

Expansiones de Born de Primer Orden para la Colisión Ión-Átomo

G. GASANEO[#], F. D. COLAVECCHIA^{*}, M. D. SANCHEZ[#] 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:flavioc@cab.cnea.edu.ar

Resumen

En el presente trabajo analizamos la matriz de transición para el proceso de ionización ión-átomo utilizando la correcta ecuación de Lippmann - Schwinger para describir la interacción de largo alcance del potencial coulombiano. Como resultado de estos cálculos se observa que los procesos de doble colisión pueden ser interpretados a partir del término homogéneo de la ecuación de Lippmann - Schwinger y no se deben al efecto de largo alcance del potencial coulombiano introducido a través de la función de onda eikonal.

Abstract

In this work we analyze the transition matrix in ion-atom ionization process. We include the long range behavior of the coulomb potential in the final channel through the distorted Lippmann-Schwinger equation. We show that the double collisions process can be understood using only the homogeneous term of Lippmann-Schwinger equation without introducing the long range effects of the eikonal wave function.

Introducción

La Sección Eficaz Triple Diferencial (SETD) en el momento final del electrón y en la dirección final del proyectil ha sido detalladamente estudiada por primera vez por Gasaneo et al [1] para el proceso de ionización en la colisión protón - hidrógeno, calculando la matriz de transición en primera aproximación de Born (PAB).

Esta aproximación fue usada por primera vez en 1953, por Bates y Griffing [2], obteniendo resultados en buen acuerdo con los datos experimentales en colisiones ión-átomo a altas energías de impacto.

Desde Bates y Griffing, la PAB es usada como primer modelo en el cálculo de secciones eficaces totales y diferenciales, simples y dobles, para distintos procesos de colisión a energías altas ($> 200 \text{ keV amu}^{-1}$).

La PAB no reproduce, para el cálculo de secciones eficaces doble diferenciales (SEDD), la estructura de la captura electrónica al continuo, debido a que no toma en cuenta la interacción electrón - proyectil en el canal de salida [3]. Sin embargo esta aproximación describe cualitativamente bien las SEDD, para altas energías y bajas cargas, las regiones del espectro de emisión correspondientes a los electrones blandos y al encuentro binario [3-5].

La matriz de transición puede escribirse en la forma

$$T_{fi} = \langle \Psi_f^- | V_f | \psi_i \rangle \quad (1)$$

siendo la función de onda Ψ_f^- la solución exacta en el canal final. En este caso, la primer aproximación de Born a la expresión anterior es:

$$T_{fi} = \langle \psi_f | V_f | \psi_i \rangle \quad (2)$$

[#] Dirección permanente: Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca.

^{*} Autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

Donde V_{if} son los potenciales del canal inicial y final, mientras que ψ_{if} son las correspondientes funciones de onda sin perturbar de los respectivos canales.

Un detallado análisis de la ec. (2) en el caso de un proceso de ionización ión-átomo nos ha permitido observar que existe un mecanismo de dobles colisiones cuyo origen físico está dado en las múltiples interacciones del electrón con el núcleo blanco luego de colisionar con el proyectil [1]. Recientemente fueron presentadas evidencias experimentales de este mecanismo de doble colisión [7]. Sin embargo, la ecuación (2) no es correcta, pues no se incluyen las características de largo alcance del potencial coulombiano. La incorporación a la teoría formal de scattering de este potencial se ha basado fundamentalmente en la teoría de onda distorsionada [8-11].

En el presente trabajo se calcula la SETD utilizando la correcta ecuación de Lippmann - Schwinger. Se muestra que, si bien se tiene en cuenta la interacción permanente entre el electrón y el núcleo blanco, a través de la incorporación de la función de onda eikonal, ésta no es la responsable de los procesos de dobles colisiones.

Cálculo de la matriz de transición

Consideramos un proceso de ionización protón-hidrógeno. En primera aproximación de Born el estado inicial es descrito a través del producto de una onda plana de momento \mathbf{K}_i y el estado fundamental del electrón en el átomo blanco. El estado final se representa también como un producto, pero en este caso el proyectil que se aleja se describe a través de una onda plana con momento \mathbf{K}_f y el electrón en el continuo del blanco con función de onda coulombiana $\psi_{\mathbf{k}}^-$.

La amplitud de transición en esta aproximación, está dada por [6]:

$$T_{fi} = \langle \mathbf{K}_f, \psi_{\mathbf{k}}^- | V_P | \mathbf{K}_i, \phi_i \rangle \quad (3)$$

donde V_P es el potencial coulombiano de la interacción proyectil - electrón, $V_P = \frac{Z_P}{r_P}$.

La expresión (3) puede escribirse como un desarrollo en serie utilizando la ecuación de Lippmann - Schwinger de corto alcance para la función $\psi_{\mathbf{k}}^-$. A partir de ésta, la matriz de transición puede escribirse como:

$$T_{fi} = \langle \mathbf{K}_f, \mathbf{k}_e | V_P + V_P G_T^+ V_T | \mathbf{K}_i, \phi_i \rangle \quad (4)$$

donde \mathbf{k} es el momento de la onda plana que representa el movimiento relativo libre entre el electrón y el núcleo blanco, V_T es el potencial coulombiano de la interacción blanco - electrón, $V_T = \frac{Z_T}{r_T}$ y G_T^+ la función de Green de canal.

Sin embargo, como se mencionó antes, la expresión (4) no tiene en cuenta la característica asintótica de la interacción coulombiana.

Para incorporar la correcta condición de contorno en el estado final, desarrollamos la función coulombiana siguiendo el formalismo de Mulherin y Zinnes [10]:

$$|\psi_{\mathbf{k}}^- \rangle = |\mathbf{k} \pm \infty \rangle + G_T^-(V_T - U) |\psi_{\mathbf{k}}^- \rangle \quad (5)$$

donde el estado asintótico $|\mathbf{k} \pm \infty \rangle$ en la representación de coordenadas se escribe como:

$$\langle \mathbf{r}_T | \mathbf{k} \pm \infty \rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_T} (kr_T \mp \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_T)^{\pm i \frac{Z_T}{k}} \quad (6)$$

mientras que U es el potencial de distorsión definido a través de

$$\langle \mathbf{r}_T | U | \mathbf{k} \pm \infty \rangle = \frac{Z_T}{r_T} \left(1 - \frac{Z_T / k}{kr_T \mp \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_T} \right) \langle \mathbf{r}_T | \mathbf{k} \pm \infty \rangle$$

Utilizando la expresión (5) podemos escribir la matriz de transición (4) como:

$$T_{fi} = \langle \mathbf{K}_f, \mathbf{k} \pm \infty | V_P | \mathbf{K}_i, \phi_i \rangle + \langle \mathbf{K}_f, \psi_{\mathbf{k}}^- | (V_T - U) G_T^+ V_P | \mathbf{K}_i, \phi_i \rangle \quad (7)$$

El primer término de la matriz de transición puede calcularse fácilmente:

$$\langle \mathbf{K}_f, \mathbf{k} \pm \infty | V_P | \mathbf{K}_i, \phi_i \rangle = -\frac{4\sqrt{2\pi}Z_P}{q^2} \cdot G(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \tilde{\phi}_i(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \quad (8)$$

El primer factor es proporcional a la transformada de Fourier del potencial V_p , mientras que

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \left[\frac{2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - k^2 - iZ_T k)}{(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2 + Z_T^2} \right]^{-\frac{Z_T}{k}} \quad (9)$$

tiene su origen en la fase logarítmica que distorsiona la onda plana en el canal final, y

$$\tilde{\phi}_i(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = \frac{2\sqrt{2}\pi Z_T^{5/2}}{\left[(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2 + Z_T^2 \right]^2} \quad (10)$$

es la transformada de Fourier del estado ligado inicial y \mathbf{q} es el momento transferido.

Un desarrollo en serie en potencias de Z_T/k del factor $G(\mathbf{k}, \mathbf{q})$:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \approx 1 - i \frac{Z_T}{k} \log \left[\frac{2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - k^2)}{(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2} \right] + \frac{Z_T^2}{k^2} \left\{ \frac{k^2}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - k^2} - \log \left[\frac{2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - k^2)}{(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2} \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \log^2 \left[\frac{2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - k^2)}{(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2} \right] - \log^2 2 \right\} \quad (11)$$

o bien la observación detallada de (8), nos permiten afirmar que esta fase no introduce ningún mecanismo de doble colisión en el cálculo de la SETD. Este resultado es completamente equivalente al que se obtiene utilizando la aproximación de onda plana.

Conclusiones

En este trabajo hemos reescrito la matriz de transición como la suma de dos términos. El primero de ellos tiene en cuenta el efecto de largo alcance del potencial coulombiano a través de la función de onda eikonal. Haciendo el cálculo de la matriz de transición de onda plana distorsionada hemos verificado que, a pesar de incorporar dicho comportamiento, ésta no tiene información sobre los procesos de doble colisión, que han sido observados experimentalmente [7]. Podemos así afirmar que estos procesos se deben exclusivamente al segundo término de (7).

Para incluir los efectos de largo alcance hemos utilizado el formalismo de Mulherin y Zinnes que, aunque no es la única forma de representar las particulares condiciones asintóticas del potencial coulombiano; se ha demostrado que es equivalente a la descripción común del este potencial en términos de ondas distorsionadas[10].

El análisis de los procesos de colisiones múltiples han sido interpretado muchas veces utilizando la incorrecta ecuación de Lippmann-Schwinger. No obstante esto las conclusiones a las que se arriban pueden ser consideradas correctas, siempre y cuando se tenga presente el largo alcance del potencial coulombiano y las modificaciones que éste introduce.

Referencias

1. G. Gasaneo, W. Cravero, M. D. Sánchez y C. R. Garibotti, Phys. Rev. A, en prensa.
2. R. Bates y Griffing, Proc. Phys. Soc. A, 66, 961 (1953).
3. M. Rudd, L. Touburen y N. Stolterforht, At. Dat. and Nucl. Dat. tables 18, 413 (1976); 23, 405 (1979).
4. M. Rudd y T. Jorgensen, Phys. Rev. 131, 666 (1963).
5. M. E. Rudd, C. A. Sautter y C. L. Bailey, Phys. Rev. 20, 151 (1966).
6. M. R. C. McDowell y J. P. Coleman, Introduction to the Theory of Ion-Atom Collision, North Holland Publishing Co., Amsterdam 1970.
7. S. Suárez, W. R. Cravero, R. Barrachina, C. R. Garibotti, W. Meckbach, R. Maire, M. Tobish, y K. O. Groeneveld, Symposium on Two-Center Effects in Ion Atom Collisions (Proceedings), Lincoln, Nebraska, USA (1994).
8. R. O. Barrachina y J. H. Macek, J. Math. Phys. 30, 11 (1989).
9. A. M. Mukhamedzhanov, Teor. Mat. Fiz 62, 1 (1985).
10. H. Van Haeringen, J. Math. Phys. 17, 6 (1976).
11. D. Mulherin y I. I. Zinnes, J. Math. Phys. 11, 4 (1970).