xi-1} \frac{Z_\lambda^{3/2}}{\gamma_{\beta\mu}^2} B_{\beta\mu} [F_I - i\nu \Omega_{\beta\mu} F_{II}]$$

donde

$$B_{\beta\mu} = \mathbf{q} \cdot \left[\mathbf{q} + \mu + k \left(1 + i \frac{\beta}{k} \right) \right]$$

$$\Omega_{\beta\mu} = \frac{\mathbf{Q} \cdot \left[\mathbf{q} + \mu + k \left(1 + i \frac{\beta}{k} \right) \right]}{B_{\beta\mu}}$$

Aplicando ahora el operador (10) sobre (12) obtenemos la matriz de transición CDW - EIS para ionización simple desde cualquier estado ligado descripto por una función de onda de tipo Slater.

IV. DISTRIBUCIONES ELECTRÓNICAS

En la figura 1 se muestran las secciones eficaces triple diferenciales, obtenidas a partir de (2) para la ionización simple de Li(1s) y Li(2s) por impacto de protones de 1 MeV. Los resultados para cada estado son presentados en el espacio de momentos del electrón para un determinado ángulo de salida del proyectil ($\theta_K = 0$).

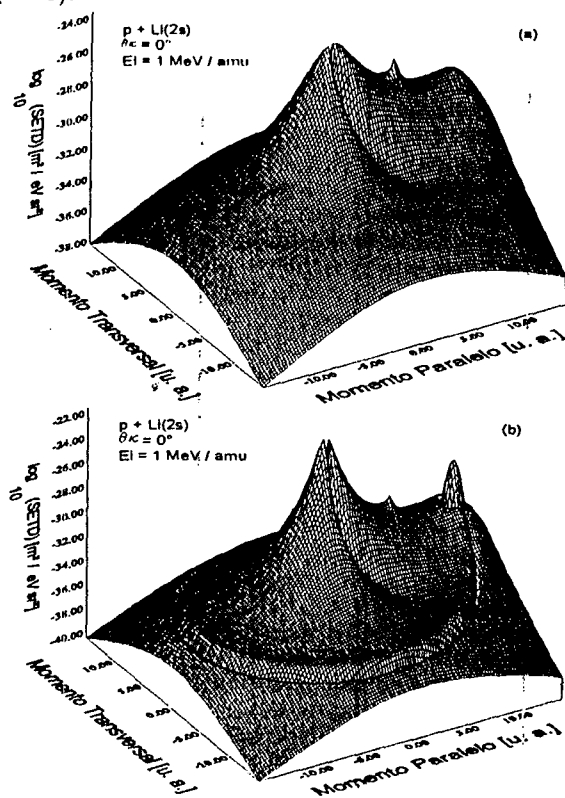


Figura 1. Logaritmo de la sección eficaz triple diferencial (SETD), en la aproximación CDW - EIS, como función del momento k del electrón para una energía de impacto de 1 MeV/amu de protones sobre litio en coincidencia con el ángulo de salida del proyectil cuya dirección final se fijó paralela a la incidencia. (a) estado 1s, (b) estado 2s.

Los gráficos muestran claramente las estructuras correspondientes al encuentro binario, captura al continuo y electrones lentos, así como una estructura circular centrada en $k = 0$ con radio igual a dos veces la velocidad del proyectil correspondiente a un proceso de doble colisión. Este proceso, estudiado por Gasaneo et al para el sistema protón - He, corresponde a la ionización, por colisión con el blanco residual, de los electrones que ya han sufrido un encuentro binario con el proyectil. La condición cinemática $q = k$ es la que da origen a esta estructura en la SETD. Para el caso de ionización desde el estado 2s, puede observarse cómo la distribución de momentos de los electrones ligados, modifican las estructuras del pico

binario y de dobles colisiones. Si bien la integración en el ángulo de salida del proyectil desdibuja la estructura de dobles colisiones no oculta totalmente el efecto, que para el caso de electrones $2s$, provoca sobre esta estructura la transformada de Fourier de dicho estado. Existe evidencia experimental de este mecanismo en la determinación de la sección eficaz doble diferencial de ionización para blancos atómicos como Ne, He y láminas de C y Au.^{12,13} También puede observarse en la figura 1 otra estructura que se evidencia como una canaleta circular de radio igual a la velocidad del proyectil. Gasaneo *et al*¹ mostraron que la forma de esta estructura depende del ángulo de salida del proyectil y está relacionada a las propiedades dinámicas del sistema en colisión.

Un análisis similar puede hacerse a partir de (4). En la figura 2 se muestra la sección eficaz de ionización de Li($2s$) por impacto de protones de 1 MeV en coincidencia con el retroceso transversal del blanco ($R_{\perp} = 0$ a.u.). Como en este caso no se fija el ángulo de salida del proyectil, obtenemos (como en el caso de secciones eficaces doble diferenciales) un anillo centrado en la velocidad del proyectil correspondiente al encuentro binario, destacándose también una estructura circular centrada en $k = -v$ con un radio igual al del anillo binario. Puede observarse cómo esta estructura también reproduce el efecto de la transformada de Fourier del estado.

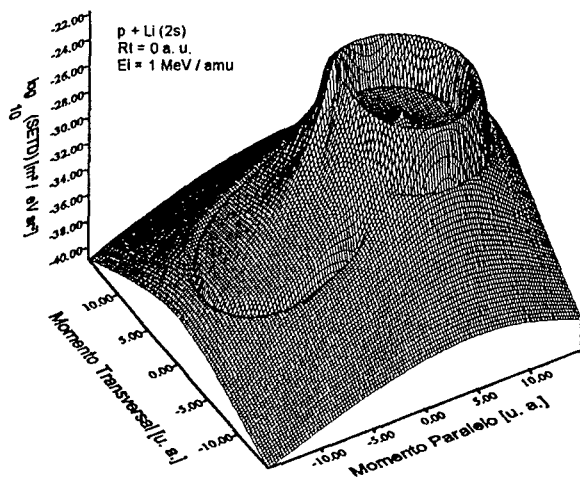


Figura 2. Logaritmo de la sección eficaz triple diferencial (SETD), en la aproximación CDW - EIS, como función del momento k del electrón para una energía de impacto de 1MeV/amu de protones sobre litio $2s$ en coincidencia con la componente de momento transversal del blanco en retroceso cuyo valor se fijó en 0 u. a.

Analizando detalladamente la condición cinemática $q = k$ y tomando en cuenta la conservación de momento y energía dadas por:

$$q = k + R$$

$$q_{\parallel} \approx \frac{|\epsilon_i|}{v} + \frac{k^2}{2v}$$

donde q_{\parallel} es la componente paralela a la dirección de incidencia del proyectil del momento transferido, obtenemos la relación

$$R^2 + 2k \cdot R = 0 \quad (13)$$

Puede verse que (13) da origen a una ecuación de orden cuarto en k . Las soluciones de (13) para las condiciones de la figura 2 ($R_{\perp} = 0$) están dadas por:

$$k = \pm 2v \cos \theta \pm 2v \sqrt{v^2 \cos^2 \theta - 2\epsilon_i} \quad (14)$$

aquí θ es el ángulo de emisión del electrón relativo a la dirección de incidencia. La relación (14) representa dos círculos en el plano de momentos centrados en $k = \pm v$ respectivamente, con radios menores que la velocidad del proyectil. Por lo tanto, podemos decir que la estructura observada corresponde al proceso de doble colisión.

La figura 3 muestra datos teóricos¹⁴ para la ionización de He por impacto de protones y antiprotones a 100 keV proyectado sobre el plano de colisión definido por el proyectil incidente y el blanco en retroceso en coincidencia con el momento transversal de retroceso del blanco. Estos cálculos fueron realizados utilizando el método de trayectorias clásicas Monte Carlo (CTMC).

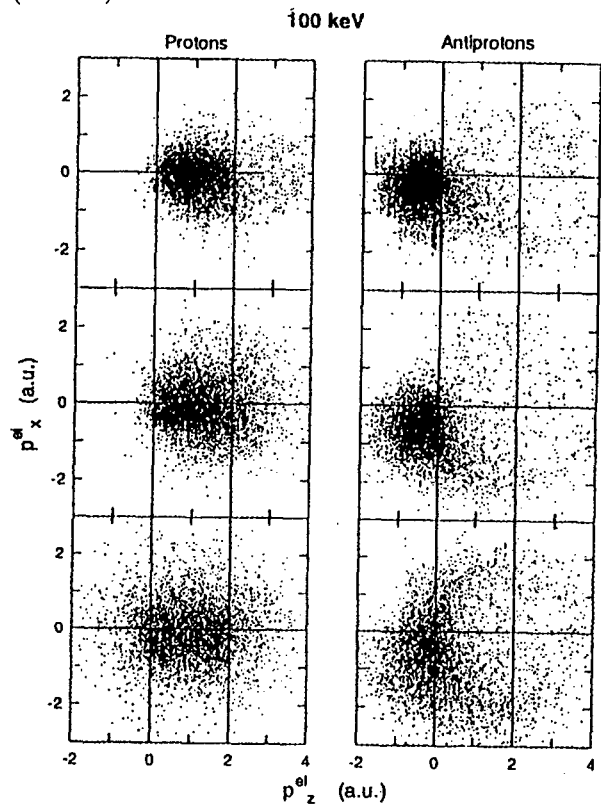


Figura 3. Proyección en el plano de colisión determinado por el proyectil incidente y el blanco en retroceso de la SETD de ionización en coincidencia con el momento transversal de retroceso del blanco. Los resultados para protones y antiprotones se presentan en las columnas de la izquierda y derecha respectivamente. De arriba hacia abajo las figuras corresponden a valores de momento transversal de recoil $0 \text{ u. a.} \leq R_{\perp} \leq 1 \text{ u. a.}$, $1 \text{ u. a.} \leq R_{\perp} \leq 2 \text{ u. a.}$, $R_{\perp} \geq 2 \text{ u. a.}$ respectivamente. Resultados de CTMC extraídos de referencia¹⁴

En la figura 4 se observan los resultados obtenidos mediante la aproximación CDW - EIS para las mismas condiciones de la figura 3. Puede observarse el buen acuerdo existente entre ambos métodos.

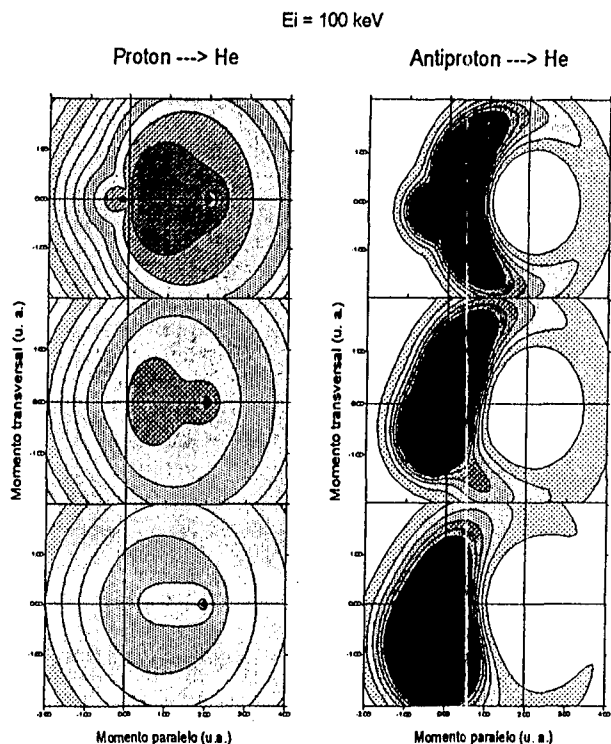


Figura 4. Idem Figura 3 en aproximación CDW - EIS.

V. CONCLUSIONES

Se aplicó el método de la función generatriz de estados para obtener la matriz de transición CDW - EIS para la ionización simple de blancos multielectrónicos. Se compararon los resultados obtenidos para las SETD en coincidencia con el proyectil saliente y con el blanco en retroceso. Las estructuras más notables (emisión de electrones lentos, captura de electrones al continuo del proyectil y colisión binaria electrón - proyectil) son reconocidas en ambas secciones eficaces. También la estructura de doble colisión puede ser observada en ambos casos con diferencias apreciables en su presentación. Cuando la coincidencia es establecida con el proyectil saliente, los electrones que originariamente sufrieron una colisión binaria con el proyectil, dando origen a un pico hacia adelante para una velocidad igual al doble de la velocidad del proyectil, chocan luego con el blanco residual dando como resultado una estructura circular centrada en el origen y con un radio $k \approx 2v$. En el caso de la sección eficaz (4), en coincidencia con el retroceso transversal del blanco, los electrones binarios (que luego chocan con el blanco residual) no provienen de un único pico sino de un anillo; por cuanto no producen una única estructura de doble colisión sino una superposición de éstas cuyos orígenes se encuentran en cada uno de los electrones pertenecientes al anillo binario dando como resultado

un círculo centrado en $k = -2v$ con un radio próximo a la velocidad del proyectil.

El acuerdo de los resultados obtenidos en la aproximación CDW - EIS comparados con la teoría de trayectorias clásicas Monte Carlo es bueno, aunque la forma en que se presentan los resultados no permite observar claramente el comportamiento de las distintas estructuras. Hasta el momento, no existen datos experimentales para energías de impacto altas o intermedias que permitan comparar los resultados obtenidos, así como tampoco se han publicado mediciones de coincidencia, ya sea con el proyectil dispersado como con el blanco en retroceso, que establezcan en forma directa la evidencia experimental del mecanismo de doble colisión.

Referencias

- ¹ G. Gasaneo, W. Cravero, M. D. Sánchez and C. R. Garibotti, Phys. Rev. A 53 (1996).
- ² H. Fukuda, I. Shimamura, L. Végh, and T. Watanabe, Phys. Rev. A 44, 1565 (1991).
- ³ S. F. O'Rourke, I. Shimamura, and D. S. F. Crothers, Proc. Soc. London A 452, 175 (1996).
- ⁴ V. D. Rodríguez, Y. D. Wang and C. D. Lin, Phys. Rev. A 52, R9 (1995).
- ⁵ R. Dörner, H. K. Klemliche, M. H. Prior, C. L. Cocke, J. A. Gary, R. E. Olson, V. Mergel, J. Ullrich and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. Lett. (1996)
- ⁶ D. S. F. Crothers and J. F. McCann, J. Phys. B 16, 3229 (1983).
- ⁷ V. D. Rodríguez. En prensa, Nuc. Ins. and Meth. B, (1997).
- ⁸ M. McCartney and D. S. F. Crothers, J Phys. B 20 4561 (1993).
- ⁹ Ramirez y R. D. Rivarola. Anales AFA 6 33 (1994).
- ¹⁰ E. Clementi y C. Roetti, At. Data Nucl. Data Tables 14 177-478 (1974).
- ¹¹ Y. D. Wang et al., Phys. Rev. A 53, 3278, (1996).
- ¹² S. Suárez, W. R. Cravero, R. Barrachina, C. R. Garibotti, W. Meckbach, R. Mainer, M. Tobisch, and K. O. Groneveld, in Proceedings of the Symposium on Two-Center Effects in Ion Atom Collisions, Lincoln, Nebraska, 1994.
- ¹³ S. Suárez et al Nucl. Instr. Meth. B86, 197 (1994).
- ¹⁴ C. J. Wood and R. E. Olson, J. Phys. B, 29, L257 (1996).