

EXCITACION ELECTRONICA DEL BLANCO EN COLISIONES He⁺ + H(1s).

César A. Ramírez[#] y Roberto D. Rivarola[#].

Instituto de Física de Rosario (Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas y Universidad Nacional de Rosario), Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina.

Se estudia la excitación del electrón de un átomo de hidrógeno por impacto de un ion He⁺, a energías de colisión intermedias y altas. La amplitud de transición es analizada dentro de una aproximación Eikonal Simétrica. Se calculan secciones eficaces diferenciales y totales y se comparan los resultados aquí presentados con los obtenidos previamente con otras teorías y con datos experimentales. Se investiga la influencia de la interacción electrón-electrón sobre la reacción estudiada, determinándose la importancia de la distribución espacial del electrón proyectil alrededor de un núcleo ligante.

I. INTRODUCCION

En el presente trabajo se estudia la excitación de átomos monoeléctricos por impacto de iones pesados también monoeléctricos a energías medias ($v \sim v_e$) y altas $v \gg v_e$. Llamamos v_e a la velocidad de orbitación del electrón *activo* y v a la velocidad del proyectil. La amplitud de transición se calcula desarrollando una nueva aproximación Eikonal Simétrica para el caso de proyectiles vestidos con electrones, basándose en un modelo análogo usado previamente para proyectiles nucleares desnudos^{1,2}. Como las velocidades de impacto son suficientemente altas, consideramos *congelado* al electrón pasivo del proyectil durante la colisión, es decir, no cambia su estado cuántico durante todo el proceso. Su influencia en la transición del electrón activo es incluida a través de un potencial modelo centrado en el núcleo del proyectil. La interacción coulombiana entre los núcleos y entre el electrón pasivo y el núcleo del blanco es considerada por medio de un potencial estático³. Los resultados obtenidos tanto para las secciones eficaces diferenciales como tales son comparados con resultados experimentales⁴, y con cálculos teóricos obtenidos por otros autores⁵.

Salvo donde se indique expresamente, usaremos unidades atómicas.

II. TEORIA

Consideramos la excitación del electrón de átomos monoeléctricos con carga nuclear Z_T por impacto de iones monoeléctricos con carga nuclear Z_P . Indicamos con x_1 (x_2) y s_1 (s_2) la posición del electrón activo

(pasivo), medida desde un sistema de referencia con centros en los núcleos del blanco y del proyectil respectivamente.

La amplitud de transición de primer orden en la forma *prior*, según un modelo de onda distorsionada, y en la aproximación de parámetro de impacto, se escribe como:

$$A_{if}^-(\rho) = -i \lim_{t \rightarrow -\infty} \int_t^{+\infty} dt' \left\langle \chi_f^-(1,2) | H - i \frac{\partial}{\partial t} | \chi_i^+(1,2) \right\rangle \quad (1)$$

donde la derivada parcial temporal se hace considerando \mathbf{r} constante. H es el hamiltoniano total del sistema en colisión y $\chi_{i,f}^\pm(1,2)$ son las funciones de onda distorsionadas inicial y final, de los dos electrones. Si $\Psi_i^+(1,2)$ y $\Psi_f^-(1,2)$ representan las funciones de onda exactas con correctas condiciones entrantes y salientes respectivamente, asociadas al hamiltoniano H , entonces deben verificarse los siguientes límites.

$$\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \Psi_{i,f}^\pm(1,2) = \chi_{i,f}^\pm(1,2) \quad (2)$$

La ecuación (1) es válida si

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \Psi_f^-(1,2) | \chi_i^+(1,2) \rangle = 0 \quad (3)$$

Para el caso considerado, el hamiltoniano total es:

$$H = H_1 + H_2 - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_T}{x_2} + \frac{1}{|s_1 - s_2|} + \frac{Z_P Z_T}{R}, \quad (4)$$

donde H_1 y H_2 son los hamiltonianos monoeléctricos de los electrones ligados al núcleo blanco y al núcleo

[#] Departamento de Física, Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario.

proyectil respectivamente:

$$H_1 = -\frac{1}{2}\nabla_{r_1}^2 - \frac{Z_T}{x_1}, \quad (5)$$

$$H_2 = -\frac{1}{2}\nabla_{r_2}^2 - \frac{Z_P}{s_2}, \quad (6)$$

Las funciones propias de H_1 y H_2 de los electrones activo y pasivo respectivamente, para un sistema de referencia ubicado en el punto medio de R , vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \Phi_{1i,f}(\mathbf{r}_1, t) &= \\ &= \Phi_{1i,f}(x_1) \exp\left[-i(\epsilon_{1i,f}t + \frac{v^2}{8}t + \frac{\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}_1}{2})\right] \end{aligned} \quad (7)$$

y

$$\begin{aligned} \Phi_{2i,f}(\mathbf{r}_2, t) &= \\ &= \Phi_{2i,f}(s_2) \exp\left[-i(\epsilon_{2i,f}t + \frac{v^2}{8}t + \frac{\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}_2}{2})\right] \end{aligned} \quad (8)$$

Donde $\Phi_{1i,f}$ y $\Phi_{2i,f}$ son las funciones de onda hidrogénicas inicial y final del electrón activo y pasivo, respectivamente, y $\epsilon_{1i,f}$ y $\epsilon_{2i,f}$ son sus energías de orbitación correspondientes.

Suponemos ahora que es distorsionada solamente la función de onda del electrón activo, tal que

$$\chi_{i,f}^\pm(1,2) = \chi_{i,f}^\pm \Phi_{2i}, \quad (9)$$

donde (1) representa al electrón activo y (2) al electrón pasivo. La función de onda distorsionada del electrón activo es elegida como

$$\chi_{i,f}^\pm(\mathbf{r}_1, t) = \Phi_{1i,f}(\mathbf{r}_1, t)(s_1v \pm s_1v)^{\mp iv} \mathcal{F}^\pm(\varphi, t), \quad (10)$$

donde $v = \frac{Z_P - 1}{v}$,

$$\mathcal{F}^+(\rho, t) = \exp\left\{-i \int_{-\infty}^t V_s(R') dt'\right\} \quad (11)$$

y

$$\mathcal{F}^-(\rho, t) = \exp\left\{+i \int_t^{+\infty} V_s(R') dt'\right\}. \quad (12)$$

En las ecuaciones (11) y (12) $\mathbf{R}(t') = \rho + vt'$, y

$$V_s(\mathbf{R}') = \frac{Z_P Z_T}{R'} - \langle \Phi_{2i} | \frac{Z_T}{x_2} | \Phi_{2i} \rangle$$

que es el potencial estático. Este incluye las interacciones del núcleo blanco con el electrón pasivo y el núcleo del proyectil.

La adopción de las funciones distorsionadas dadas por la ecuación (10) implica considerar el electrón activo descrito en la presencia simultánea de los campos eléctricos del núcleo del blanco y del proyectil en los canales de entrada y salida. La fase eikonal distorsionada propuesta, la cual depende del parámetro v y por ende de una carga efectiva $Z_P^* = Z_P - 1$, representa al electrón del blanco viajando en un estado del continuo (dentro de una aproximación eikonal) de un proyectil puntual de carga Z_P^* . Las funciones distorsionadas darán entonces una adecuada representación de los canales de entrada y salida a distancias proyectil-blanco suficientemente grandes. Sin embargo, a las energías consideradas, ya ha sido demostrado que para la excitación electrónica, colaboran principalmente parámetros de impacto intermedios y grandes (en general del orden o mayores que el radio de orbitación del electrón activo en su estado inicial), al menos para proyectiles desnudos de electrones⁶. Las fases exponenciales asociadas con el potencial estático V_s corregirán la trayectoria del proyectil para un parámetro de impacto fijo, no afectando a la probabilidad de excitación del hidrógeno.

Usando (10), (11) y (12) en la amplitud de transición (1), obtenemos (ver por ejemplo Ref. 7):

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{if}^-(\rho) &= \mathcal{F}(\rho)(-i) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int d\mathbf{r}_1 \Phi_{1f}^* \Phi_{1i} (s_1v - s_1\cdot\mathbf{v})^{-iv} \times \\ &\times \left[-\frac{\nabla^2}{2} - \nabla \ln \Phi_{1i} \cdot \nabla + V'_{ap}(s_1)\right] (s_1v + s_1\cdot\mathbf{v})^{-iv} \end{aligned} \quad (13)$$

donde

$$\mathcal{F}(\rho, t) = \mathcal{F}^{*-}(\rho, t) \mathcal{F}^+(\rho, t) \quad (14)$$

y

$$V'_{ap}(s_1) = \langle \Phi_{2i} | \frac{1}{|s_1 - s_2|} | \Phi_{2i} \rangle - \frac{1}{s_1} \quad (15)$$

La sección eficaz diferencial puede calcularse usando la expresión (ver Ref. 8):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \mu^2 v^2 \left| \int_0^\infty d\rho \rho J_m(2\mu v \rho \sin(\theta/2)) \mathcal{A}_{if}^-(\rho) \right|^2 \quad (16)$$

Aquí m es el cambio en el número cuántico del momento orbital entre el estado inicial y el estado final del electrón, con el eje de cuantización en la dirección de la velocidad \mathbf{v} . J_m es la función de Bessel de primera clase y orden m . μ es la masa reducida de la colisión y θ es el ángulo de dispersión medido desde un sistema de referencia ubicado en el centro de masa.

Integrado en el parámetro de impacto, obtenemos la sección eficaz total, que como es evidente, resulta independiente del potencial estático:

$$\sigma = \int d\rho |A_{if}^-(\rho)|^2. \quad (17)$$

III. RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se calcularon las secciones eficaces diferenciales para la excitación del átomo de hidrógeno en la colisión $He^+ + H$ al estado $n=2$ y para energías del proyectil entre 50 keV y 200 keV y las secciones eficaces totales para energías entre 50 y 1000 keV. En la Fig. 1 se presentan, como ejemplo, los cálculos correspondientes a una energía de 75 keV/amu. Los resultados se comparan con datos experimentales obtenidos utilizando dos diferentes métodos^{4,5}. Se discrimina la contribución de los diferentes estados finales $2l$ ($2s, 2p_0$ y $2p_1$) a la excitación al nivel $n=2$ del blanco. Se observa que el estado $2p_1$ domina a ángulos de dispersión suficientemente grandes. Debido al cambio de proyección de momento angular entre los estados inicial y final ($\Delta m = \pm 1$) la sección eficaz diferencial correspondiente se anula a ángulo de dispersión $\theta = 0^\circ$, dominando para ángulos muy pequeños el estado final $2p_0$. La comparación entre resultados teóricos y experimentales, para excitación a la capa L del hidrógeno, es relativamente buena aún cuando para algunos ángulos se observa una diferencia importante entre las dos mediciones experimentales. En la Fig. 2 se presentan secciones eficaces totales para el sistema arriba descrito. Se muestran dos curvas diferentes calculadas dentro de la aproximación SE, incluyendo o no el potencial V'_{ap} en la expresión (13) de la amplitud de transición. Esto nos permite determinar la influencia de la distribución espacial del electrón pasivo (alrededor del núcleo del proyectil) sobre las secciones eficaces totales. Es evidente de la comparación de ambas curvas que dicha distribución da una colaboración pequeña dentro del rango energético estudiado. La sección eficaz eficaz total calculada incluyendo el potencial V'_{ap} resulta menor que la calculada sin incluirlo, para energías menores que 400 keV y resulta

mayor para energías superiores a ese valor.

Los resultados SE contrastan con los obtenidos usando diferentes aproximaciones del tipo Glauber (Glaul, Siglau, Siglau I; para una descripción detallada de las mismas ver Ref. 5. Dado que la aproximación SE no es válida para velocidades de impacto pequeñas, para energías menores que 60 keV nuestro cálculo subestima las secciones eficaces dadas en las mediciones experimentales. Para energías mayores el mejor acuerdo entre teoría y experimento es el obtenido usando la aproximación SE.

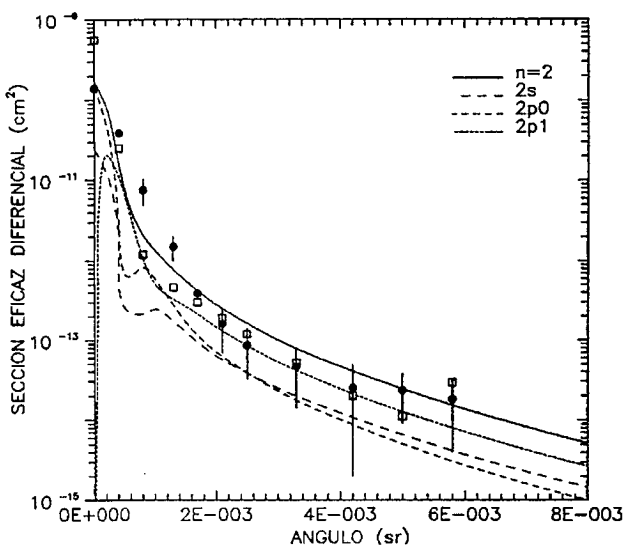


Fig. 1: Secciones Eficaces diferenciales para una energía del proyectil de 75 keV. Las mediciones experimentales son: \bullet y \circ ; Ref. 4. Nuestros cálculos: SE para excitación al estado $n=2$; y excitación a los estados $2s, 2p_0$ y $2p_1$.

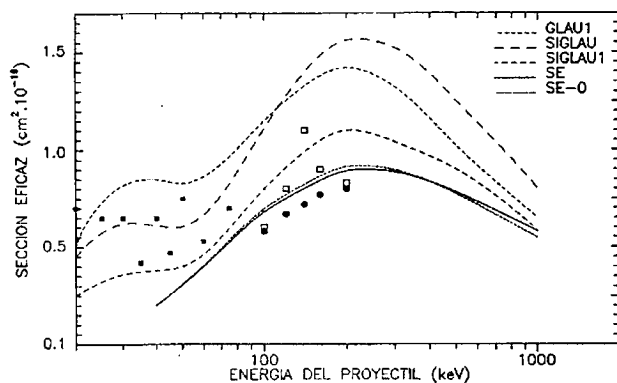


Figura 2: Secciones eficaces totales de excitación. Los datos experimentales son: \bullet, \circ Ref. 4. Las curvas teóricas se indican en la figura: Glaul., Siglau., Siglau1. Ref. 5, Nuestros cálculos son: SEA-0 con la misma fórmula pero con $V'_{ap}=0$.

REFERENCIAS

1- G.R. Deco, P.D. Fainstein and R.D. Rivarola, J. Phys. B: Atom. Molec. Opt. Phys. **19**, 213 (1986).
 2- G.H. Olivera, C.A. Ramirez, R.D. Rivarola, Phys. Rev. A **47**, 1000 (1992).
 3- J.M. Maidagan and R.D. Rivarola, J. Phys. B: Atom. Molec. Opt. Phys. **16**, 1211 (1983).
 4- J.E. Aldag, J.L. Peacher, P.J. Martin, V. Sutcliffe,

J. George, E. Redd, T.J. Kvale, D.M. Blankenship, and J.T. Park, Phys. Rev. A **23**, 1062 (1981).
 5- V. Franco, Phys. Rev. A **20**, 2297 (1979).
 6- A. Bugacov, J.M. Maidagan, R.D. Rivarola y R. Shingal, Phys. Rev. A **47**, 1052 (1993).
 7- J.M. Maidagan y R.D. Rivarola, J. Phys. B: Atom. Molec. Opt. Phys. **17**, 2477 (1984).
 8- R. McCarroll and A. Salin, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **1**, 163 (1968).

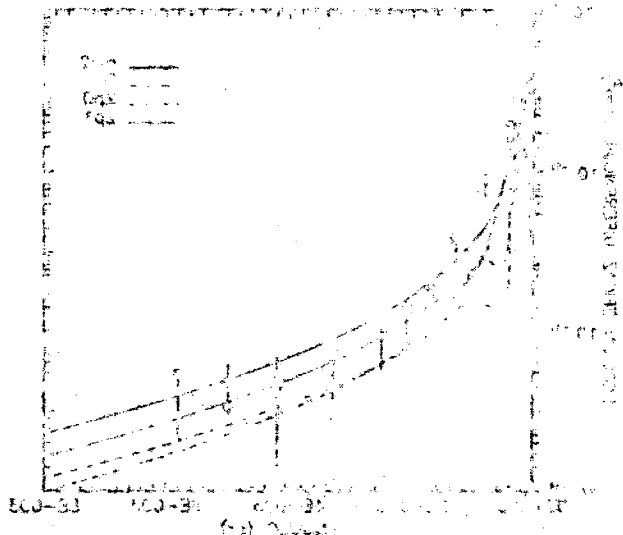


Fig. 1. Dependence of the ionization cross-section σ_{ion} on the electron energy E for the $1s$ orbital of the hydrogen atom. The curves correspond to the different values of the parameter α indicated in the legend. The solid line corresponds to $\alpha = 0$, the dashed line to $\alpha = 0.1$, and the dotted line to $\alpha = 0.2$.

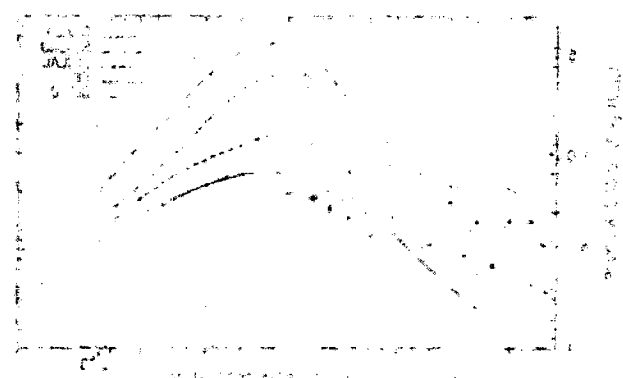


Fig. 2. Dependence of the ionization cross-section σ_{ion} on the electron energy E for the $1s$ orbital of the hydrogen atom. The curves correspond to the different values of the parameter α indicated in the legend. The solid line corresponds to $\alpha = 0$, the dashed line to $\alpha = 0.1$, and the dotted line to $\alpha = 0.2$.

$$\sigma_{ion} = \frac{4\pi a_0^2}{k} \left(\frac{E}{E_0} \right)^{-1} \left(\frac{E}{E_0} - 1 \right)^{-1/2} \left(\frac{E}{E_0} + 1 \right)^{-1/2} \left(\frac{E}{E_0} + 2 \right)^{-1/2} \left(\frac{E}{E_0} + 3 \right)^{-1/2} \dots$$

CONCLUSIONES Y AGRADECIMIENTOS

En este trabajo se han calculado las secciones eficaces de ionización para el orbital $1s$ del átomo de hidrógeno, considerando el efecto de la polarización del átomo por el electrón incidente. Los cálculos se realizaron utilizando el método de los momentos, el cual permite obtener resultados exactos para cualquier energía de incidencia del electrón. Se observó que la inclusión de los términos de polarización aumenta significativamente el valor de la sección eficaz de ionización, especialmente en el rango de energías bajas. Este efecto es más pronunciado a medida que el parámetro de polarización α aumenta. Los resultados obtenidos se compararon con los de la teoría de Born y con los de otros autores, mostrando un excelente acuerdo. Se agradece a la Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica (CONICET) por el apoyo financiero otorgado durante el desarrollo de este trabajo.