

CAPTURA ELECTRÓNICA DESDE ESTADOS EXCITADOS DE HIDRÓGENO POR IMPACTO DE IONES DESNUDOS

P.N. Abufager, H.F. Busnengo*, A.E. Martínez y R.D. Rivarola

Instituto de Física Rosario CONICET-UNR y Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, UNR, Rosario, Argentina

*Laboratoire de Physico-Chimie Moléculaire, Université de Bordeaux I, Talence, Francia.

e-mail: abufager@fceia.unr.edu.ar

Se estudian teóricamente procesos de captura electrónica desde los blancos excitados H(2s) y H(2p) por impacto de protones y partículas alfa, a energías intermedias y altas, empleando las aproximaciones de Onda Distorsionada del Continuo, de Onda Distorsionada del Continuo- Estado Inicial Eikonal y de Onda Distorsionada del Continuo- Estado Final Eikonal. Se usa una prescripción que permite seleccionar la aproximación que debe emplearse para un determinado sistema, de acuerdo al grado de simetría de la colisión. Se calculan secciones eficaces totales y parciales, y se comparan con otros resultados teóricos existentes. Se estudia además la influencia de la polarización de los estados iniciales 2p en las secciones eficaces totales

Single electron capture from excited H(2s) and H(2p) targets by protons and alpha particles, at intermediate and high collision energies, are theoretically studied using the Continuum Distorted Wave, the Continuum Distorted Wave - Eikonal Initial State and the Continuum Distorted Wave - Eikonal Final State approximations. A prescription to select the model that should be employed, according to the asymmetric character of the collision system is used. Total and partial cross sections are calculated and compared with other theoretical results. The influence of the polarization of the initial 2p states on the cross sections is analyzed.

I. INTRODUCCIÓN

En el presente trabajo se estudian procesos de captura electrónica por impacto de protones, y partículas alfa sobre átomos de hidrógeno en estados excitados de capa $n_i=2$ (con n_i el número cuántico principal del estado ligado inicial), a energías intermedias ($v \sim v_e$, siendo v y v_e la velocidad de impacto y la mayor de las velocidades orbitales electrónicas inicial o final, respectivamente) y altas ($v > v_e$).

Estos procesos son de interés en la interpretación de fenómenos físicos que tienen lugar en gases astrofísicos y plasmas de fusión controlada^[1,2].

Las reacciones son teóricamente estudiadas utilizando la versión de parámetro de impacto de las aproximaciones Onda Distorsionada del Continuo (CDW)^[3], Onda Distorsionada del Continuo-Estado Inicial Eikonal (CDW-EIS)^[4] y Onda Distorsionada del Continuo-Estado Final Eikonal (CDW-EFS)^[5]. En la aproximación CDW las funciones de onda de los estados ligados inicial y final son distorsionadas por factores del continuo asociados con las interacciones e-proyectil y e-núcleo blanco en los canales inicial y final, respectivamente. En el modelo CDW-EIS (CDW-EFS) la función de onda del estado ligado inicial (final) es distorsionada por una fase eikonal que aproxima a distancias

suficientemente largas el factor del continuo correspondiente a la interacción e-proyectil (e- blanco), mientras que el estado ligado final (inicial) es distorsionado como en el modelo CDW. Es interesante analizar la simetría de las aproximaciones utilizadas. La aproximación CDW considera en iguales condiciones las distorsiones introducidas por el proyectil en el canal de entrada y por el blanco en el canal de salida, resultando un modelo simétrico. Por el contrario, el modelo asimétrico CDW-EIS (CDW-EFS) es adecuado para describir reacciones en las cuales la interacción e-blanco (e-proyectil) juega un rol más importante durante la colisión que la interacción e-proyectil (e-blanco).

Busnengo et al.^[5], introdujeron una prescripción para sistemas monoeléctricos que permite seleccionar cual de las aproximaciones resulta adecuado utilizar para la descripción teórica de una determinada reacción. Se define un coeficiente de asimetría α , como $\alpha = Z_p^3 n_i^2 / Z_T^3 n_f^2$ donde Z_T (Z_p) es la carga del blanco (proyectil) y n_f es el número cuántico principal del estado final. La prescripción establece que: si $\alpha < 1$ ($\alpha > 1$) debe ser utilizada la aproximación asimétrica CDW-EIS (CDW-EFS) y si $\alpha \sim 1$ debe ser empleado el modelo CDW. En ese mismo trabajo se presentó un cálculo combinado de estas aproximaciones de acuerdo con este parámetro α . La validez de esta prescripción ha sido

verificada para procesos de captura desde el estado 1s por comparación con resultados experimentales. Es objetivo del presente trabajo es verificar su validez para captura electrónica desde estados excitados. En ausencia de datos experimentales para las reacciones estudiadas, los resultados obtenidos son comparados con otros resultados teóricos correspondientes a los modelos perturbativos Eikonal-Impulsivo (EI) y de Onda Distorsionada del Continuo (CDW)^[6], con cálculos provenientes del método de Canales acoplados (CC)^[7] y cálculos de Trayectorias Clásicas Monte Carlo^[8].

II. TEORIA

En esta sección presentamos una breve descripción teórica de los diferentes modelos utilizados.

Los estados ligados inicial y final están dados por las siguientes expresiones.

$$\Phi_i = \phi_i(r_T) \exp(i(-E_i t - \frac{1}{2} v \cdot r - \frac{1}{8} v^2 t)) \quad (1)$$

$$\Phi_f = \phi_f(r_P) \exp(i(-E_f t + \frac{1}{2} v \cdot r - \frac{1}{8} v^2 t)) \quad (2)$$

siendo ϕ_i (ϕ_f) el estado ligado inicial (final) y E_i (E_f) la correspondiente energía.

Las funciones de onda distorsionada se expresan como el simple producto:

$$\chi_{i,f} = L_{i,f} \Phi_{i,f} \quad (3)$$

En la ec. (3), se eligen las distorsiones:

$$L_i = \exp(i v \ln(v R - v^2 t)) \exp(-i v_i (\ln(v r_P + v \cdot r_P))) \quad (4)$$

o

$$L_i = \exp(\pi v_i / 2) \exp(i v \ln(v R - v^2 t)) \Gamma(1 - i v_i) {}_1F_1(i v_i, 1, i(v r_P - v \cdot r_P)) \quad (5)$$

y

$$L_f = \exp(-i v \ln(v R + v^2 t)) \exp(i v_f (\ln(v r_T + v \cdot r_T))) \quad (6)$$

o

$$L_f = \exp(\pi v_f / 2) \exp(-i v \ln(v R + v^2 t)) \Gamma(1 - i v_f) {}_1F_1(-i v_f, 1, -i(v r_T + v \cdot r_T)) \quad (7)$$

con $v = Z_p Z_T / v$, $v_i = Z_p / v$, $v_f = Z_T / v$

De acuerdo con lo discutido en la sección previa, la aproximación CDW resulta eligiendo las distorsio-

nes (5) y (7), el modelo CDW-EIS es obtenido considerando las distorsiones (4) y (7) y en la aproximación CDW-EFS son utilizadas las distorsiones (5) y (6) para definir las funciones de onda distorsionada.

La amplitud de transición a_{if} en primera aproximación viene dada por la expresión:

$$a_{if}(\rho, v) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \langle \chi_f | H_{el} - i \partial / \partial t | \chi_i \rangle \quad (8)$$

y la sección eficaz total σ se obtiene integrando la ec. (8) para todos los valores posibles del parámetro de impacto ρ .

$$\sigma = \int |a_{if}|^2 d\rho \quad (9)$$

III. RESULTADOS Y DISCUSIONES

Las secciones totales han sido teóricamente calculadas utilizando la relación [8]:

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + 2.561 \sigma_4$$

donde σ_f es la sección eficaz parcial de captura a la capa con número cuántico principal $n_f = 1, 2, 3, 4$.

La utilización de nuestras aproximaciones es válida si $v > v_c$. En consecuencia cuando se consideran como proyectiles partículas alfa, las comparaciones entre nuestros resultados y los obtenidos con la aproximación CC son solo *cualitativas*.

En las figuras 1 y 2 (3 y 4) se presentan secciones eficaces de captura electrónica desde el estado inicial 2s (2p) de hidrógeno por impacto de protones y partículas alfa, respectivamente. Las figuras (a) muestran secciones eficaces totales, mientras que las (b) corresponden a secciones eficaces parciales.

En la figura 1(a), los resultados provenientes del cálculo combinado presentan un excelente acuerdo con los cálculos de CC para el rango más bajo de las velocidades consideradas. Por el contrario, los cálculos CTMC sobrestiman estos últimos. Los resultados CC fueron obtenidos utilizando trece estados atómicos en cada centro nuclear para el impacto de protones, y veinticinco estados ligados al proyectil y trece estados ligados al blanco para partículas alfa. Cuando la energía de colisión aumenta la sección eficaz del cálculo combinado y las correspondientes a las aproximaciones CDW y EI muestran un muy buen acuerdo. En la figura 1(b) se observa que para $v < 2$ la captura a la capa $n_f = 2$ es la dominante. Sin embargo, cuando la velocidad de impacto se incrementa predomina la captura al estado fundamental. Para partículas alfa (figura 2 (a)) los resultados del cálculo combinado subestiman

a los de la aproximación CC, mostrando los resultados de EI un mejor acuerdo con estos últimos para las energías más bajas. En este caso los resultados de CTMC poseen un excelente acuerdo con los de CC. En el rango de las altas energías las secciones obtenidas con las aproximaciones CDW, EI y el cálculo combinado muestran comportamientos similares. En la figura 2 (b), se observa que para $v < 1$ la mayor contribución a la sección eficaz total proviene de la captura a las capas $n_f = 3, 4$ pero si $v > 1$ la captura a $n_f = 2$ da contribuciones similares a estas últimas y para $v > 3$ domina la captura al estado fundamental.

En la figura 3 (a) se observa que cuando la velocidad de impacto decrece el mejor acuerdo con los cálculos de CC es producido por los resultados del cálculo combinado. Los cálculos de CDW acuerdan también con los de CC y los correspondientes al modelo EI subestiman a estos últimos aproximadamente en un orden de magnitud. Cuando la velocidad aumenta los resultados del cálculo combinado yacen entre los de las aproximaciones CDW y EI, presentando asintóticamente los tres modelos el mismo comportamiento con la velocidad. El comportamiento de las secciones eficaces parciales mostrado en la figura 3 (b), es análogo al observado para protones impactando sobre H (2s). Para partículas alfa impactando sobre H (2p) (fig 4 (a)), se observa que cuando la velocidad decrece, el mejor ajuste a los resultados de la aproximación CC es producido por los del cálculo combinado. Cuando la energía de colisión se incrementa las secciones eficaces obtenidas con las aproximaciones CDW, EI y el cálculo combinado muestran algunas diferencias. Sin embargo es necesario remarcar que las aproximaciones CDW-EIS y CDW-EFS poseen comportamientos asintóticos de alta velocidad diferentes a los modelos EI y CDW^[5, 6]. En la fig. 4 (b), se observa que para $v < 1.5$ la mayor contribución a la sección eficaz total proviene de la captura a $n_f = 3, 4$, si $v > 1.5$ la sección parcial de $n_f = 2$ da contribuciones similares a estas últimas y para $v > 3$ comienza a ser dominante la captura a $n_f = 1$.

Definimos como σ_z a la sección eficaz total de captura desde un estado polarizado linealmente respecto al haz partículas incidentes, como σ_{xy} a la sección eficaz total de captura desde un estado polarizado perpendicularmente y con σ_{2p} la sección eficaz total de captura desde un estado no polarizado. Las secciones σ_{xy} y σ_p se calculan a partir de las siguientes expresiones:

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{2} (\sigma_x + \sigma_y) \quad (10)$$

$$\sigma_{2p} = \frac{1}{3} \sigma_z + \frac{2}{3} \sigma_{xy} \quad (11)$$

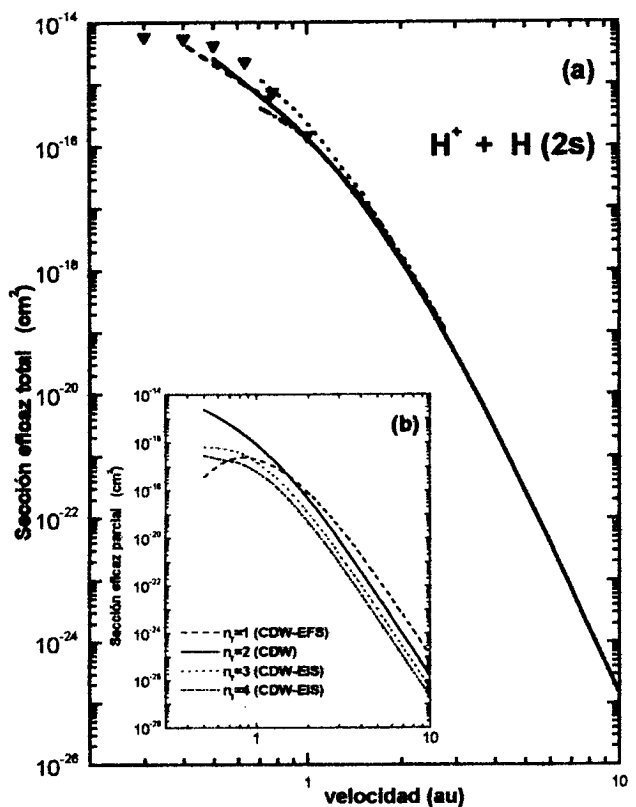


Fig. 1. (a) Sección eficaz total de captura electrónica para el impacto de protones sobre H(2s). ---- CC, CDW, -.-.- EI, — Cálculo combinado, ▼ CTMC
(b) Secciones eficaces parciales de captura electrónica.

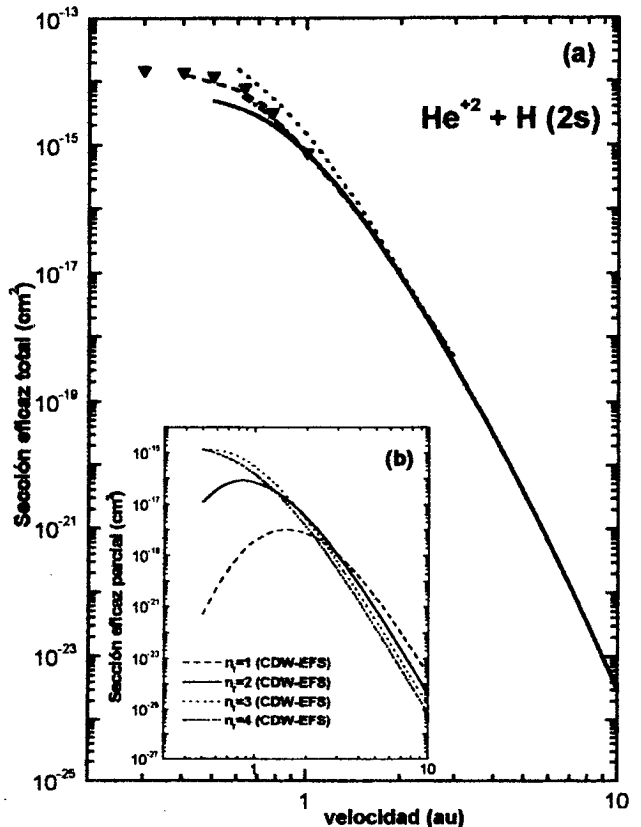


Fig. 2. Idem Fig. 1 pero considerando como proyectiles He²⁺

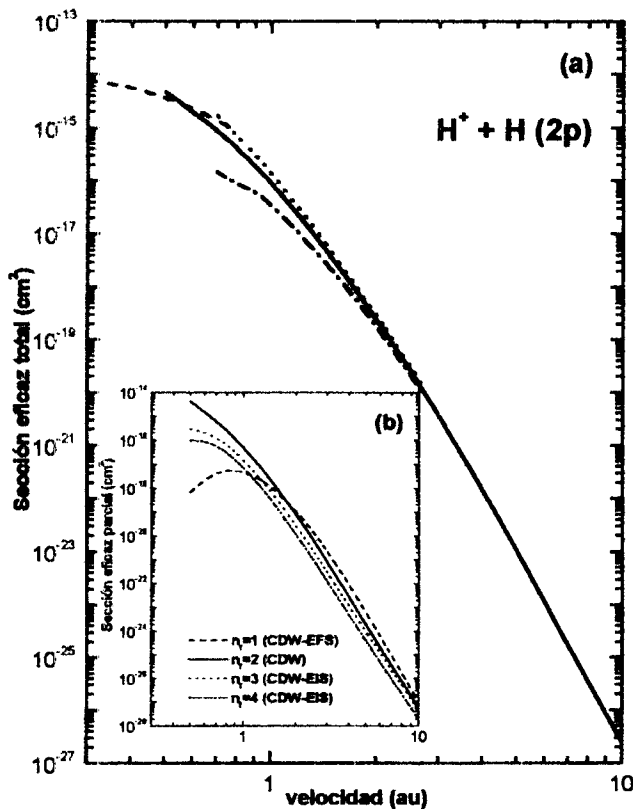


Fig. 3. Idem Fig. 1 pero considerando como blanco H(2p)

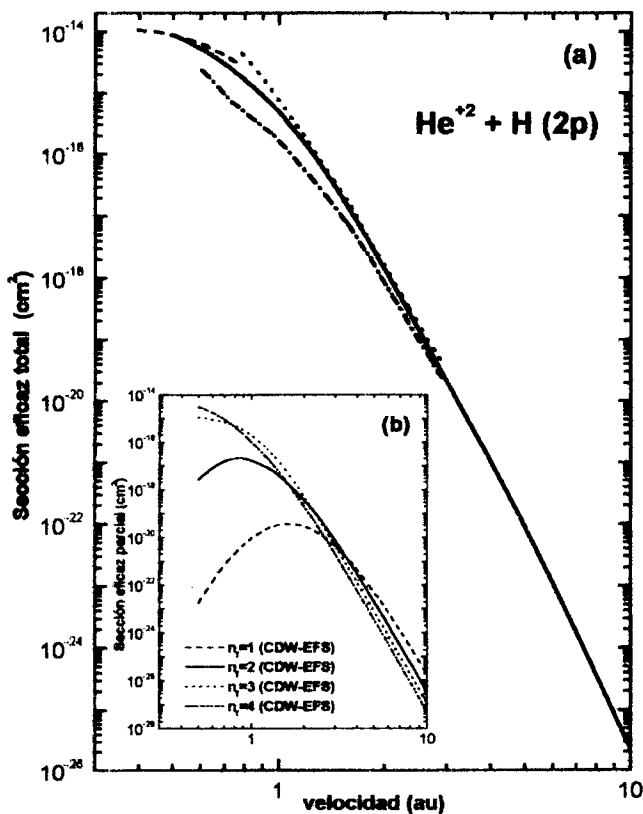


Fig. 4. Idem Fig. 3 pero considerando como proyectiles partículas alfa.

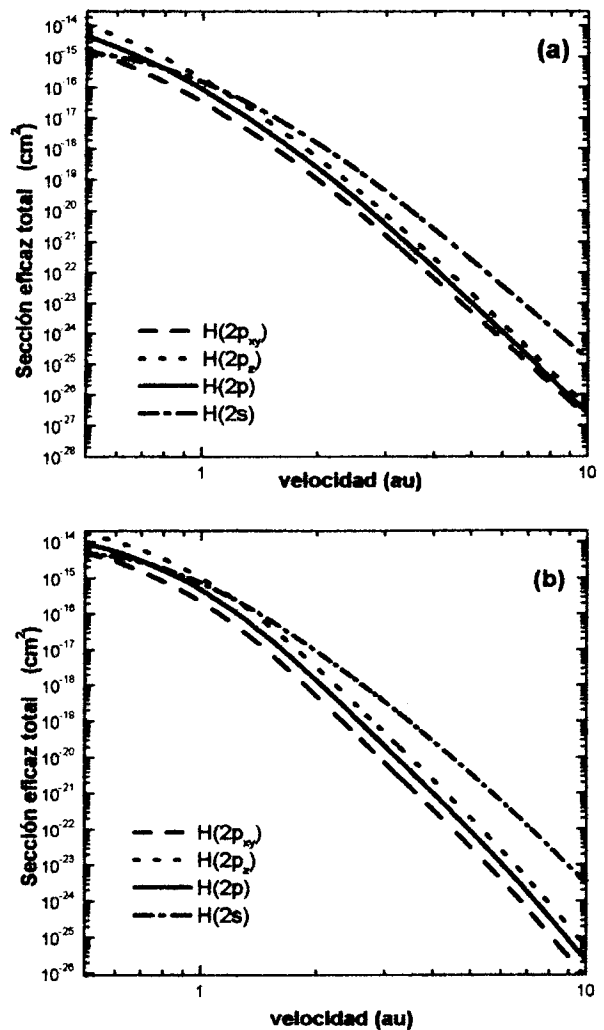


Fig. 5 Secciones eficaces de captura electrónica para el impacto de (a) protones, (b) partículas alfa sobre H(2s), H(2p_z), H(2p_y) y H(2p_x).

En las figuras 5 (a) y 5 (b) se observa que entre los estados polarizados 2p, el proceso de captura que predomina es aquel correspondiente a un estado inicial de polarización paralela al haz incidente. Esto es consecuencia de que en el estado 2p_z el electrón se encuentra moviéndose sobre orbitales atómicos orientados sobre el eje z, en cambio para el estado 2p_{xy} se mueve sobre un plano perpendicular al haz, lo cual dificulta el proceso de captura. La sección eficaz total de captura desde un estado inicial no polarizado yace entre las secciones totales correspondientes a la captura desde estados iniciales polarizados lineal y perpendicularmente al haz de partículas incidentes. Cuando la velocidad de impacto se incrementa se observa que, tanto para protones como para partículas alfa, la sección eficaz total de captura desde un estado inicial 2s comienza a ser comparable con la de un estado inicial 2p

polarizado paralelamente al haz incidente, en efecto para $v > 1.2$, predomina el proceso de captura desde un estado inicial $2s$.

IV. CONCLUSIONES.

Se calcularon secciones eficaces totales y parciales de captura electrónica para impacto de protones sobre átomos de hidrógeno en estados excitados pertenecientes a la capa $n_i = 2$. Las reacciones fueron teóricamente estudiadas empleando las aproximaciones CDW, CDW-EIS y CDW-EFS y utilizando una prescripción que permite seleccionar la aproximación adecuada para describir un determinado proceso de colisión según la simetría de la misma. De la comparación con otros resultados teóricos se observa que la prescripción puede ser aplicada para el caso de captura desde estados excitados de un blanco monoeléctrico.

REFERENCIAS

- [1] Seaton, M. J., Rep. Prog. Phys. **23**, 313 (1960).
- [2] Osterbrock, D. E., Ann. Rev. Astron. Astrophys. **2**, 95 (1964).
- [3] Chesire, I. M., Proc. Phys. Soc. **84**, 89 (1964).
- [4] Martínez, A. E., Deco, G. R., Rivarola y R. D., Fainstein, P. D., Nucl. Instrum. Meth. **B 34**, 32 (1988).
- [5] Busnengo, H. F., Martínez, A. E. Y Rivarola, R. D., Phys. Scripta **51**, 190 (1995).
- [6] Montanari, C. C., Gravielle, M. S. y Miraglia, J. E., Phys. Scripta **56**, 279 (1997).
- [7] Ery, B. D., Chen, Z., Lin, C. D y Piacentini, R. D., J. Phys. B **26**, 1579 (1993).
- [8] Blanco, S. A., Falcón, C. A., Reinhold, C. O. y Piacentini, R. D., J Phys. B **19**, 3495 (1986).