

Doble captura electrónica a estados simple y doblemente excitados del proyectil

H.F. Busnengo, A.E. Martínez, R.D. Rivarola

INSTITUTO DE FISICA ROSARIO (CONICET-UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO) AV. PELLEGRINI 250 - (2000) ROSARIO - ARGENTINA

R. Gayet

LABORATOIRE DES COLLISIONS ATOMIQUES, CENTRE DE PHYSIQUE THEORETIQUE ET DES MODELISATIONS UNIVERSITE DE BORDEAUX I
NOUVELLE, FRANCE

J. Hanssen

LABORATOIRE DE PHYSIQUE MOLECULAIRE ET DES COLLISIONS, INSTITUT DE PHYSIQUE, 1 BLD ARAGO, TECHNOPOLE 2000, 57078
METZ, CEDEX 3, FRANCE

e-mail: busnengo@unrctu.edu.ar

En el presente trabajo se analiza el proceso de doble captura electrónica en el marco de una aproximación de electrón independiente. Se calculan secciones eficaces totales correspondientes a los procesos de captura al estado fundamental como así también a estados simple y doblemente excitados del proyectil, por impacto de iones He^{2+} , Li^{3+} y B^{5+} sobre blancos $\text{He}(1s^2)$. Los cálculos teóricos son llevados a cabo utilizando los modelos de onda distorsionada *Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State* y *Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State*. Los resultados obtenidos se comparan con cálculos previos correspondientes a la aproximación *Continuum Distorted Wave* y con los resultados experimentales disponibles.

In the present work double electron capture processes are analyzed within an independent electron approximation. Total cross sections corresponding to capture to the final ground state and to single and doubly excited states processes by impact of He^{2+} , Li^{3+} and B^{5+} ions on $\text{He}(1s^2)$ are calculated. Theoretical calculations are carried out using the *Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State* and the *Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State* approximations. Total cross sections are compared with previous calculations obtained with the *Continuum Distorted Wave* approximation and with available experimental data.

Introducción

El proceso de doble captura electrónica para energías de impacto intermedias y altas ha sido estudiado a través de dos modelos diferentes: la aproximación de electrón independiente (IEA) [1] y un modelo cuatro cuerpos [2].

En ambos casos, fueron utilizadas las aproximaciones *Continuum Distorted Wave - Eikonal Initial State* (CDW-EIS) y *Continuum Distorted Wave* (CDW). En estos modelos la función de onda del estado ligado final es distorsionada con factores del continuo mientras que en el canal inicial se utilizan fases eikonales o factores del continuo según se use el modelo CDW-EIS o CDW, respectivamente.

Ha sido demostrado [3] que los potenciales perturbadores en los canales inicial y final pueden escribirse como la suma de dos potenciales perturbadores asociados a cada uno de los electrones.

Por lo tanto, el estado ligado inicial (final) de los dos electrones puede distorsionarse por un producto de dos factores de distorsión asociados con la interacciones entre el proyectil (núcleo blanco) y cada uno de los electrones, aún cuando no es utilizado el modelo de electrón independiente [3].

Dentro de la IEA, el estado ligado inicial es representado por un producto de orbitales hidrogenicos de un electrón con una carga nuclear efectiva $Z_T^* = Z_T - 5/16$, donde Z_T es la carga del núcleo del blanco, en este caso $Z_T=2$. Cuando se analiza la captura al estado final

$1s^2$, la energía atómica es dividida entre los dos electrones en los estados inicial y final y la energía de cada orbital es tomada como $-(Z_T^*)^2/2$. Cada electrón se supone evolucionando independientemente. En consecuencia, la parte electrónica de la amplitud de transición puede ser escrita como producto de amplitudes correspondientes a un problema monoeléctrico.

En el presente trabajo estudiaremos la contribución proveniente de estados finales simple y doblemente excitados a la sección eficaz total de doble captura electrónica, dentro del marco de la aproximación de electrón independiente. Esta contribución ha sido evaluada anteriormente para el modelo CDW [4]. Ha sido encontrado que dicha contribución es despreciable para proyectiles He^{2+} , sin embargo juega un papel importante para los iones Li^{3+} y B^{5+} [2]. En este trabajo son presentados nuevos resultados correspondientes al modelo CDW-EIS para los mismos sistemas analizados en la referencia [4], los cuales son comparados con datos experimentales y con los resultados CDW ya mencionados.

De acuerdo a nuestros estudios previos sobre diferentes procesos de captura electrónica simple [5,6] introducimos la aproximación *Continuum Distorted Wave-Eikonal Final State* (CDW-EFS). Esta aproximación en general resulta más adecuada para representar aquellos sistemas para los cuales $Z_P > Z_T$ [5,6]. Dentro de esta aproximación, en el canal final, la función de onda del estado ligado es distorsionada con

fases eikonalas mientras que en el canal inicial, la función de onda del estado ligado es distorsionada con factores del continuo.

De acuerdo con el procedimiento seguido en la referencia [4], los estados finales de dos electrones pueden ser construidos utilizando orbitales monoeléctricos ortogonales. Dentro del acoplamiento LS , definimos la simetría $S = {}^{2S+1}LM$ donde S , L y M son el *spin* total, el momento angular total y la proyección del momento angular total respectivamente. Para una simetría fija S , la función de onda del estado final $\Psi_f(1,2)$ (1 y 2 representan las coordenadas de los dos electrones) es desarrollada sobre un conjunto de dos configuraciones electrónicas $\Phi_{\lambda,\lambda'}^{S,LM}(1,2)$ donde $\lambda=(n_\lambda, l_\lambda)$ y $\lambda'=(n_{\lambda'}, l_{\lambda'})$.

La probabilidad de transición P_{if} puede ser escrita del siguiente modo

$$P_{if} = \sum_{n_\lambda=1}^{n_0} \sum_{l_\lambda=0}^{n_\lambda-1} \sum_{n_{\lambda'} > n_\lambda, l_{\lambda'}=l_0}^{n_0} \sum_{l_\lambda=0}^{n_\lambda-1} \beta_{\lambda\lambda'} \sum_{L=|l_\lambda-l_{\lambda'}|, \Delta L=2}^{l_\lambda+l_{\lambda'}} \sum_{M=-L}^{+L} \sum_{m_1=\min}^{\max} \sum_{m_2=\min}^{\max} (l_\lambda m_1, l_{\lambda'} M - m_1 | LM) (l_\lambda m_2, l_{\lambda'} M - m_2 | LM) \times A(\lambda, m_1) A(\lambda', M - m_1) A^*(\lambda, m_2) A^*(\lambda', M - m_2)$$

donde n_0 es el máximo valor del número cuántico final considerado en el estado final. Además, $l_0 = 0$ si $n_\lambda > n_{\lambda'}$ y $l_0 = l_\lambda$ si $n_\lambda = n_{\lambda'}$; \min es el mayor entre los números $-l_\lambda$ y $M-l_{\lambda'}$, \max es el mayor entre los números l_λ and $M+l_{\lambda'}$, $\beta_{\lambda\lambda'} = 2$ si $\lambda \neq \lambda'$ ó 1 si $\lambda = \lambda'$, $(l m, l' m' | L M)$ son los coeficientes Clebsch-Gordan y $A(\lambda, m)$ representa la amplitud monoeléctrica de captura al orbital hidrogénico $n_\lambda l_\lambda m$.

En el presente trabajo, la carga efectiva correspondiente a los distintos orbitales electrónicos finales ocupados por los electrones capturados son elegidos como en la referencia [4].

Resultados y discusiones

En la Figura 1 se presentan secciones eficaces totales de doble captura electrónica por impacto de iones He^{2+} , Li^{3+} y B^{5+} sobre $\text{He}(1s^2)$. Los cálculos teóricos han sido llevados a cabo teniendo en cuenta los procesos de captura al estado fundamental y a estados simple y doblemente excitados con $n_0 = 4$.

En el caso de proyectiles He^{2+} , puede observarse que para velocidades $v > 2 Z_p = 4$, los resultados obtenidos con las tres aproximaciones CDW, CDW-EIS y CDW-EFS resultan en buen acuerdo entre sí y con los resultados experimentales. Para velocidades de impacto menores, las secciones eficaces CDW tienden a sobreestimar los valores medidos. Por su parte los resultados CDW-EIS y CDW-EFS representan mejor los datos experimentales, sin embargo las SET-CDW-EIS parecerían subestimar ligeramente las SET experimentales para las velocidades más bajas analizadas.

En el caso de proyectiles Li^{3+} las SET-CDW sobreestiman los datos experimentales. Por su parte, los resultados CDW-EIS y CDW-EFS están en muy buen

acuerdo entre sí en todo el rango de velocidades estudiado, prediciendo correctamente los valores medidos de las SET para $v > 0,9 Z_p = 2,7$ y sobreestimándolos para velocidades menores.

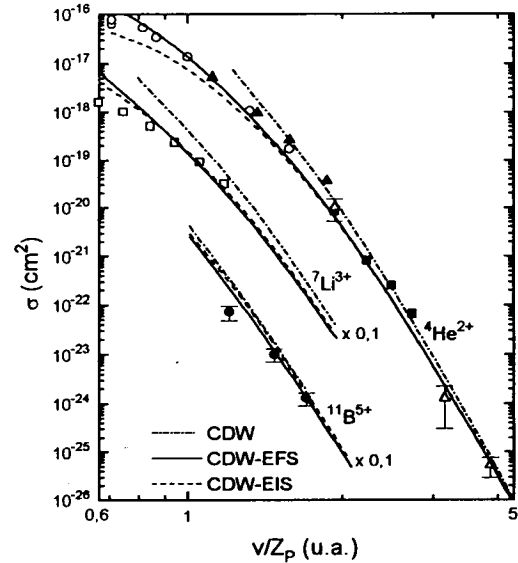


Figura 1: Secciones eficaces totales de doble captura electrónica por impacto de iones He^{2+} , Li^{3+} y B^{5+} sobre He . Los datos teóricos han sido obtenidos utilizando $n_0=4$. ---- CDW-EFS, - - - - CDW[4], - · - · - CDW-EIS. Los resultados experimentales han sido extraídos de las referencias [7-12]. Los datos teóricos y experimentales correspondientes a iones Li^{3+} y B^{5+} han sido multiplicados por 0,1.

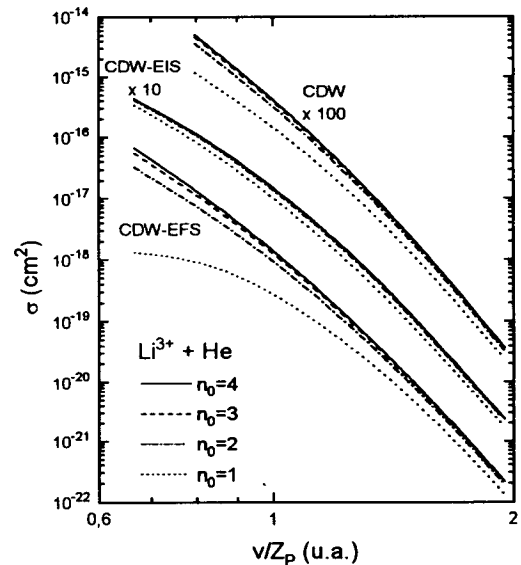


Figura 2: Secciones eficaces de doble captura por impacto de iones Li^{3+} sobre He . Contribución de los procesos de captura a diferentes estados excitados obtenidas con las aproximaciones CDW [4], CDW-EFS y CDW-EIS. ---- $n_0=4$, - - - $n_0=3$, - · - · - $n_0=2$, ····· $n_0=1$. Los datos teóricos correspondientes a las aproximaciones CDW-EIS y CDW han sido multiplicados por 10 y 100 respectivamente.

Para proyectiles B^{5+} , las tres aproximaciones están en buen acuerdo entre sí y con los datos experimentales a pesar que parece que todas ellas tienden a sobreestimar las secciones eficaces para las energías más bajas analizadas.

En la Figura 2 se muestra la contribución a la SET de doble captura proveniente de los procesos de captura a los distintos estados finales excitados para las tres aproximaciones: CDW, CDW-EIS y CDW-EFS. Las SET-CDW-EIS y las -CDW han sido multiplicadas por 10 y 100 respectivamente.

Para todas las aproximaciones teóricas puede verse que la contribución de estados finales excitados resulta importante. Sin embargo, esta contribución resulta más importante en el caso de la aproximación CDW-EFS que en la CDW y más aún que para la aproximación CDW-EIS. En el caso de la aproximación CDW-EIS, se observa que el hecho de tener en cuenta estados finales excitados caracterizados por $n > 2$ no modifica las SET resultantes. Lo mismo sucede en el caso de las aproximaciones CDW y CDW-EFS para las velocidades más altas estudiadas, sin embargo para velocidades intermedias la contribución de los procesos de captura a dichos estados resulta significativa.

Para proyectiles He^{2+} , se ha encontrado que para ninguna de las tres aproximaciones resulta importante la contribución de la captura a estados excitados. Por el contrario, en el caso de B^{5+} la importancia de los procesos de captura a estados excitados resulta aún más importante que para el caso de Li^{3+} (mostrado en la Figura 2) como es previsible. Nuevamente, como se ha encontrado para el Li^{3+} para proyectiles B^{5+} se observa que la captura a estados excitados resulta más importante para la aproximación CDW-EFS que para la CDW y a su vez, dicha colaboración es más importante para la aproximación CDW que para la CDW-EIS.

Referencias

- 1 - R. Gayet, J. Hanssen, A.E. Martínez y R.D. Rivarola, *Z. Phys. D* **18**, 345 (1991).
- 2 - R. Gayet, J. Hanssen, A.E. Martínez y R.D. Rivarola, *Comments on Atomic and Molecular Physics* **30**, 231 (1994).
- 3 - R. Gayet, R.D. Rivarola y A. Salin, *J. Phys. B* **14**, 2421 (1981).
- 4 - R. Gayet, J. Hanssen, A.E. Martínez y R.D. Rivarola, *Nucl. Instr. and Meth. B* **86**, 158 (1994).
- 5 - H.F. Busnengo, A.E. Martínez y R.D. Rivarola, *Phys. Scripta* **51**, 190 (1995).
- 6 - H.F. Busnengo, A.E. Martínez y R.D. Rivarola, *J. Phys. B* **29**, 4193 (1996).
- 7 - R.D. Dubois, *Phys. Rev. A* **36**, 2585 (1987).
- 8 - R. Schuch, E. Justiniano, H. Vogt, G.R. Deco, N. Grün, *J. Phys. B* **24**, L133 (1991).
- 9 - E. McDaniel, M.R. Flannery, H.W. Ellis, F.L. Eisele y W. Pope, *U.S. Army Missile Research and Development Command Technical Report* 78 (1977).
- 10 - N.V. de Castro Faria, F.L. Freire Jr. y A.G. Pinho, *Phys. Rev. A* **37**, 280 (1988).
- 11 - M.B. Shah y H.B. Gilbody, *J. Phys. B* **18**, 899 (1985).

- 12 - R. Hippler, S. Datz, P.D. Miller, P.L. Pepmiller y P.F. Dittner, *Phys. Rev. A* **35**, 585 (1987).