

# Generalización del modelo CDW-EIS para captura electrónica simple desde blancos multielectrónicos.

P. N. Abufager<sup>(1)</sup>, A. E. Martínez<sup>(1)</sup>, R. D. Rivarola<sup>(1)</sup> y P. D. Fainstein<sup>(2)</sup>.

(1) Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR) y Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, UNR, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina

(2) Centro Atómico Bariloche Instituto Balseiro, 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina.

e-mail: [abufager@fceia.unr.edu.ar](mailto:abufager@fceia.unr.edu.ar)

En este trabajo se presenta una generalización del modelo de Onda Distorsionada del Continuo-Estado Inicial Eikonal (CDW-EIS) para la descripción de procesos de captura electrónica simple en colisiones ión - átomo que involucren blancos multielectrónicos. Esta aproximación se desarrolla en el marco del modelo de electrón independiente, dando particular importancia a la representación de los estados ligados y continuos del blanco. Se calculan secciones eficaces totales de captura electrónica simple desde la capa K de He, Ne y Ar por impacto de iones desnudos. También se presentan secciones eficaces diferenciales para la colisión  $H^+ + He$ . Los presentes resultados son comparados con los obtenidos con una versión previa del modelo CDW-EIS y con resultados experimentales.

A generalization of the Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State (CDW-EIS) approximation, for the description of single electron capture in ion-atom collisions involving multielectronic targets is presented. This approximation is developed within the framework of the independent electron model taking particular care on the representation of the bound and continuum targets states. Total cross sections for single electron capture from the K-shell of He, Ne and Ar by impact of bare ions and differential cross sections for the system  $H^+ + He$  are presented. The results are compared to the previous CDW-EIS ones and to experimental data.

## I. INTRODUCCIÓN

En este trabajo se presenta una generalización del modelo de Onda Distorsionada del Continuo-Estado Inicial Eikonal (CDW-EIS) para la descripción de procesos de captura electrónica simple desde blancos multielectrónicos. La presente aproximación, la cual notamos como CDW-EIS II, se desarrolla en el marco del *modelo de electrón independiente*.

En la formulación previa del modelo CDW-EIS (CDW-EIS I) [1], la interacción entre el electrón *activo* y los electrones *pasivos* fue tratada asimétricamente en los canales de entrada y salida. En el canal inicial, fue utilizado un potencial Roothaan-Hartree-Fock [2] para representar al potencial efectivo del blanco. Sin embargo, en el canal final, éste fue reemplazado por un potencial coulombiano de carga efectiva  $\xi_D$ . Esta simplificación introducida para calcular fácilmente las funciones de onda del continuo del átomo blanco, determina que las secciones eficaces sean fuertemente dependientes de la elección de la carga efectiva  $\xi_D$ .

El objetivo del presente trabajo es lograr una descripción adecuada de los estados ligados y continuos del átomo blanco. Para ello, en CDW-EIS II, el potencial generado por el núcleo blanco y los electrones pasivos se representa mediante un único potencial esférico numérico Hartree-Fock-Slater [3] tanto en el canal de entrada como en el de salida. En consecuencia, las funciones de onda ligadas y del continuo del átomo blanco resultan ortogonales. Estas autofunciones son obtenidas resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger monoeléctrica que involucra al potencial modelo.

La presente aproximación CDW-EIS II se aplica al análisis de secciones eficaces totales (SET) para el impacto de iones desnudos sobre He, Ne y Ar.

Para el caso de blancos de He, también se realiza un estudio exhaustivo de secciones eficaces diferenciales (SED) para el impacto de protones a altas energías de impacto. Los presentes resultados se comparan con los obtenidos usando la aproximación CDW-EIS I y con datos experimentales [4-10].

## II. TEORÍA

Consideremos el proceso de captura electrónica simple desde un blanco multielectrónico de carga  $Z_T$  por impacto de un ión desnudo de carga  $Z_P$ . A fin de reducir la descripción de la colisión a un proceso monoeléctrico, asumimos que el electrón *activo* es capturado independientemente de los otros, los *pasivos*, quienes permanecen congelados en su estado inicial a lo largo de todo el proceso de colisión. En consecuencia, debemos resolver, en la aproximación de parámetro de impacto, una ecuación de Schrödinger monoeléctrica definida por el Hamiltoniano:

$$H_{el} = -\frac{1}{2} \nabla_r^2 + V_T(\mathbf{x}) + V_P(\mathbf{s}) + V_{TP}(\mathbf{R}) \quad (1)$$

donde  $\mathbf{s}$ ,  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{r}$  son los vectores posición del electrón *activo* respecto de un sistema de referencia fijo al proyectil, al núcleo blanco y al punto medio del vector internuclear  $\mathbf{R}$ , respectivamente. El potencial  $V_T$  ( $V_P$ ) describe la interacción entre el electrón *activo* y el núcleo blanco residual (proyectil) y  $V_{TP}$  es el potencial estático correspondiente a la interacción entre el blanco residual y el proyectil. Siendo  $\varphi_P\{s_{Pk}\}$  la función de onda correspondiente a los  $N$  electrones pasivos,

$$V_{TP}(\mathbf{R}) = \frac{Z_p Z_T}{R} - \sum_{k=1}^N \left\langle \phi_p \left| \frac{1}{s_{pk}} \right| \phi_p \right\rangle \quad (2)$$

donde  $s_{pk}$  son las coordenadas del  $k$ -ésimo electrón pasivo respecto del proyectil [11]. En la versión prior de la aproximación CDW-EIS, las funciones de onda distorsionada en el canal inicial y final son definidas como:

$$\chi_i^+ = \phi_i(\mathbf{x}) \exp \left( -i \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{r} - i \frac{1}{8} \mathbf{v}^2 t - i \varepsilon_i t \right) L_i^+ \quad (3)$$

$$\chi_f^- = \phi_f(\mathbf{s}) \exp \left( i \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{r} - i \frac{1}{8} \mathbf{v}^2 t - i \varepsilon_f t \right) L_f^- \quad (4)$$

respectivamente, donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad de colisión y  $\phi_i$  ( $\phi_f$ ) la función de onda ligada inicial (final) cuya energía orbital es  $\varepsilon_i$  ( $\varepsilon_f$ ).

En las ecuaciones (3) y (4),

$$L_i^+ = \exp \left( -i \frac{Z_p}{v} \ln(\mathbf{v} \cdot \mathbf{s} + v s) \right) \quad (5)$$

y

$$L_f^- = \exp(-i \mathbf{v} \cdot \mathbf{x}) \Phi_v^-(Z_T, \mathbf{x}) \quad (6)$$

son los factores de distorsión. En CDW-EISII, las funciones de onda ligada  $\phi_i$  y del continuo  $\Phi_v^-(Z_T, \mathbf{x})$  son soluciones de las ecuaciones

$$\left( -\frac{1}{2} \nabla_x^2 + V_T(\mathbf{x}) - \varepsilon_i \right) \phi_i = 0 \quad (7)$$

$$\left( -\frac{1}{2} \nabla_x^2 + V_T(\mathbf{x}) - \varepsilon \right) \Phi_v^-(Z_T, \mathbf{x}) = 0 \quad (8)$$

siendo  $\varepsilon = v^2/2$ . El estado ligado caracterizado por los números cuánticos  $n l m$  y energía de ligadura  $\varepsilon_i$ , es expresado como

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \frac{u_{nl}(x)}{x} Y_{lm}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (9)$$

mientras que la función de onda del continuo es representada como una expansión en ondas parciales

$$\Phi_v^-(Z_T, \mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\pi}{2v}} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l e^{-i\sigma_l} \frac{u_{\varepsilon l}(x)}{x} Y_{l0}(\mathbf{x}) \quad (10)$$

donde  $\sigma_l$  es el desfase. Esta última está normalizada en la escala de energía a través de la condición asintótica

$$u_{\varepsilon l}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\pi}{2v}} \text{sen} \left( v x + \frac{1}{v} \ln(2vx) - \frac{l\pi}{2} + \sigma_l \right) \quad (11)$$

La versión prior de la amplitud de transición  $a_{if}(\rho)$  se expresa como [11],

$$a_{if}(\rho) = -i \exp(2i\Delta(R)) \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\langle \chi_f^- \left| -\frac{1}{2} \nabla_r^2 + V_r(\mathbf{x}) + V_p(\mathbf{s}) - i \frac{\partial}{\partial t} \right| \chi_i^+ \right\rangle \quad (12)$$

donde  $\rho$  es el parámetro de impacto y

$$\exp(2i\Delta(R)) = \exp \left[ -i \int_{-\infty}^{\infty} dt V_{TP}[R(t)] \right] \quad (13)$$

Finalmente, las secciones eficaces diferenciales de captura electrónica simple, pueden expresarse como

$$\frac{d\sigma_{if}}{d\Omega} = (\mu v)^2 \left| \int_0^{\infty} d\rho \rho a_{if}(\rho) J_{\Delta m}(\mu v b \theta) \right|^2 \quad (14)$$

siendo  $\Delta m = m_f - m_i$ , donde  $m_i$  ( $m_f$ ) es el número cuántico magnético correspondiente al estado ligado inicial (final).

Las secciones eficaces totales se calculan como

$$\sigma_{if} = \int d\rho |a_{if}(\rho)|^2 \quad (15)$$

Las funciones radiales  $u_{nl}$ ,  $u_{\varepsilon l}$  y el desfase  $\sigma_l$  se determinan integrando numéricamente la ecuación de Schrödinger radial utilizando el algoritmo de Numerov. El programa ha sido chequeado reproduciendo los resultados CDW-EIS I cuando en el canal final se utiliza un potencial Coulombiano en lugar de un potencial Hartree-Fock-Slater para la descripción de la interacción *electrón activo - blanco residual*.

Las ecuaciones (12) y (15) muestran que el potencial estático  $V_{TP}$ , no afecta el cálculo de secciones eficaces totales. En consecuencia, en el cálculo de este tipo de secciones esta interacción no será considerada.

### III. RESULTADOS Y DISCUSIONES.

La presente generalización del modelo CDW-EIS (CDW-EIS II), se aplica para calcular SED para el sistema  $H^+ + He$  a diferentes energías de impacto y SET desde blancos de Ne y Ar considerando como proyectiles  $H^+$ ,  $He^{2+}$  y  $Li^{3+}$ . Los resultados se comparan con los obtenidos utilizando la versión previa del modelo CDW-EIS (CDW-EIS I) [1] y con resultados experimentales de captura electrónica simple a cualquier estado final [4-9].

Como hemos mencionado previamente, en la aproximación CDW-EIS I la interacción *electrón activo - blanco residual* en el canal final es aproximada por un potencial Coulombiano efectivo de carga  $\xi_D$ . En consecuencia, se obtiene una descripción grosera de los estados continuos del átomo blanco. Es importante notar que las funciones de onda correspondientes a los estados ligados de los blancos estudiados presentan descripciones similares en ambos modelos teóricos. Las secciones eficaces (totales y diferenciales) a cualquier estado final han sido calculadas utilizando la siguiente expresión:

$$\sigma = \sigma_1 + 1.616 \sigma_2 \quad (16)$$

donde  $\sigma_n$  indica la sección eficaz de captura electrónica a todos los estados finales con número cuántico principal  $n$ .

a) Secciones eficaces diferenciales.

En esta sección estudiaremos las SED para el sistema  $H^+ + He$  considerando energías de impacto altas. Para llevar a cabo el cálculo de las SED es necesario determinar antes la expresión de la fase  $\exp(2i\Delta)$  que aparece en la ecuación (12). Esta fase ha sido calculada

por Rivarola et al. [11] para el caso de blancos He en estado fundamental. En este caso la función de onda del electrón pasivo ha sido descrita a través de una función  $5 - z$  Roothaan Hartree Fock

$$\varphi_p(r) = \sum_{i=1}^5 b_i \left( \frac{\lambda_i}{\pi} \right)^{1/2} \exp(-\lambda_i r) \quad (17)$$

(donde los valores  $b_i$  y  $\lambda_i$  han sido calculados por Clementi y Roetti [2]), resultando:

$$\exp(2i\Delta) = \rho^{2i(Z_p-1)Z_p/\nu} \exp \left[ \frac{-8iZ_p}{\nu} \sum_{i,j=1}^5 \alpha_{ij}(\rho) \right] \quad (18)$$

donde

$$\alpha_{ij} = b_i b_j (\lambda_i \lambda_j)^{1/2} \left[ \frac{2K_0 [\rho(\lambda_i + \lambda_j)]}{(\lambda_i + \lambda_j)^2} + \frac{\rho K_1 [\rho(\lambda_i + \lambda_j)]}{(\lambda_i + \lambda_j)^2} \right] \quad (19)$$

Es importante notar que el resultado anterior es válido cuando se utiliza como función de onda del electrón pasivo la expresión (17). Dado que la función de onda correspondiente al estado 1s de He que se obtiene utilizando el modelo CDW-EIS II no presenta diferencias significativas con la obtenida por Clementi y Roetti, utilizaremos la expresión (18) para la fase  $\exp(2i\Delta)$  involucrada en el cálculo de las amplitudes de transición.

En las figuras 1,2 y 3 se muestran las SED de captura electrónica simple a cualquier estado ligado final del proyectil para las energías de colisión: 2820keV, 5420 keV y 7400 keV, respectivamente. Los resultados CDW-EIS II son comparados con datos experimentales [4] y con resultados CDW-EIS I obtenidos utilizando distintos valores de la carga efectiva  $\xi_D$ . Una posible elección de  $\xi_D$  es considerar la carga asintótica  $\xi_D=1$ . Otras posibilidades resultan de utilizar el criterio establecido por Belkić [12] a partir de la energía orbital inicial, tal que  $\xi_D = (-2\varepsilon_i)$  (el cual privilegia la región de orbitación inicial) o asumir que el electrón viaja directamente en un continuo del núcleo blanco en el canal de salida (privilegiando en este caso las colisiones próximas electrón - núcleo blanco).

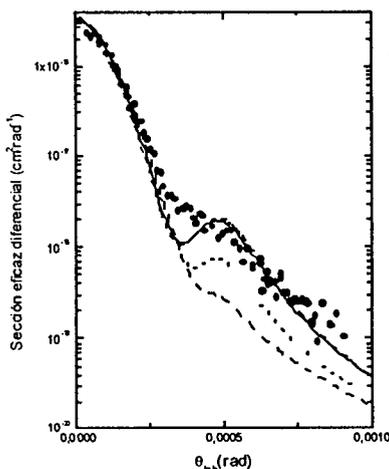


Fig1: SED a cualquier estado final, para  $H^+ + He$  a una energía de impacto  $E=2820keV$  sobre blancos de helio. —CDW-EISII, ---- CDW-EIS I  $\xi_D=1$ , ... CDW-EIS I  $\xi_D=(-2\varepsilon_i)^{1/2}$ , - - - CDW-EIS I  $\xi_D=2$ . • [4].

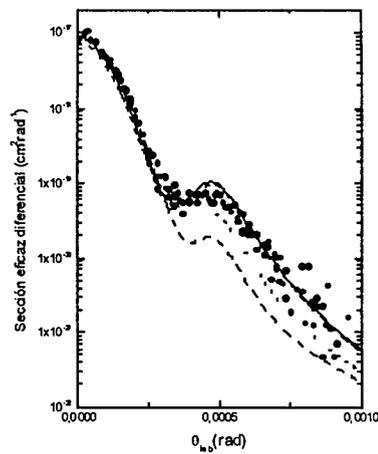


Fig. 2. Idem Fig.1 pero considerando  $E=5420 keV$

Con el objeto de mejorar la comparación teórico - experimental, las SED teóricas han sido convolucionadas de acuerdo a la de resolución de los detectores utilizados al realizar las mediciones [9]. En la región de ángulos pequeños, todos los tratamientos teóricos presentan buen acuerdo con los experimentos. Sin embargo, en las regiones de doble dispersión y ángulos más grandes se observan diferencias significativas entre las distintas aproximaciones. En la región de doble dispersión de Thomas, el electrón es capturado luego de sufrir dos colisiones binarias, la primera con el proyectil y la segunda con el núcleo blanco [13]. En consecuencia, una adecuada descripción del potencial del blanco es crucial ya que durante la segunda colisión binaria el electrón se encuentra moviéndose principalmente bajo su influencia. Los resultados CDW-EIS II mejoran notablemente la descripción de los resultados experimentales respecto a la realizada con los otros modelos teóricos. Además el acuerdo de CDW-EIS II con el caso  $\xi_D=2$  muestra que, durante la segunda colisión binaria, el electrón penetra profundamente en el blanco residual. En la región de grandes ángulos observamos que los cálculos CDW-EIS II presentan un muy buen acuerdo con los datos experimentales.

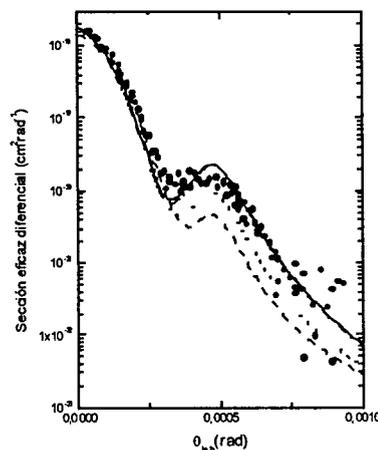


Fig.3 Idem Fig.1 pero considerando  $E=7400keV$ .

b) Secciones eficaces totales.

En la figura 4 se muestran SET de captura electrónica simple a cualquier estado final, para el impacto de protones y partículas alfa sobre blancos de He en estado fundamental. Los cálculos CDW-EIS II y CDW-EIS I (utilizando  $\xi_D = (-2\varepsilon_i)^{1/2}$ ) muestran comportamientos muy similares. Ambos resultados teóricos se encuentran en buen acuerdo con los experimentos [5,6].

En la figura 5 se presentan SET de captura electrónica simple desde la capa K de Ne por impacto de  $H^+$ ,  $He^{2+}$  y  $Li^{3+}$ . El acuerdo entre los cálculos CDW-EIS II y los datos experimentales [7,8] es muy bueno, en todo el rango de energía, mejorando notablemente los resultados CDW-EIS I. La diferencia más significativa entre ambos modelos teóricos ocurre para las energías intermedias.

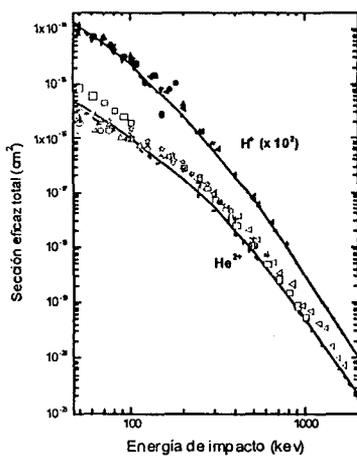


Fig.4: SET a cualquier estado final para el  $H^+$  y  $He^{2+}$  sobre blancos de He. — CDW-EIS II, ...CDW-EIS I, Data experimental extraída de [5,6]

Las SET de captura electrónica simple para el sistema  $H^+ + Ar(1s)$  se muestran en la figura 6. Análogamente al caso de blancos de Ne, los resultados CDW-EIS II se encuentran en un acuerdo notable con los experimentos [9,10] en todo el rango de energías. Nuevamente, la diferencia más significativa entre los resultados CDW-EIS II y CDW-EIS I es observada en el rango de las energías intermedias.

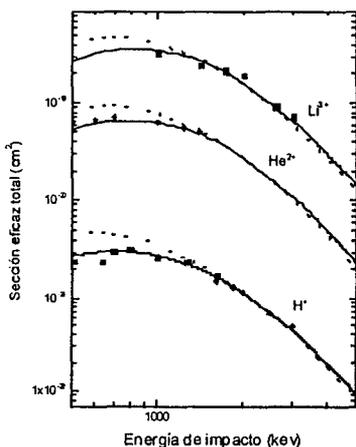


Fig. 5: SED para el impacto de  $H^+$ ,  $He^{2+}$  y  $Li^{3+}$  sobre la capa K de Ne.. — CDW-EIS II, ...CDW-EIS I,  $\nabla$ [7] y  $\blacklozenge$ [8]

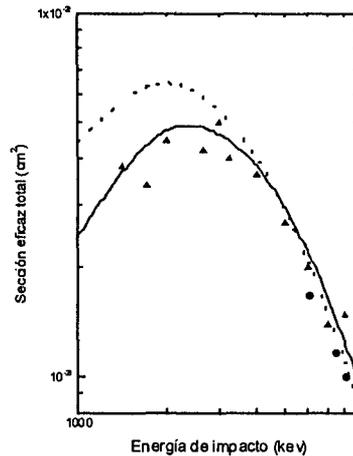


Fig.6: SET a cualquier estado final para el sistema  $H^+ + Ar(1s)$  — CDW-EIS II, ...CDW-EIS I,  $\blacktriangle$ [9] y  $\bullet$ [10]

Utilizando argumentos físicos simples, es posible explicar el comportamiento de las descripciones teóricas empleadas para los distintos sistemas estudiados. El electrón activo en interacción con el proyectil es rápidamente eyectado a un estado del continuo con una longitud de onda  $\lambda = 2\pi/v$  antes de ser capturado. Si  $D$  es el diámetro medio del blanco atómico y si la condición  $\lambda \ll D$  es satisfecha, el electrón actúa como una sonda del potencial del blanco y las SET son más sensibles a su descripción. Esta condición es satisfecha para blancos de Ne y Ar en el rango de las energías intermedias, pero no para blancos de He, donde  $\lambda \gg D$  en todo el rango de energía, y la introducción de una mejor descripción del potencial del blanco no produce cambios significativos en las SET. A energías de impacto suficientemente altas, el tiempo de colisión es tan pequeño que, a pesar de que la condición establecida anteriormente siga siendo válida, no pueden observarse diferencias importantes entre las distintas representaciones del potencial del blanco.

IV. CONCLUSIONES.

En este trabajo se ha presentado una generalización de la aproximación CDW-EIS (CDW-EIS II), para describir la captura electrónica simple desde blancos multieletrónicos. Esta descripción teórica fue desarrollada en el marco del modelo de electrón independiente, considerando representaciones apropiadas de los estados ligados y continuos del átomo blanco.

El presente modelo fue aplicado para estudiar el mecanismo de Thomas en SED para la colisión  $H^+ + He$  a distintas energías de impacto y SET para el impacto de iones desnudos sobre átomos de He, Ne y Ar.

Las secciones eficaces CDW-EIS II proveen una excelente descripción de los experimentos, mejorando notablemente los resultados previos CDW-EIS I, mostrando así la importancia crucial que representa utilizar una adecuada descripción del potencial del

blanco en el marco del modelo CDW-EIS cuando se analizan blancos multielectrónicos.

## V. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue parcialmente financiado por la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (BID 802/OC-AR PICT N° 03-04262) y por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas de la República Argentina.

## Referencias.

[1] Martínez A E, Deco G R, Rivarola P D y Fainstein P D, *Nucl. Instrum. Methods B* **34**, 32 (1988).

[2] Clementi E y Roetti C, *At. Data Nucl. Tables* **14** 177 (1974).

[3] Herman F y Skillman S; *Atomic Structure Calculations* (Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs NJ, 1963).

[4] Horsdal-Pedersen E, Cocke C L y Stockli M; *Phys. Rev Lett.* **50** 1910 (1983).

[5] Wu W K, Huber B A y Wiesemann K 1988 *At. Data Nucl. Data Tables* **40** 57 (1988).

[6] Wu W K, Huber B A y Wiesemann K 1988 *At. Data Nucl. Data Tables* **42** 157 (1989).

[7] Rødbro M, Horsdal Pedersen E, Cocke C L y Macdonald J R, *Phys Rev. A* **19** 1936 (1979).

[8] Cocke C L, Gardner R K, Curnutte B, Bratton T y Saylor T K *Phys Rev A* **16** 2248 (1977).

[9] Horsdal-Pedersen E, Cocke C L, Rasmunssen J L, Varghese S L y Waggoner W, *J. Phys. B:At. Mol. Opt. Phys.* **16** 1799 (1983).

[10] Macdonald J R, Cocke C L and Edison W, *Phys. Rev. Lett.* **32** 648 (1974)

[11] Rivarola R D, Piacentini R D, Salin A y Belkić Dž, *J. Phys. B:At. Mol. Opt. Phys.* **13** 2601 (1980).

[12] Belkić Dž, Gayet R y Salin A, *Phys. Rep* **56** 279 (1979).

[13] Thomas L H, *Proc. R. Soc. (Londres)* **A 114** 561 (1927)