

REACCIONES (e,2e) PARA He^+ y Li^{2+} DESDE ESTADOS EXCITADOS. LEY DE ESCALA.

O.A. Fojón, R.D. Rivarola y C.R. Stia

Instituto de Física Rosario, CONICET-UNR y Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina
e-mail: stia@fceia.unr.edu.ar

En este trabajo se calculan secciones eficaces triple diferenciales de ionización por impacto de electrones rápidos de blancos hidrogenicos desde estados excitados en el marco de la geometría coplanar asimétrica. La función de onda final utilizada es solución aproximada del problema de la dispersión de tres cuerpos con correctas condiciones de contorno salientes. La función de onda inicial también satisface correctas condiciones asintóticas. Se presentan resultados para iones Li^{2+} desde estados excitados ($2s$ y $2p$). Además, se muestra que las secciones eficaces triple diferenciales de ionización de átomos hidrogenicos excitados satisfacen la misma ley de escala que las correspondientes a blancos hidrogenicos en estado fundamental.

In this work, theoretical triply differential cross sections for ionization of several hydrogenic atoms from excited states by fast electron impact are computed in the case of asymmetric coplanar geometry. The final wavefunction is chosen as an approximate solution to the three-body scattering problem with correct asymptotic conditions. The initial wavefunction also satisfies correct boundary conditions. Results for Li^{2+} ions in their $2s$ and $2p$ excited states are presented. In addition, it is shown that a simple scaling law for the triply differential cross sections obtained for ionization of hydrogenic targets from their ground state is also satisfied by excited hydrogenic targets.

I. INTRODUCCIÓN

La ionización de átomos por impacto electrónico resulta de interés en diversos campos de la física. En particular para blancos iónicos sólo existen datos experimentales de secciones eficaces totales y simple diferenciales debido a la dificultad de realizar mediciones de este tipo de reacciones¹⁻³. Este hecho, añade interés especial al estudio de las secciones eficaces triple diferenciales (SE3D) debido a que ellas proveen la mayor información acerca de un proceso de ionización y resultan un buen test para modelos teóricos. En un trabajo reciente (de aquí en adelante I)⁴, se ha estudiado la ionización de átomos hidrogenicos desde su estado fundamental usando una extensión^{5,6} del modelo previamente desarrollado para hidrógeno atómico como blanco (de aquí en adelante BBK)⁷. En el modelo BBK, se utiliza una aproximación de la función de onda final que satisface correctas condiciones de contorno. En la versión extendida de este modelo, se incluye, además, el correcto comportamiento asintótico en el canal inicial de la reacción. En I se obtuvo, además, una sencilla ley de escala para las SE3D.

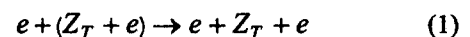
Se han calculado SE3D de ionización de átomos de hidrógeno como blanco por impacto electrónico atómico desde el estado excitado $2s$ utilizando diferentes modelos⁸⁻¹⁰. En particular, Biswas y Sinha⁵ obtuvieron SE3D de ionización de iones He^+ desde los estados $2s$ y $2p$ usando la aproximación BBK extendida.

En este trabajo, se calculan SE3D de ionización de diferentes átomos hidrogenicos excitados ($2s$ y $2p$)

por impacto de electrones rápidos en la geometría coplanar asimétrica. Además, se estudia para estados iniciales excitados del blanco, la validez de la ley de escala derivada en I para átomos hidrogenicos en estado fundamental. En este trabajo se utilizan unidades atómicas salvo especificación contraria.

II. TEORÍA

La reacción bajo estudio es



con Z_T y M_T la carga nuclear y la masa del blanco, respectivamente. Es este trabajo, se consideran estados excitados $2l$ para los blancos hidrogenicos.

La SE3D en geometría coplanar asimétrica está dada por (a las energías consideradas en este trabajo se desprecian los efectos relativistas y de intercambio),

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_b} = (2\pi)^4 \frac{k_a k_b}{K_i} |T_{if}|^2 \quad (2)$$

donde K_i , k_a y k_b son los momentos de los electrones incidente, dispersado y eyectado, respectivamente, medidos desde el centro de masas del sistema. Ω_a y Ω_b representan los ángulos sólidos correspondientes a los dos electrones en el canal final y E_b la energía del electrón eyectado.

El elemento de matriz de transición en la versión *prior* viene dado por

$$T_{if} = \langle \Psi_f^- | V_i | \Psi_i \rangle \quad (3)$$

donde Ψ_f^- y Ψ_i son las funciones de onda final e inicial, respectivamente, con correctas condiciones de contorno y V_i es la perturbación en el canal inicial.

La función de onda inicial Ψ_i se elige como el producto de una función de onda del continuo coulombiano y la función de onda del estado ligado, esto es,

$$\Psi_i(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = F_c(\mathbf{K}_i, \mathbf{r}_a) \varphi(\mathbf{r}_b) \quad (4)$$

donde \mathbf{r}_a y \mathbf{r}_b representan los vectores posición del electrón incidente y eyectado, respectivamente, en un sistema de referencia fijo al núcleo blanco (el eje z se toma en la dirección de incidencia).

Para obtener los estados ligados excitados, se define la siguiente función generatriz:

$$\varphi_g(\mathbf{r}) = (Z_T^3 / \pi)^{1/2} \exp(-ar - i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}) \quad (5)$$

y los estados requeridos, se obtienen por derivación paramétrica,

$$\varphi_j(\mathbf{r}) = D_j \varphi_g(\mathbf{r}) \quad (j = 2s, 2p_0, 2p_{\pm 1}) \quad (6)$$

donde

$$D_{2s} = \left(P \frac{\partial}{\partial a} + Q \right) \Big|_{a=Z_T/2, b=0}$$

$$D_{2p_0} = +iP \frac{\partial}{\partial b_z} \Big|_{a=Z_T/2, b=0} \quad (7)$$

$$D_{2p_{\pm 1}} = \mp (P/\sqrt{2}) \left(\frac{\partial}{\partial b_x} \pm \frac{\partial}{\partial b_y} \right) \Big|_{a=Z_T/2, b=0}$$

con $Q = \sqrt{2}/4$ y $P = Z_T / (4\sqrt{2})$.

El electrón incidente está representado por la función de onda del continuo coulombiano $F_c(\mathbf{K}_i, \mathbf{r}_a)$ dada por

$$F_c(\mathbf{K}_i, \mathbf{r}_a) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_a) \times \exp(-\pi\alpha_i / 2) \Gamma(1 + i\alpha_i) \times {}_1F_1(-i\alpha_i; 1; i(K_i r_a - \mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_a)) \quad (8)$$

donde $\alpha_i = -(Z_T - 1) / K_i$. Esta función de onda tiene en cuenta el largo alcance de la interacción coulombiana entre el electrón incidente y el átomo hidrogeno blanco.

La interacción residual proyectil-blanco V_i es entonces

$$V_i = \frac{1}{r_{ab}} - \frac{1}{r_a} \quad (9)$$

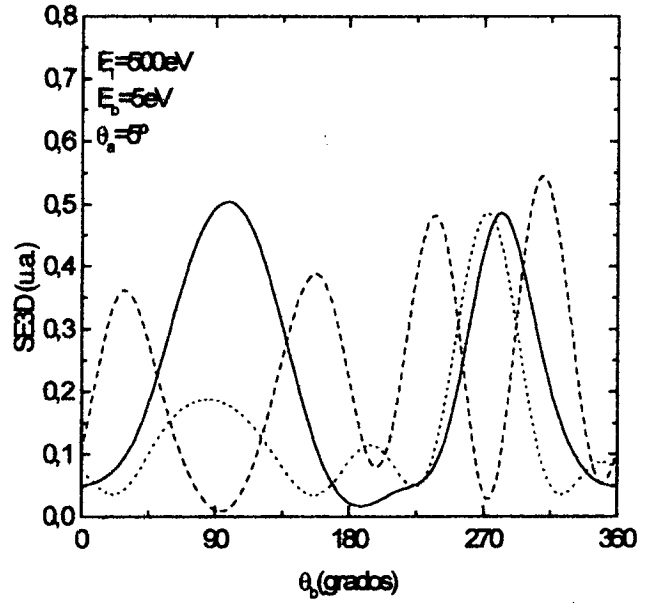


Figura 1. Secciones eficaces triple diferenciales de ionización de Li^{2+} en el modelo BBK extendido. Las energía de incidencia y de eyección son, respectivamente, 500 eV y 5 eV y el ángulo de dispersión $\theta_a = 5^\circ$. Curva continua, estado inicial $2s$. Curva de trazos, estado inicial $2p_0$. Curva de puntos, estado inicial $2p_1$.

con $\mathbf{r}_{ab} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$. Esta interacción decae asintóticamente a cero más rápidamente que un potencial coulombiano.

La función de onda final Ψ_f^- , en el modelo BBK, se aproxima como

$$\Psi_f^- \cong (2\pi)^{-3} \exp(i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a + i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}_b) \times C(\alpha_{PT}, \mathbf{k}_a, \mathbf{r}_a) C(\alpha_{eT}, \mathbf{k}_b, \mathbf{r}_b) \times C(\alpha_{eP}, \mathbf{k}_{ab}, \mathbf{r}_{ab}) \quad (10)$$

$C(\alpha, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ representan los factores de Coulomb y vienen dados por la siguiente expresión

$$C(\alpha, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = \Gamma(1 - i\alpha) \exp(-\pi\alpha / 2) \times {}_1F_1(i\alpha; 1; -i(kr + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) \quad (11)$$

donde los parámetros de Sommerfeld α_{PT} , α_{eT} y α_{eP} , están definidos como sigue

$$\alpha_{PT} = -Z_T / k_a \quad (12)$$

$$\alpha_{eT} = -Z_T / k_b \quad (13)$$

$$\alpha_{eP} = 1 / 2k_{ab} \quad (14)$$

Finalmente, el elemento de matriz T_{if} , queda

$$T_{if} = (2\pi)^{-9/2} N \left(\frac{Z_T^3}{\pi} \right)^{1/2} \iint d\mathbf{r}_a d\mathbf{r}_b e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_a - i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_a - i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}_b} \times {}_1F_1(-i\alpha_i; 1; i(\mathbf{K}_i \mathbf{r}_a - \mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_a)) \times {}_1F_1(-i\alpha_{eT}; 1; i(\mathbf{k}_b \mathbf{r}_b + \mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}_b)) \times {}_1F_1(-i\alpha_{eP}; 1; i(\mathbf{k}_{ab} \mathbf{r}_{ab} + \mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{r}_{ab})) \times {}_1F_1(-i\alpha_{pT}; 1; i(\mathbf{k}_a \mathbf{r}_a + \mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a)) \times \left(\frac{1}{r_{ab}} - \frac{1}{r_a} \right) D_j(\exp(-a r_b - i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_b)) \quad (13)$$

con

$$N = \Gamma(1 + i\alpha_{eT}) \Gamma(1 + i\alpha_{eP}) \times \Gamma(1 + i\alpha_{pT}) \Gamma(1 + i\alpha_i) \times e^{-\frac{\pi}{2}(\alpha_e + \alpha_e + \alpha_p + \alpha_i)} \quad (14)$$

Los valores particulares de los parámetros a y b son tomados después de realizar la integración dada por la ecuación (13).

En I se derivó una ley de escala para las SE3D de ionización de iones hidrogenicos desde el estado fundamental. Esta ley es válida en el marco de la geometría coplanar asimétrica para energías de incidencia y carga nuclear suficientemente grandes. Se puede mostrar fácilmente que la derivación de esta ley de escala no se ve alterada cuando se consideran estados iniciales excitados de los iones blanco, obteniéndose exactamente el mismo resultado.

De acuerdo a esto, las SE3D de ionización de átomos hidrogenicos excitados, en la aproximación BBK extendida, verifican la siguiente relación

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_b} (Z_{T2}, E_i^{(Z_{T2})}, E_b^{(Z_{T2})}) = \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^6 \times \frac{d^3\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_b} \left(Z_{T1}, \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^2 E_i^{(Z_{T2})}, \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^2 E_b^{(Z_{T2})} \right) \quad (15)$$

Los superíndices indican que las magnitudes involucradas corresponden al impacto de un electrón sobre un blanco de carga nuclear Z_T .

III. RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se calcularon SE3D de ionización por impacto de electrones de distintos átomos hidrogenicos inicialmente en estados excitados $2l$ en el marco de la geometría coplanar asimétrica. Para obtener las SE3D se adaptó la técnica de cálculo utilizada en I. Además, con el objeto de simplificar los cálculos numéricos, se tomó en la ecuación (8) el parámetro $\alpha_i = 0$, aproximación también realizada en I. A las energías consideradas en este trabajo, las SE3D no se ven mayormente modificadas por esta aproximación debido a

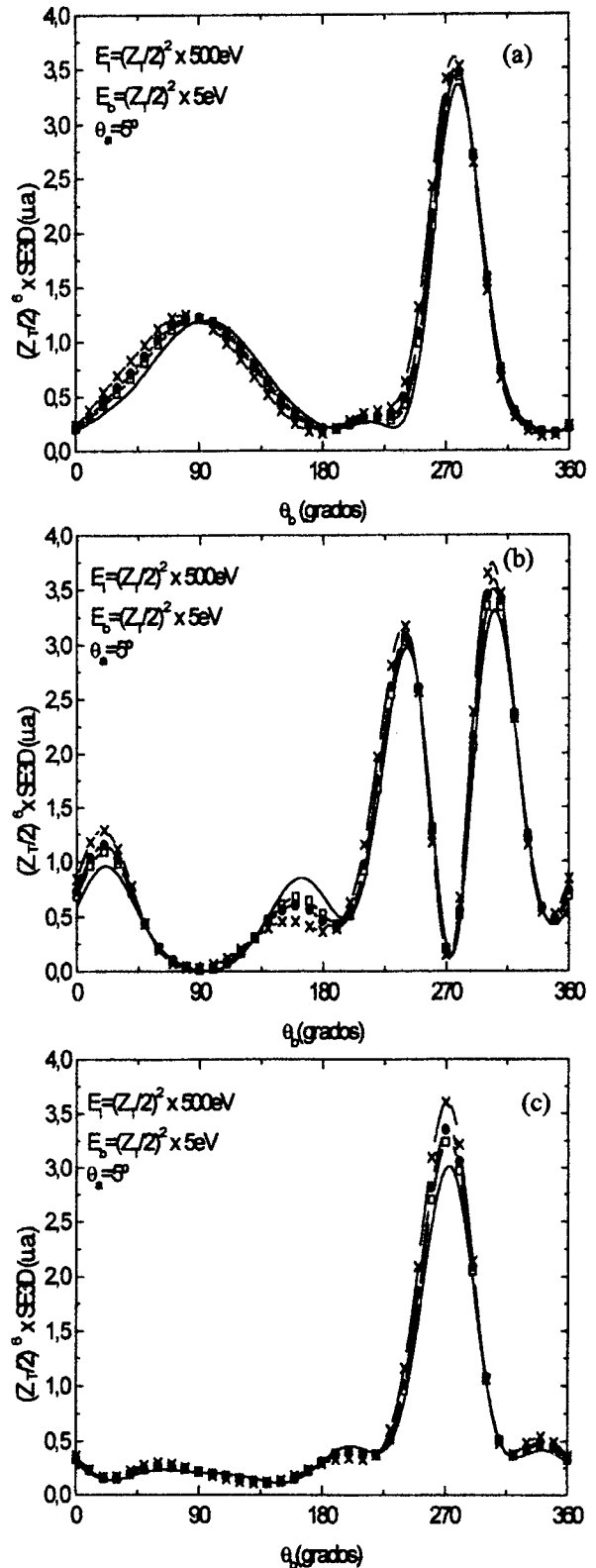


Figura 2. SE3D de ionización por impacto de electrones como función del ángulo de eyección. Energía de incidencia $E_i = (Z_T/2)^2 \times 500\text{eV}$, energía de eyección $E_b = (Z_T/2)^2 \times 5\text{eV}$ y ángulo de dispersión $\theta_a = 5^\circ$. a) Estado inicial $2s$. He^+ , —. Li^{2+} , $-\square-$. Be^{3+} , $-\bullet-$. Ca^{19+} , $-x-$. b) Idem a) pero estado inicial $2p_0$. c) Idem a) pero estado inicial $2p_1$.

que la influencia de la interacción de largo rango en el canal inicial es más importante a bajas energías de incidencia⁶. Por el contrario, es necesaria la inclusión de la interacción proyectil-electrón en el canal final debido a que su contribución es aún importante a altas energías de impacto⁶.

En la Figura 1, se presentan SE3D correspondientes a iones Li^{2+} a una energía de incidencia $E_i = 500eV$, energía de eyección $E_b = 5eV$ y ángulo de dispersión $\theta_a = 5^\circ$ fijo.

En el caso de estado inicial $2s$ del ion blanco, las SE3D presentan la bien conocida doble estructura angular de picos (binario y de retroceso) con algunas estructuras adicionales en la región próxima al pico binario, aproximadamente 210° . Este comportamiento también fue hallado para el caso de la ionización de átomos de H desde el estado inicial metaestable $2s^{8,10}$. Se observa que la dependencia angular de las SE3D es similar a las encontradas para iones He^+ como blancos⁵ aunque se observa que el pico de retroceso es más pronunciado ahora probablemente debido a la fuerte dispersión elástica desde el núcleo más pesado.

Secciones eficaces parciales para los subniveles $2p_0$ y $2p_1$ también se incluyen en la Figura 1 (en geometría coplanar, los resultados para $2p_1$ coinciden con los correspondientes para $2p_0$). En este caso, se evidencian diferentes estructuras superpuestas a los picos binario y de retroceso. Las mismas pueden atribuirse a la forma de la distribución de carga de los subniveles las cuales darían lugar a direcciones preferenciales de ionización. Entonces, el perfil de las SE3D para el estado inicial $2p_0$ presenta mínimos a aproximadamente 90° y 270° , esto es, en las direcciones perpendiculares a la de incidencia. Se remarca que un mínimo en las SE3D para el $2p_0$ corresponde a un máximo en las respectivas secciones para el $2p_1$.

Los presentes resultados de SE3D para He^+ (no mostrados aquí) muestran buen acuerdo con los obtenidos por Biswas y Sinha⁵. Este hecho indica que la aproximación $\alpha_i = 0$ realizada es adecuada en la geometría y régimen energético aquí considerados.

En la Figura 2 se presentan SE3D para blancos con carga nuclear $Z_T = 2,3,4$ en la aproximación BBK extendida. Se muestra, además, la SE3D correspondiente a $Z_T = 20$ considerada como límite para carga nuclear grande. La energía de incidencia es $E_i = (Z_T / 2)^2 \times 500eV$, la energía de eyección es $E_b = (Z_T / 2)^2 \times 5eV$ y el ángulo de dispersión $\theta_a = 5^\circ$. Puede verse que las SE3D satisfacen la ley de escala en casi todo el dominio angular. Algunas diferencias se evidencian en la región de los picos binario y de retroceso pero es de esperar que el acuerdo mejore a altas energías de impacto donde la validez de la ley de escala también mejora⁴.

IV. 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 - Peart, B., Walton, D.S. y Dolder, K.T., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **2**, 1347 (1969).
- 2 - Defrance, P., Brouillard, F., Claeys, W. y van Wassenhove, G., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14**, 103 (1981).
- 3 - Tinschert, K., Müller, A., Hofmann, G., Huber, K., Becker, R., Gregory, D.C. y Salzborn, E., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 531 (1989).
- 4 - Stia, C.R., Fojón, O.A. y Rivarola, R.D., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33**, 1211 (2000).
- 5 - Biswas, R. y Sinha C., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30**, 1589 (1997).
- 6 - Jia, X., Shi, Q., Chen, Z., Chen, J. y Xu, K., *Phys. Rev. A* **55**, 1971 (1997).
- 7 - Brauner, M., Briggs, J.S. y Klar, H., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265 (1989).
- 8 - Vučić, S., Potvliege, R.M. y Joachain, C.J., *Phys. Rev. A* **35**, 1446 (1987).
- 9 - Ray, H. y Roy, A.C., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 3243 (1988).
- 10 - Hafid, H., Joulakian, B. y Dal Capello, C., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 3415 (1993).

CEILAP
CITEFA - CONICET
ZUFRIATEGUI Y VARELA
1603 VILLA MARTELLI
REPUBLICA ARGENTINA