

Ionización simple por impacto electrónico de átomos hidrogénicos. 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, FCEIA, UNR
Av. Pellegrini 250 - (2000) Rosario - Argentina
e-mail: stia@ifir.ifir.edu.ar

En este trabajo se estudia teóricamente la ionización de blancos hidrogénicos mediante impacto de electrones rápidos utilizando una aproximación de la función de onda final exacta, introducida por M. Brauner, J. S. Briggs y H. Klar¹. Esta función de onda es solución aproximada del problema de dispersión de tres cuerpos con correctas condiciones asintóticas salientes. Se obtiene una sencilla ley de escala para las secciones eficaces triplemente diferenciales correspondientes.

In this work, ionisation of hydrogenic targets by impact of fast electrons is studied theoretically by using an approximation to the exact final wavefunction, introduced by M. Brauner, J. S. Briggs y H. Klar¹. This wavefunction is an approximated solution to the three-body scattering problem with correct asymptotic behaviour. A simple scaling law is obtained for the corresponding triply differential cross sections.

Introducción

La ionización de átomos hidrogénicos por impacto de electrones es una de las reacciones más simples en las que el estado final del sistema está caracterizado por tres partículas no ligadas. Este tipo de procesos resulta de interés en diversos campos como astrofísica, fusión nuclear controlada, física del plasma y física médica.

Hasta el presente, se han obtenido sólo algunas mediciones de secciones eficaces totales para la ionización de He⁺ en su estado fundamental²⁻³.

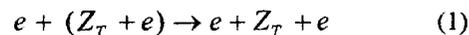
En particular, en el caso de ionización de blancos hidrogénicos, los agregados de la colisión interactúan asintóticamente a través de potenciales coulombianos. Por lo tanto, desde el punto de vista teórico, el largo rango de las interacciones presentes requiere una adecuada descripción asintótica para el sistema de tres cuerpos. Para hidrógeno atómico como blanco, se ha desarrollado un modelo (de aquí en adelante llamado BBK) que tiene en cuenta el correcto comportamiento asintótico del sistema en el canal final de la reacción¹. Un modelo similar fue inicialmente propuesto para el estudio de la ionización de átomos de hidrógeno por impacto de protones⁴. Para blancos hidrogénicos fueron realizados algunos cálculos pero la función de onda final utilizada en estos trabajos, o bien no satisface las correctas condiciones asintóticas⁵ o su rango de validez se limita a colisiones altamente asimétricas⁶. Recientemente, una generalización del modelo BBK ha sido desarrollada para blancos hidrogénicos⁷⁻⁹ tratando en forma apropiada las correctas condiciones asintóticas en los canales de entrada y salida de la reacción. Se calculan secciones eficaces triplemente diferenciales (TDCS, *Triply Differential Cross Sections*) para la ionización de iones hidrogénicos en el régimen de energías del proyectil intermedias y altas, para geometrías coplanar simétrica y coplanar asimétrica.

En este trabajo, se evalúan TDCS usando la aproximación BBK extendida para distintos blancos hidrogé-

cos. En particular, se obtiene que estas secciones eficaces satisfacen una sencilla ley de escala válida para colisiones asimétricas a energías de incidencia suficientemente altas y carga nuclear del blanco grande. Se utilizan unidades atómicas excepto cuando se especifique lo contrario.

Teoría

La reacción de interés es



con Z_T la carga nuclear del blanco de masa M_T . En el régimen de energías consideradas en este trabajo, los efectos relativistas y de intercambio pueden ignorarse.

La TDCS en geometría coplanar viene dada por

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

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. En la misma expresión, Ω_a y Ω_b son los ángulos sólidos subtendidos por los dos electrones salientes y E_b es la energía del electrón eyectado.

El elemento de matriz de transición en la versión *prior*, resulta

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

donde Ψ_i y Ψ_f^- son las funciones de onda inicial y final exacta, respectivamente 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 del continuo coulombiano proyectil-blanco y una función de onda correspondiente al estado ligado,

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

con \mathbf{r}_a y \mathbf{r}_b coordenadas de Jacobi que, al orden $1/M_T$, denotan los vectores posición del electrón incidente y eyectado relativos al núcleo blanco, respectivamente. Las coordenadas se muestran en la Fig. 1.

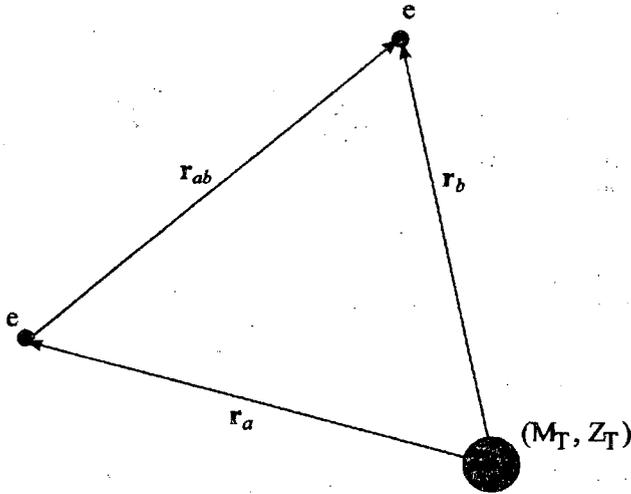


Figura 1: Coordenadas utilizadas en el texto.

La función φ que describe el electrón en el estado fundamental del átomo hidrogenico, viene dada por la siguiente expresión

$$\varphi(\mathbf{r}) = (Z_T^3 / \pi)^{1/2} \exp(-Z_T r) \quad (5)$$

El electrón incidente se representa por la función de onda de Coulomb $F_c(\mathbf{K}_i, \mathbf{r}_a)$ donde

$$F_c(\mathbf{K}_i, \mathbf{r}_a) = (2\pi)^{-3/2} \exp(-\pi\alpha_i / 2) \times \Gamma(1 + i\alpha_i) \exp(i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_a) \times {}_1F_1(-i\alpha_i; 1; i(K_i r_a - \mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_a)) \quad (6)$$

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

La interacción proyectil-blanco V_i es entonces

$$V_i = \frac{1}{r_{ab}} - \frac{1}{r_a} \quad (7)$$

con $\mathbf{r}_{ab} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$. Es fácil ver que esta interacción decae más rápidamente que un potencial coulombiano.

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

$$\Psi_f^- \cong (2\pi)^{-3} \exp(i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a + i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}_b) \times C(\alpha_{pT}, \mathbf{k}_a, \mathbf{r}_a) C(\alpha_{eT}, \mathbf{k}_b, \mathbf{r}_b) \times C(\alpha_{eP}, \mathbf{k}_{ab}, \mathbf{r}_{ab}) \quad (8)$$

donde los factores de Coulomb $C(\alpha, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ vienen dados por

$$C(\alpha, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = \Gamma(1 - i\alpha) \exp(-\pi\alpha / 2) \times {}_1F_1(i\alpha; 1; -i(\mathbf{k}r + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) \quad (9)$$

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

$$\alpha_{pT} = -Z_T / k_a \quad (10)$$

$$\alpha_{eT} = -Z_T / k_b \quad (11)$$

$$\alpha_{eP} = 1 / 2k_{ab} \quad (12)$$

Finalmente, el elemento de matriz T_{if} , puede escribirse como

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

donde

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

A continuación se deriva una ley de escala para las TDCS. Esta ley de escala es válida para colisiones asimétricas cuando la energía incidente y la carga nuclear del blanco son suficientemente grandes.

Consideremos el siguiente cambio de escala en la energía de incidencia

$$E_i^{(Zr_2)} = \left(\frac{Z_{T2}}{Z_{T1}} \right)^2 E_i^{(Zr_1)} \quad (15)$$

el cual es equivalente al siguiente cambio de escala para los momentos

$$\mathbf{K}_i^{(Zr_2)} = \left(\frac{Z_{T2}}{Z_{T1}} \right) \mathbf{K}_i^{(Zr_1)} \quad (16)$$

Los supraíndices indican que las magnitudes involucradas son las correspondientes al impacto de un electrón sobre un blanco de carga nuclear Z_T . Debido a la ecuación de conservación de la energía,

$$\frac{K_i^2}{2} - \frac{Z_T^2}{2} = \frac{k_a^2}{2} + \frac{k_b^2}{2} \quad (17)$$

se puede ver que los momentos k_a y k_b y consecuentemente, las energías E_a y E_b , de los electrones salientes, se comportan del mismo modo que K_i frente al cambio de escala. En la última fórmula, se ha utilizado de manera explícita la energía del electrón ligado del átomo hidrogénico en su estado fundamental: $\epsilon_i = -Z_T^2 / 2$.

Los parámetros de Sommerfeld α_{PT} y α_{eT} son invariantes respecto al cambio de escala en los momentos, esto es,

$$\alpha_j^{(Z_{T2})} = \alpha_j^{(Z_{T1})} \quad (18)$$

donde j representa eT y PT . Por el contrario, α_{eP} y α_i no se comportan de la misma manera. En efecto, cuando se aplica el cambio de escala al parámetro α_i , se obtiene

$$\alpha_i^{(Z_{T2})} = -\frac{Z_{T2} - 1}{Z_{T2}} \frac{Z_{T1}}{K_i^{Z_{T1}}} \quad (19)$$

Sin embargo, para una energía de incidencia $E_i^{(Z_T)}$ fija, la invariancia de α_i ante el cambio de escala, mejora cuando Z_T crece. En este caso,

$$\alpha_i^{(Z_{T2})} \cong -\frac{Z_{T1}}{K_i^{Z_{T1}}} \cong \alpha_i^{(Z_{T1})} \quad (20)$$

Ahora, el cambio de escala aplicado a α_{eP} , resulta en

$$\alpha_{eP}^{(Z_{T2})} = \frac{1}{Z_{T2}} \frac{Z_{T1}}{2k_{ab}^{Z_{T1}}} \quad (21)$$

y puede verse que este parámetro no permanece invariante. Sin embargo, si $k_{ab} \gg 1$, α_{eP} tiende a valores cada vez más pequeños y consecuentemente, la correspondiente función hipergeométrica, tiende a la unidad. Este comportamiento es también aplicable a la función hipergeométrica en el canal de entrada para valores grandes del momento de incidencia, K_i , independientemente de la carga del núcleo blanco.

En suma, a suficientemente altas cargas nucleares y energías de impacto, las funciones de onda y las funciones hipergeométricas confluentes permanecen aproximadamente inalteradas frente al cambio de escala. De un análisis similar, se concluye que las constantes de normalización de las funciones de Coulomb, se comportan del mismo modo.

Consideremos ahora el siguiente cambio de escala en las coordenadas independientes

$$r_i^{(Z_{T2})} = \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right) r_i^{(Z_{T1})} \quad (22)$$

donde $i = a, b$. De acuerdo a esto, el Jacobiano transforma como

$$dr_a^{(Z_{T2})} dr_b^{(Z_{T2})} = \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^6 dr_a^{(Z_{T1})} dr_b^{(Z_{T1})} \quad (23)$$

Más aún, la coordenada r_{ab} transforma de la misma manera que $r_{a,b}$. Entonces, el elemento de matriz T_{if} satisface la siguiente relación

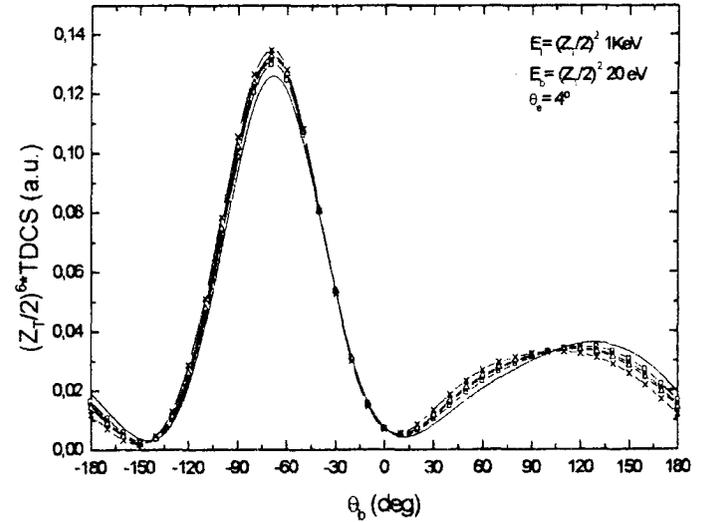


Figura 2: TDCS para la ionización de distintos átomos hidrogénicos por impacto de electrones en función del ángulo de eyección θ_b . La energía incidente es $E_i = (Z_T/2)^2 \times 1\text{keV}$. La energía del electrón ionizado es $E_b = (Z_T/2)^2 \times 20\text{eV}$ y el ángulo de dispersión es $\theta_a = 4^\circ$. Se eligió como sentido positivo para ambos ángulos el horario. He^+ , —, Li^{2+} , - - -, Be^{3+} , - · - ·, B^{4+} , - \Delta -, Ca^{19+} , - x -

$$T_{if}^{(Z_{T2})}(E_i^{(Z_{T2})}, E_b^{(Z_{T2})}) = \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^{7/2} \times T_{if}^{(Z_{T1})} \left(\left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^2 E_i^{(Z_{T2})}, \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^2 E_b^{(Z_{T2})} \right) \quad (24)$$

Finalmente, se obtiene la siguiente ley de escala para la TDCS

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_b}(Z_{T2}, E_i^{(Z_{T2})}, E_b^{(Z_{T2})}) = \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^6 \times \frac{d^3\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_b} \left(Z_{T1}, \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^2 E_i^{(Z_{T2})}, \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}} \right)^2 E_b^{(Z_{T2})} \right) \quad (25)$$

Resultados y conclusiones

En esta sección se presentan las TDCS, correspondientes a distintos blancos hidrogénicos, transformadas según la ley de escala previamente obtenida. Se toma el caso He^+ como el de referencia. Para la obtención de estas secciones eficaces, se ha utilizado una técnica de cálculo

similar a la desarrollada en trabajos anteriores sobre formación de positronio¹⁰.

Por otra parte, a fin de obtener más fácilmente las TDCS, se ha hecho la siguiente aproximación. El parámetro α_i del factor del continuo coulombiano en la función de onda inicial, se toma igual a cero. A las energías consideradas en este trabajo, los perfiles de las TDCS no se ven demasiado afectados al realizar esta aproximación debido a que el largo rango de las interacciones coulombianas presentes en el canal inicial es más importante a bajas energías de incidencia⁷. Por el contrario, se ha mostrado que la contribución de la interacción proyectil-electrón en el canal final es importante aún a altas energías de impacto⁷, razón por la cual se la ha incluido en los cálculos.

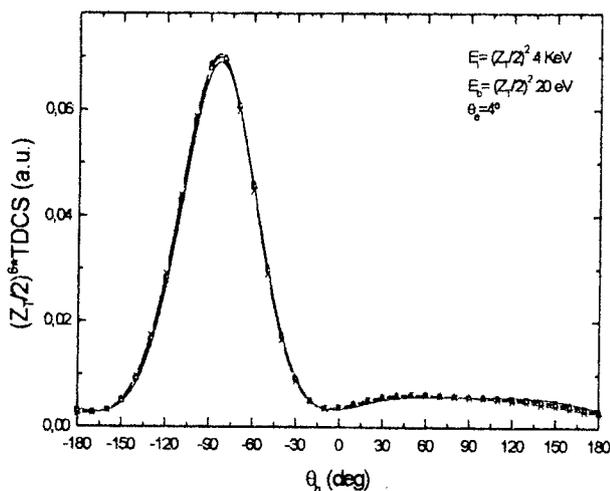


Figura 3: Idem Fig. 2 pero con energía incidente $E_i = (Z_T/2)^2 \times 4 \text{ keV}$.

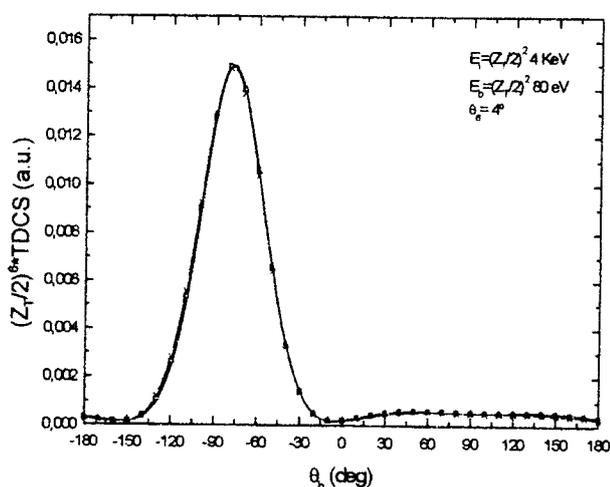


Figura 4: Idem Fig. 3 pero con energía de eyección $E_b = (Z_T/2)^2 \times 80 \text{ eV}$.

En las figuras, se presentan las TDCS para blancos con carga nuclear $Z_T = 2,3,4,5$. También se incluye la sección eficaz para $Z_T = 20$ que puede considerarse como el caso límite para carga nuclear grande. En la Fig. 2 la energía de incidencia es $E_i = (Z_T/2)^2 \times 1 \text{ keV}$ mientras que en las Figs. 3 y 4, $E_i = (Z_T/2)^2 \times 4 \text{ keV}$. En las Figs. 2 y 3, la energía de eyección es $E_b = (Z_T/2)^2 \times 20 \text{ eV}$ mientras que en la Fig. 4, $E_b = (Z_T/2)^2 \times 80 \text{ eV}$. Puede verse que la ley de escala funciona bien en todo el dominio angular aunque en menor medida en la región correspondiente a los picos binario y de retroceso para la energía de incidencia más baja. Sin embargo, esas desviaciones tienden a desaparecer a medida que aumenta la energía de incidencia y el acuerdo con la ley de escala es muy bueno.

En suma, se ha presentado una ley de escala para las TDCS obtenidas a partir de la generalización del modelo BBK para blancos hidrogenicos. Es fácil ver que las secciones eficaces integradas en las coordenadas angulares verifican la misma ley de escala. La sección eficaz total σ verifica la siguiente ley de escala

$$\sigma(Z_{T2}, E_i^{(Z_{T2})}) = \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}}\right)^4 \sigma\left(Z_{T1}, \left(\frac{Z_{T1}}{Z_{T2}}\right)^2 E_i^{(Z_{T2})}\right) \quad (26)$$

El factor de escala adicional $(Z_{T1}/Z_{T2})^{-2}$ proviene de la integración sobre la energía de eyección E_b .

La presente ley de escala provee una simple herramienta para calcular secciones eficaces de blancos hidrogenicos con $Z_T > 2$ a partir de la sección eficaz correspondiente al blanco He^+ .

Referencias

- 1 - Brauner M., Briggs J. S. y Klar H. 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2265
- 2 - Peart B., Walton D. S. y Dolder K. T. 1969 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **2** 1347
- 3 - Defrance P., Brouillard F., Claeys W. y van Wassenhove G. 1981 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** 103
- 4 - Garibotti G. y Miraglia J. E. 1980 *Phys. Rev. A* **21** 572
- 5 - Roy A., Roy K. y Sil N. C. 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 1289
- 6 - Biswas R. y Sinha C. 1994 *Phys. Rev. A* **50** 354
- 7 - Jia X., Shi Q., Chen Z., Chen J. y Xu K. 1997 *Phys. Rev. A* **55** 1971
- 8 - Biswas R. y Sinha C. 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 1589
- 9 - Shi Q., Chen Z., Chen J. y Xu K. 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 2859
- 10 - Fojón O., Rivarola R., Gayet R., Hanssen J., Hervieux P.A. 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 2199