

Asimetría del Pico de Electrones Blandos en Colisiones Protón-Hidrógeno

W. R. CRAVERO*, F. D. COLAVECCHIA y C. R. GARIBOTTI

CENTRO ATÓMICO BARILOCHE Y CONSEJO NACIONAL DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS Y TÉCNICAS
AV. BUSTILLO KM. 9.5 - (8400) SAN CARLOS DE BARILOCHE - RÍO NEGRO - ARGENTINA
e-mail: cravero@cab.cnea.edu.ar

Resumen

En este trabajo se estudian las características de asimetría de la emisión electrónica de baja velocidad en colisiones protón hidrógeno. Estos electrones forman el pico de electrones blandos en la sección eficaz doble diferencial (SEDD). Analizamos los primeros datos experimentales confiables para este proceso [1], expandiendo la SEDD como una serie en términos de polinomios de Legendre cuyos coeficientes parametrizan la asimetría. Se utiliza la aproximación de onda distorsionada Continuum Distorted Wave - Eikonal Initial State (CDW-EIS) para calcular los parámetros en el caso de proyectiles con energías de 95 y 114 KeV. Finalmente, se analiza también la continuidad de los parámetros a través del umbral de energías, utilizando los resultados dados por la eikonal impulse approximation (EIA) [2] en la región de excitación y la CDW-EIS en la zona de ionización.

Abstract

In this work we study the asymmetric characteristics of the low velocity electron emission in proton hydrogen collisions. These electrons form the so called soft electron peak in the double-differential cross section. We consider the first confident experimental data available in these processes [1], expanding the DDCS in Legendre polynomials, whose coefficients parametrize de asymmetry. We use the Continuum Distorted Wave - Eikonal Initial State (CDW-EIS) theory to calculate the asymmetry parameters for 95 and 114 KeV/amu incident protons. Finally we analyze the continuity of the parameters across the energy threshold, using the results given by the eikonal impulse approximation (EIA) [2] in the excitation region and the CDW-EIS in the ionization one.

Introducción

El espectro de emisión electrónica producido en colisiones ión-átomo a energías altas e intermedias muestra tres características relevantes: electrones producidos en choques binarios entre el proyectil incidente y el electrón inicialmente ligado (EB), electrones capturados al continuo del potencial coulombiano del proyectil (ECC), y finalmente electrones lentos, es decir emitidos con muy baja velocidad respecto del blanco (EL). Estas estructuras se manifiestan como un aumento de la emisión en esas regiones particulares del espectro. La medición del pico de electrones lentos presenta dificultades experimentales que impidieron su estudio sistemático hasta época reciente. Por otra parte se consideraba a la primera aproximación de Born como una teoría

esencialmente correcta para la región de emisión de baja velocidad. Esta aproximación predice para la SEDD (y blanco hidrogénico), una divergencia de tipo $1/v$, debido al factor de normalización de la función de onda coulombiana que describe el movimiento del electrón emitido. Esta divergencia sólo depende del módulo de la velocidad del electrón y por lo tanto tiene simetría atrás-adelante. Suárez et al. presentaron la primera evidencia experimental de una fuerte asimetría en el pico de EL [3]. Otros estudios experimentales recientes han confirmado este hecho, mostrando resultados notables para proyectiles múltiplemente cargados [4].

La emisión de electrones lentos puede pensarse como una continuación del proceso de excitación electrónica más allá del umbral de ionización. Esta idea ha permitido extender el

* Autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

formalismo de matriz densidad de excitación al caso de ionización, escribiendo la sección eficaz como una serie de polinomios de Legendre cuyos coeficientes pueden ser fácilmente relacionados con los elementos de matriz densidad [5]. La extrapolación de los coeficientes obtenidos para la ionización a estados altamente excitados, permite predecir una asimetría en la emisión al cruzar el umbral de ionización [6].

Desde el punto de vista teórico, la existencia de reglas de selección para amplitudes de transición en ondas parciales determina la estructura angular de la SEDD en el umbral de ionización. Estas reglas surgen del análisis de la colisión en términos de la correspondiente matriz densidad, cuyos elementos no-diagonales describen la coherencia entre amplitudes de transición correspondientes a estados finales con diferente momento angular [5].

Desde hace varios años existen mediciones experimentales de SEDD de ionización para energías de emisión bajas ($1\text{eV} < E < 50\text{ eV}$) [7] para algunos blancos (He, Ne, Ar). Sin embargo las distintas mediciones muestran en esta zona una gran incerteza y fuertes discrepancias entre ellas, que se acentúan a medida que nos acercamos al pico de EL. Desde hace algunos años, se han podido controlar los distintos factores que contribuyen a dificultar este tipo de mediciones, sin embargo aún contamos con un número escaso de mediciones confiables [8, 9]. Recientemente han sido publicadas mediciones de ionización de hidrogeno atómico por impacto de protones que incluyen datos en la región de emisión de EL [1].

Dos diferentes métodos de parametrización han sido propuestos a la hora de analizar la estructura angular del pico de ECC. El primero que se utilizó fue un desarrollo de la SEDD en serie de polinomios de Legendre alrededor de la velocidad del proyectil V . En este tipo de desarrollo los coeficientes dependen de la velocidad del electrón emitido respecto del proyectil, v_p [10]. Recientemente R. G. Pregliasco et al. propusieron un método alternativo, utilizando un desarrollo en series de v_p cuyos coeficientes son funciones del ángulo

de emisión en el sistema de referencia del proyectil [11].

El origen de los picos de EL y ECC debe hallarse en la característica de largo alcance de la interacción coulombiana entre el electrón emitido y el núcleo residual del blanco o el proyectil, respectivamente. Esta semejanza en el origen sugiere la posibilidad de que ambas estructuras puedan estudiarse empleando herramientas matemáticas similares.

En trabajos anteriores, hemos estudiado el pico de EL para colisiones de iones múltiplemente cargados con blancos de helio, analizando la estructura angular por medio de la primera aproximación de Born y CDW-EIS. En [12] y [13] empleamos la expansión en polinomios de Legendre, mientras que en [14] analizamos la expansión en serie de potencias de la velocidad de emisión. Posteriormente analizamos el comportamiento de los parámetros con la carga y la energía del proyectil, encontrando leyes de escala para la sección simplemente diferencial en la región de EL [15].

En el presente trabajo analizamos la emisión de electrones lentos en colisiones protón-hidrógeno, a energías intermedias, utilizando teorías de onda distorsionada (CDW-EIS, EIA, IA) y estudiamos la continuidad a través del umbral de ionización de los distintos parámetros de asimetría. Finalmente comparamos con los datos experimentales disponibles [1].

A lo largo del trabajo se utilizan unidades atómicas excepto donde se indica lo contrario.

Cálculo de los parámetros de asimetría

Ionización

La expansión de la sección eficaz doble diferencial (SEDD) en términos de polinomios de Legendre fue utilizada por Meckbach et al. [16] para estudiar la asimetría en el pico de captura al continuo. Como se mencionó antes, los picos de ECC y de EL tienen un origen común, la divergencia $1/v$ asociada al potencial coulombiano. En el caso del pico de EL la expansión puede escribirse como

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \sum_{l=0}^{\infty} \beta_l(v, V, i) P_l(\cos\theta) \quad (1)$$

o, extrayendo β_0 de la suma:

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \beta_0 \left(1 + \sum_{l=1}^{\infty} \alpha_l(v, V, i) P_l(\cos\theta) \right) \quad (2)$$

donde $\alpha_l = \beta_l/\beta_0$ son los parámetros de asimetría, mientras que el factor β_0 es proporcional a la sección eficaz simplemente diferencial, como puede verse integrando la expansión (2).

$$\frac{d\sigma}{dE} = 4\pi\beta_0 \quad (3)$$

Debido a las características del potencial coulombiano la serie (1) es infinita, pero su convergencia es rápida para los electrones lentos y puede ser reemplazada por una suma infinita de N términos para permitir ajustar los datos experimentales:

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \sum_{l=0}^N \beta_l(v, V, i) P_l(\cos\theta) \quad (4)$$

El número de parámetros de asimetría que se puede calcular confiablemente depende del error experimental de los datos y del número de datos angulares que se hayan obtenido. Para n mediciones angulares, el ajuste tiene sentido si $N \leq n-2$. Además, para el caso de la colisión protón-hidrógeno en el límite $v \rightarrow 0$, la primera aproximación de Born predice que sólo α_0 y α_2 son no nulos, de donde debe ser $2 \leq N \leq n-2$.

La SEDD teórica se obtuvo utilizando la aproximación CDW-EIS y a partir de ella los parámetros de asimetría se pueden obtener a través de la expresión:

$$\beta_l(v) = \frac{2l+1}{2} \int P_l(\cos\theta) \frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} d\Omega \quad (5)$$

Es bien conocido el hecho de que en un proceso de colisión, los niveles de energía degenerados de un átomo pueden ser excitados coherentemente. Las amplitud de excitación para distintos subniveles lm pueden ser combinadas para formar los elementos de la matriz densidad. En el año 1953 Fano introdujo el desarrollo de la matriz densidad en estados multipolares, representándola ahora como una expansión en un conjunto de operadores tensoriales irreducibles; con lo cual las mediciones de estados excitados resultantes de un proceso colisional pueden ser también descriptas en términos de estos operadores[17]

Las cantidades físicas relevantes en la excitación a estados con n crecientes debe poder continuarse a las correspondientes a la ionización a estados electrónicos con bajo impulso. Así, en forma similar a lo que sucede en el caso de ionización ión-átomo, la sección eficaz para excitación al estado n puede representarse por un desarrollo similar al dado por la ecuación (1) permitiendo definir parámetros de asimetría β_l para procesos de excitación [5].

Dado que el átomo de hidrogeno tiene niveles con numero cuántico principal n degenerados y que las funciones de onda de estos niveles son conocidas analíticamente, este sistema es el mas simple para el estudio de la excitación coherente. En este caso, los parámetros de asimetría tienen una expresión exacta en términos de los elementos de la matriz densidad $\rho_{nlm, n'l'm'}$. En particular, si se tiene en cuenta solo la coherencia de los niveles con $l=0, 1, 2$:

$$\begin{aligned} \beta_0^{(n)} &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l,m} \rho_{nlm, n'l'm'} \\ \beta_1^{(n)} &= -\frac{\sqrt{3}}{2\pi} \Re \rho_{n00, n10} - \frac{3}{\sqrt{5}\pi} \Re \rho_{n11, n21} - \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}\pi} \Re \rho_{n10, n20} \\ \beta_2^{(n)} &= -\frac{1}{2\pi} \Re (\rho_{n10, n10} - \rho_{n11, n11}) \end{aligned} \quad (6)$$

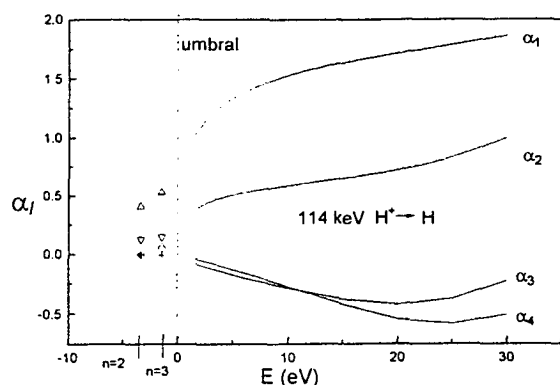


Figura 1: continuidad en el umbral de energía para los parámetros teóricos de la colisión protón - hidrógeno a 114 y 200 keV de energía del proyectil. Los símbolos corresponden a: Δ para α_1 ; ∇ para α_2 ; $+$ para α_3 y \circ para α_4 .

donde $\Re(z)$ representa la parte real del z . El parámetro $\beta_1^{(n)}$ es proporcional a la componente z del momento dipolar, mientras que $\beta_2^{(n)}$ es proporcional al parámetro de alineamiento A_2 [2].

Los elementos de la matriz densidad pueden ser calculados a partir de las aproximaciones teóricas existentes. En nuestro caso, los elementos de matriz son los obtenidos por Rodríguez y Miraglia, calculados utilizando la eikonal impulse approximation [2]. En la versión prior de esta teoría el estado final esta representado por una función de onda impulsiva [18], mientras que el estado inicial es un estado eikonal, de forma de verificar las correctas condiciones de contorno del problema coulombiano [6]. Esta teoría ha probado ser valida para el estudio del proceso de excitación en los casos de colisión de energía intermedia y alta.

Resultados

En primer lugar analizaremos los parámetros de asimetría para la colisión protón hidrogeno. En la figura 1 pueden verse los parámetros de asimetría para excitación e ionización α_1 a α_4 , en función de la energía del electrón emitido para una energía de impacto de 114 keV/amu.

Se puede ver claramente la continuidad a través del umbral de ionización de los parámetros de asimetría. A pesar de que los

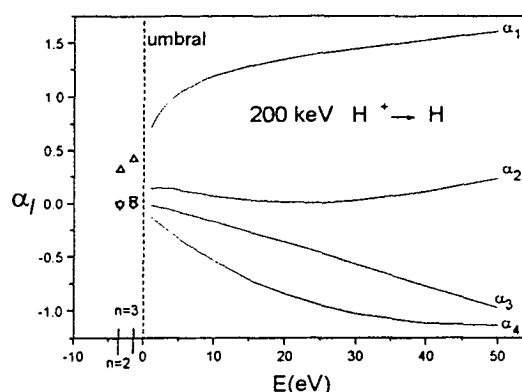


Figura 2: Idem Figura 1 para la colisión protón-hidrógeno a 200 keV de energía de impacto

cálculos para excitación incluyen solo hasta el nivel de energía $n=3$, este nivel esta suficientemente cerca del umbral en términos de la energía del electrón. Los parámetros para la colisión con energía de impacto de 200 keV/amu se encuentran representados en la Figura 2.

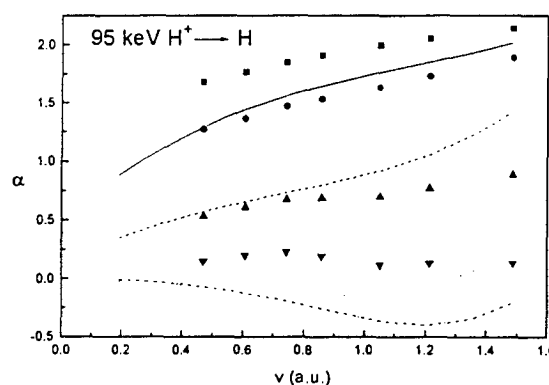


Figura 3: parámetros de asimetría para la colisión protón-hidrógeno a 95 keV/amu. Las líneas muestran los cálculos con la continuum distorted wave - eikonal initial state approximation: línea llena para α_1 , línea punteada para α_2 , línea de trazos para α_3 y línea de trazos y puntos para α_4 . Los símbolos corresponden a los parámetros obtenidos con los datos experimentales de [1]: \blacksquare para α_1 , \bullet para α_2 , Δ para α_3 y ∇ para α_4 .

La comparación entre los parámetros de asimetría teóricos obtenidos con la CDW-EIS y los obtenidos a partir de datos experimentales [1] puede verse en las Figuras 3 y 4. Si bien cualitativamente el acuerdo es razonable, subsisten discrepancias importantes, mostrando los datos una asimetría mucho mayor que la resultante de la aproximación teórica. Dado que

el blanco utilizado es hidrogeno atómico, estas diferencias no pueden ser atribuidas a la descripción del estado ligado inicial que en este caso es exacto[19,20].

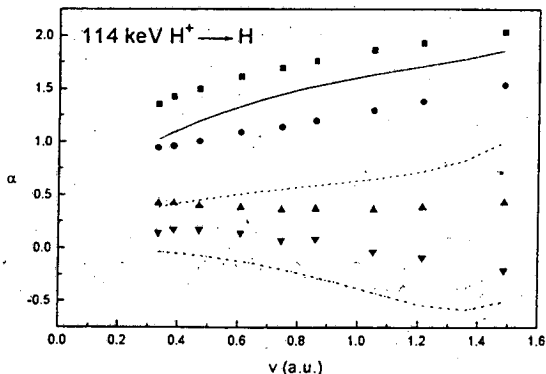


Figura 4: Idem Figura 3 para una energía de incidencia de 114 keV/amu.

Conclusiones

Hemos analizado la estructura angular del pico de emisión de EL en colisiones protón-hidrógeno a energías intermedias.

Hemos calculado los parámetros de asimetría utilizando la aproximación CDW-EIS. Comparando estos parámetros con los obtenidos por Rodríguez y Miraglia para excitación de hidrogeno a estados $n=2$ y $n=3$, observamos un buen acuerdo cualitativo para energías cercanas al umbral de ionización.

Asimismo comparamos los parámetros obtenidos teóricamente con los extraídos a partir de los datos experimentales de Kerby III y otros. Si bien existe un acuerdo cualitativo entre la teoría y los datos experimentales, subsisten importantes discrepancias. A pesar de que las energías de impacto analizadas son cercanas, podemos observar que la descripción dada por la aproximación teórica empeora al disminuir la energía de impacto.

Debemos atribuir estas diferencias al hecho que la aproximación CDW-EIS contiene la interacción electrón -proyectil en el canal inicial en una aproximación eikonal, lo cual resulta insuficiente para una adecuada descripción del

efecto de dos centros a las energías de impacto consideradas en este trabajo.

Referencias

1. G. W. Kerby III, M. W. Gealy, Y. Y. Hsu, M. E. Rudd, D. R. Schultz y C. O. Reinhold, Phys. Rev. Lett. 51, 2256 (1995).
2. V. D. Rodríguez y J. E. Miraglia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23, 3629 (1990).
3. S. Suárez, C. R. Garibotti, W. Meckbach y G. Bernardi, Phys. Rev. Lett. 10, 418 (1993).
4. R. Moshhammer et al, Phys. Rev. Lett 73, 3371 (1994).
5. O. Scholler, J. S. Briggs y R. M. Dreizler, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 19, 2505 (1986).
6. V. D. Rodríguez y J. E. Miraglia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25, 2037 (1992).
7. S. T. Manson, L. H. Toburen, D. H. Madison y N. Stolterfoht, Phys. Rev. A 12, 60 (1975).
8. S. Suarez, C. R. Garibotti, G. Bernardi, P. Focke y W. Meckbach, Phys. Rev. A 48, 4339 (1993).
9. G. Bernardi, P. Focke, C. R. Garibotti y S. Saurez, Phys. Rev. A 50, 5338 (1994).
10. C. R. Garibotti y J. Miraglia, J. Phys. B 14, 863 (1981)
11. R. G. Pregliasco, C. R. Garibotti y R. O. Barrachina, J. Phys. B 27, 1151 (1994).
12. C. R. Garibotti y W. Cravero, Phys. Rev. A 48, 2012 (1993).
13. W. Cravero y C. R. Garibotti, Phys. Rev. A 50, 3898 (1994).
14. W. Cravero, C. R. Garibotti y G. Gasaneo, Nucl. Inst. and Meth. B 86, 140 (1994).
15. F. D. Colavecchia, W. R. Cravero y C. R. Garibotti, Phys. Rev. A 52, 3737 (1995).
16. W. Meckbach, I. Nemirovsky y C. R. Garibotti, Phys. Rev. A 24, 1793 (1981).
17. U. Fano, Phys. Rev. 30, 533 (1953).
18. M. R. C. McDowell y J. P. Coleman, Introduction to the Theory of Ion-Atom collisions, North Holland Publishing Company, Amsterdam (1969).
19. W. Cravero, Tesis Doctoral, Instituto Balseiro (S. C. de Bariloche, 1995).
20. P. D. Fainstein, L. Gulyas, F. Martin y A. Salin, aceptado para su publicación en Phys. Rev. A, (1996).