

Captura electrónica simple desde blancos H_2^+ por H^+ .

H.F. BUSNENGO, S.E. CORCHS y R.D. RIVAROLA

INSTITUTO DE FISICA ROSARIO (CONICET-UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO)
AV. PELLEGRINI 250 - (2000) ROSARIO - ARGENTINA
e-mail: busnengo@unrctu.edu.ar

En el presente trabajo se presenta la aproximación *Continuum Distorted Wave molecular* para describir procesos de captura electrónica simple desde blancos H_2^+ . En esta aproximación, la función de onda ligada inicial es distorsionada por un factor del continuo proyectil-electrón. En el canal final, la función de onda del estado es distorsionada por un producto de los factores del continuo correspondientes a las interacciones entre el electrón y cada uno de los núcleos del blanco. Se calculan secciones eficaces doble diferenciales en función del ángulo de salida del proyectil para diferentes orientaciones moleculares para el caso de impacto de protones.

In the present work, the *molecular Continuum Distorted Wave* approximation is formulated for single electron capture from H_2^+ targets. The initial bound wavefunction is distorted by a projectile-electron continuum factor. In the exit channel, the final electronic wavefunction is distorted by a product of the continuum factors corresponding to the interaction between the electron and each one of the nuclei of the target. The doubly differential cross sections as a function of the projectile scattering angle are evaluated for different molecular alignments for the case of proton impact.

Introducción

Durante los últimos años, varios autores han dedicado numerosos trabajos al estudio teórico de procesos de colisión con blancos moleculares y en particular al análisis de la captura electrónica¹⁻⁷. Debido a su carácter monoeléctrico, el ion H_2^+ aparece como el blanco más sencillo para ser estudiado desde un punto de vista teórico en el marco de las colisiones ion-molécula.

Gran parte de los cálculos teóricos existentes de secciones eficaces de captura desde blancos moleculares utilizan la aproximación Oppenheimer-Brinkman-Kramers⁸ (OBK). Sin embargo, dicha aproximación no es adecuada para representar la reacción de captura dado que no posee correctas condiciones asintóticas y no es capaz de describir el mecanismo de doble dispersión de Thomas, el cual juega un rol fundamental en la captura desde blancos atómicos a energías de impacto altas. Usando el modelo OBK para el caso del blanco H_2^+ , la amplitud de transición se expresa como suma coherente de amplitudes atómicas de captura desde cada uno de los centros del ion molecular^{3,4}, dando origen a fenómenos de interferencia ampliamente estudiados.

Existen otros trabajos en los que se mejora la representación del proceso empleando diferentes modelos tales como la primera aproximación de Born con correctas condiciones asintóticas y el primer orden de la serie de Bates^{6,7}. Sin embargo, en el canal final el electrón es siempre considerado en interacción con sólo uno de los núcleos del ion residual en lugar de en presencia simultánea de ambos, obteniéndose una aproximación de *centros efectivos independientes*. De este modo, se consigue escribir la amplitud de transición molecular como una suma coherente de amplitudes atómicas (como en el

caso del modelo OBK) calculadas de acuerdo a la aproximación empleada.

En el presente trabajo se generaliza el modelo de Onda Distorsionada del Continuo (CDW) para el caso de blancos H_2^+ . En el canal de entrada la función de onda ligada del electrón es distorsionada por un factor del continuo electrón-proyectil. En el canal de salida, en correspondencia con el modelo CDW para blancos atómicos, la función de onda ligada debería ser distorsionada por el factor del continuo del ion H_2^+ . Sin embargo, tal factor sólo puede ser obtenido en forma numérica y por lo tanto su utilización provoca importantes dificultades en el cálculo de secciones eficaces. Con el objeto de evitar tales dificultades, en el presente trabajo este factor del continuo es aproximado por un producto de factores del continuo asociados a cada uno de los núcleos del H_2^+ . Al modelo obtenido distorsionando de este modo los respectivos estados ligados en los canales inicial y final lo llamaremos CDW molecular. En este modelo, tanto en el canal de entrada como en el de salida se describe al electrón en presencia simultánea del proyectil y de los dos núcleos del H_2^+ .

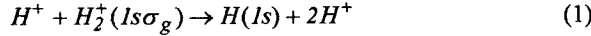
En la siguiente sección se formula el problema de la captura electrónica desde H_2^+ dentro del modelo CDW molecular y se muestran las aproximaciones necesarias para obtener, a partir del mismo, un modelo de centros efectivos CDW. A continuación se presentan resultados de secciones eficaces doble diferenciales en función del ángulo de salida del proyectil para orientaciones fijas de la molécula (SEDD). Se comparan los resultados obtenidos con ambos modelos CDW mencionados, para el caso de impacto de protones con una energía de colisión

$E=500keV$. Finalmente, en la última sección se resumen las conclusiones obtenidas.

En todo el transcurso del trabajo se utilizan unidades atómicas.

Teoría

Supongamos un ion pesado desnudo de masa M_P y carga Z_P que impacta con velocidad v sobre un ion molecular H_2^+ y consideremos la siguiente reacción de captura



Dado que nuestro interés se centra en las energías de colisión intermedias y altas, es válido describir el proceso (1) utilizando el método de parámetro de impacto. Además el vector internuclear ρ de la molécula puede ser considerado constante durante todo el proceso de colisión*.

Dentro del modelo OBK y trabajando en el sistema de referencia del laboratorio, la función de onda electrónica inicial puede ser escrita de la forma

$$\Phi_i(\mathbf{r}, t) = N_i[\varphi_{1s}(\mathbf{r}_1) + \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2)]\exp(-i\varepsilon_i t) \quad (2)$$

donde φ_{1s} es un orbital hidrogénico $1s$ con carga nuclear efectiva $Z_{ef} = 1.228u.a.$ y $\varepsilon_i = -1.083u.a.$ es la energía de ligadura del electrón en el estado fundamental del H_2^+ . Además \mathbf{r} , \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 indican las coordenadas del electrón respecto al centro de masa, al núcleo 1 y al núcleo 2 de la molécula respectivamente mientras que N_i es la correspondiente constante de normalización.

La amplitud de transición desde el ion molecular resulta igual a una suma coherente de amplitudes asociadas a los dos centros efectivos trasladados uno respecto del otro en el vector ρ ^{3,4}

$$A_{if}^M(\mathbf{b}) = N_i \left[\exp\left(i\frac{\alpha_z \rho_z}{2}\right) a_{if}(\mathbf{b}_1) + \exp\left(-i\frac{\alpha_z \rho_z}{2}\right) a_{if}(\mathbf{b}_2) \right] \quad (3)$$

donde los vectores \mathbf{b} , \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 indican los parámetros de impacto del proyectil con respecto al centro de masa de la molécula, al núcleo 1 y al núcleo 2 respectivamente. En la ecuación (3), a_{if} representa la amplitud de transición (calculada con el modelo OBK) de captura desde el estado $1s$ de un blanco atómico hidrogénico con energía de ligadura inicial ε_i y carga nuclear Z_{ef} . Además, α_z es la componente z (dada por la dirección de v) del impulso total α transferido por el proyectil.

Despreciando el efecto de la interacción internuclear, las SEDD pueden ser calculadas del siguiente modo⁴

$$\left(\frac{d\sigma^{M,OBK}(\theta)}{d\Omega d\rho} \right)_{LAB} = 2|N_i|^2 (M_P v)^2 |R^{A,OBK}(M_P v \theta)|^2 \times [1 + \cos(\alpha \cdot \rho)] =$$

* Para el caso de velocidades de impacto altas, los tiempos característicos de los movimientos roto-vibratorios de la molécula resultan mucho mayores que el tiempo durante el cual ocurre la interacción proyectil-blanco.

$$= 2|N_i|^2 \left(\frac{d\sigma^{A,OBK}(\theta)}{d\Omega} \right)_{LAB} [1 + \cos(\alpha \cdot \rho)] \quad (4)$$

donde $R^{A,OBK}$ es la transformada de Fourier de a_{if} ,

$$\left(\frac{d\sigma^{A,OBK}(\theta)}{d\Omega} \right)_{LAB} \text{ es la correspondiente sección eficaz}$$

diferencial de captura desde un blanco hidrogénico calculada con el modelo OBK y θ es el ángulo de salida del proyectil.

A fin de obtener una mejor descripción del proceso de captura, en el presente trabajo se generaliza el modelo CDW para el caso de blancos H_2^+ . En este modelo, al cual llamamos CDW molecular, las funciones de onda distorsionadas correspondientes a los canales inicial y final del proceso (1) son elegidas del siguiente modo

$$\chi_i^+ = \Phi_i(\mathbf{r}) L_i^+ = N_i [\varphi_{1s}(\mathbf{r}_1) + \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2)] \exp(-i\varepsilon_i t) \times N \left(\frac{Z_P}{v} \right) {}_1F_1 \left[i \frac{Z_P}{v}; 1; i(\mathbf{v} \cdot \mathbf{s} + v s) \right] \quad (5)$$

$$\chi_f^- = \Phi_f(\mathbf{s}) L_f^- = \varphi_f(\mathbf{s}) \exp(i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r} - i \frac{v^2}{2} t - i\varepsilon_f t) \times N^* \left(\frac{Z_1}{v} \right) {}_1F_1 \left[i \frac{Z_1}{v}; 1; -i(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}_1 + v r_1) \right] \times N^* \left(\frac{Z_2}{v} \right) {}_1F_1 \left[i \frac{Z_2}{v}; 1; -i(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}_2 + v r_2) \right] \quad (6)$$

donde L_i^+ representa el factor del continuo coulombiano electrón-proyectil y L_f^- es un producto de los factores de los continuos coulombianos electrón-núcleo 1 y electrón-núcleo 2. Las cargas de los núcleos 1 y 2 son indicadas con Z_1 y Z_2 respectivamente mientras que $N \left(\frac{Z}{v} \right) = \exp\left(\frac{Z\pi}{2v}\right) \Gamma\left(1 - i \frac{Z}{v}\right)$.

En la ecuación (6), \mathbf{s} es la coordenada electrón-proyectil y ε_f es la energía de ligadura final del electrón. Esta forma de producto de factores del continuo que aparece como distorsión en el canal final es una aproximación correcta del continuo del ion H_2^+ en el límite de altas velocidades relativistas del electrón¹⁰. Este producto de factores del continuo ha sido también utilizado como distorsión final en el canal de salida en procesos de ionización dentro de la aproximación CDW-EIS¹¹. Por lo tanto, puede esperarse que la elección (6) resulte razonable y pueda ser justificada para altas velocidades de impacto. La amplitud de transición está dada por la expresión

$$A_{if}^M(\mathbf{b}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \chi_f^- | W_i | \chi_i^+ \rangle \quad (7)$$

con

$$W_i \chi_i^+ = -\nabla_r \Phi_i(\mathbf{r}) \cdot \nabla_s \left(\frac{\chi_i^+}{\Phi_i(\mathbf{r})} \right) \quad (8)$$

A partir de (5), (6), (7) y (8) se obtiene la amplitud de transición correspondiente al modelo CDW molecular

$$A_{if}^M(\mathbf{b}) = N_i \left[\exp\left(i \frac{\alpha_z \rho_z}{2}\right) I_- + \exp\left(-i \frac{\alpha_z \rho_z}{2}\right) I_+ \right] \quad (9)$$

donde se ha definido

$$I_{\pm} = iN \left(\frac{Z_P}{v} \right) N \left(\frac{Z_T}{v} \right) N \left(\frac{Z_T}{v} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int d\mathbf{r}' \varphi_f(s) \times \\ \times \exp(-iv \cdot \mathbf{r}' + i \frac{v^2}{2} t' + i \Delta E t') \times \\ \times {}_1F_1 \left[i \frac{Z_T}{v}; i; i(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}' + v r') \right] \times \\ \times {}_1F_1 \left[i \frac{Z_T}{v}; i; i(\mathbf{v} \cdot (\mathbf{r}' \mp \rho) + v |\mathbf{r}' \mp \rho|) \right] \times \\ \times \nabla_{\mathbf{r}'} \varphi_{1s}(\mathbf{r}') \cdot \nabla_{\mathbf{s}} {}_1F_1 \left[i \frac{Z_P}{v}; i; i(\mathbf{v} \cdot \mathbf{s} + v s) \right] \quad (10)$$

siendo $\Delta E = \varepsilon_f - \varepsilon_i$ y $Z_T = Z_1 = Z_2$.

Transformando Fourier la ecuación (9), se obtiene

$$R^{M,CDW}(\eta) = N_i \left[\exp\left(i \frac{\alpha \cdot \rho}{2}\right) \tilde{I}_- + \exp\left(-i \frac{\alpha \cdot \rho}{2}\right) \tilde{I}_+ \right] \quad (11)$$

donde \tilde{I}_{\pm} denota la transformada de Fourier de I_{\pm} . A partir de la ecuación (10) puede verificarse que $\tilde{I}_+ \neq \tilde{I}_-$ y por lo tanto no es posible recuperar una expresión simple como (4) para las SEDD. Las transformadas \tilde{I}_{\pm} deben ser calculadas numéricamente y las correspondientes SEDD dentro del modelo CDW molecular resultan

$$\left(\frac{d\sigma^{M,CDW}}{d\Omega d\Omega_{\rho}} \right)_{LAB} = |N_i|^2 (M_{Pv})^2 \left| R^{M,CDW}(M_{Pv}\theta) \right|^2 = \\ = |N_i|^2 (M_{Pv})^2 \times \\ \times \left| \tilde{I}_- \exp\left(i \frac{\alpha \cdot \rho}{2}\right) + \tilde{I}_+ \exp\left(-i \frac{\alpha \cdot \rho}{2}\right) \right|^2 \quad (12)$$

Con el objeto de obtener la expresión correspondiente a un modelo de centros efectivos a partir del modelo CDW molecular es necesario llevar a cabo aproximaciones adicionales. Dichas aproximaciones consisten en realizar las siguientes sustituciones

$$N \left(\frac{Z_T}{v} \right) {}_1F_1 \left[i \frac{Z_T}{v}; i; i(\mathbf{v} \cdot (\mathbf{r} \pm \rho) + v |\mathbf{r} \pm \rho|) \right] \rightarrow 1 \quad (13)$$

en el cálculo de \tilde{I}_{\pm} .

Si durante la evaluación de \tilde{I}_{\pm} son llevadas a cabo las aproximaciones (13), nuevamente se obtiene una expresión similar a (4), donde las secciones eficaces atómicas ahora corresponden al modelo CDW

$$\left(\frac{d\sigma^{M,CDW}(\theta)}{d\Omega d\Omega_{\rho}} \right)_{LAB} = |N_i|^2 \left(\frac{d\sigma^{A,CDW}(\theta)}{d\Omega} \right)_{LAB} [1 + \cos(\alpha \cdot \rho)] \quad (14)$$

A partir de ahora diremos que las SEDD corresponden al modelo de centros efectivos CDW cuando las mismas se obtienen a partir de la expresión (14).

Físicamente, hacer las aproximaciones (13) equivale a pensar que el electrón es capturado desde las proximidades de uno de los núcleos del ion H_2^+ y que por lo tanto, durante dicho proceso de captura, puede ignorarse la influencia del otro núcleo de la molécula en lo que se refiere al factor de distorsión. Resulta entonces que, al llevar a cabo estas aproximaciones, el modelo deja de describir al electrón en presencia simultánea del proyectil y de los dos núcleos del blanco, pasando a describirlo en presencia simultánea del proyectil y de cada uno de los núcleos del blanco, separadamente.

Resultados y discusiones

En esta sección se muestran secciones eficaces doble diferenciales en función del ángulo de salida del proyectil, para orientaciones fijas de la molécula correspondientes a la reacción (1), a una energía de colisión $E=500\text{keV}$. En las figuras 1-3 se muestran las SEDD correspondientes a las orientaciones del blanco dadas por los ángulos azimutales y axiales de ρ : $\theta_{\rho} = 0^{\circ}, 45^{\circ}, 90^{\circ}$ y $\phi_{\rho} = 0^{\circ}$ respectivamente, calculadas usando los modelos CDW molecular y a dos centros efectivos CDW. Con el objeto de llevar a cabo una comparación con el proceso de captura desde un blanco $H(1s)$, en las figuras también se incluyen resultados de secciones eficaces diferenciales correspondientes a la reacción $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$ calculadas con el modelo CDW atómico.

En la figura 1 ($\theta_{\rho} = 0^{\circ}$, $\phi_{\rho} = 0^{\circ}$) las tres SEDD muestran un comportamiento cualitativo similar, sin embargo los resultados obtenidos con el modelo CDW molecular son aproximadamente el doble que los correspondientes al modelo a dos centros efectivos CDW. Este último presenta resultados muy semejantes a la sección eficaz diferencial atómica tanto cualitativa como cuantitativamente. En particular, para los mayores ángulos de dispersión analizados en la figura 1, ambos cálculos predicen los mismos valores numéricos para las SEDD. La similitud de las formas de estas SEDD se debe a que para $\theta_{\rho} = 0^{\circ}$ y $\phi_{\rho} = 0^{\circ}$; el factor $[1 + \cos(\alpha \cdot \rho)]$ de la ecuación (14), resulta independiente del ángulo de dispersión.

En las figuras 2 y 3 ($\theta_{\rho} = 45^{\circ}$, $\phi_{\rho} = 0^{\circ}$ y $\theta_{\rho} = 90^{\circ}$, $\phi_{\rho} = 0^{\circ}$ respectivamente) las SEDD calculadas usando el modelo de centros efectivos presentan valles pronunciados para determinados ángulos de dispersión. Estos ángulos son aquellos para los cuales el factor $[1 + \cos(\alpha \cdot \rho)]$ de la expresión (14) se anula; resultando por lo tanto nula la correspondiente SEDD.

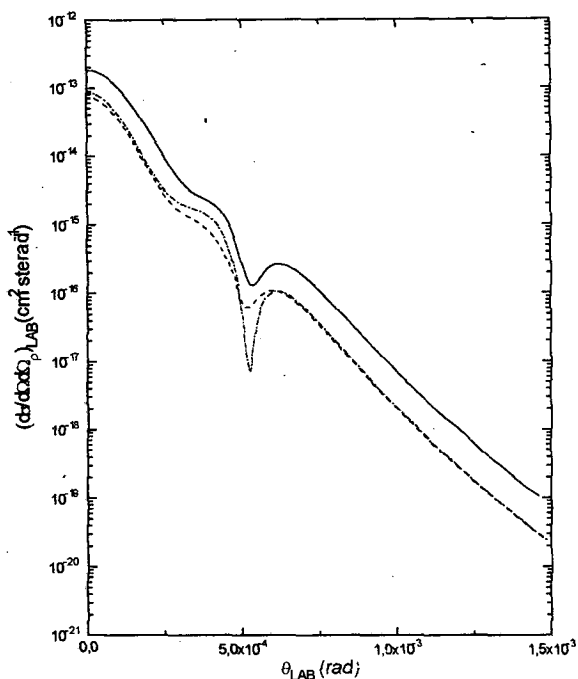


Figura 1: Secciones eficaces doble diferenciales de captura en función del ángulo de salida del proyectil para una orientación molecular dada por $\theta_p = 0^\circ$, $\varphi_p = 0^\circ$. ---- CDW molecular, - - - - modelo de centros efectivos CDW, - · - · - sección eficaz de captura desde hidrógeno atómico calculada con el modelo CDW.

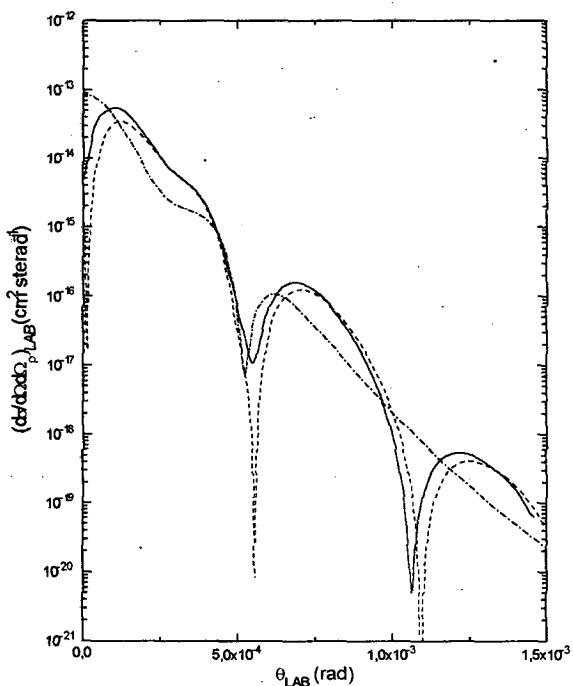


Figura 2: Idem figura 1 pero para una orientación molecular dada por $\theta_p = 45^\circ$, $\varphi_p = 0^\circ$.

Es interesante notar además que la presencia de dicho factor hace que la estructura de valles pronunciados se

repite periódicamente con θ . En lo que respecta al cálculo CDW molecular, las SEDD también presentan una estructura de valles, similar (aunque menos pronunciada) a la mostrada por las SEDD de centros efectivos CDW. En general, en las figuras 2 y 3 puede verse que la forma de los patrones de interferencia observados en las SEDD calculadas usando ambos modelos moleculares son muy similares cualitativamente y cuantitativamente especialmente para el ángulo $\theta_p = 90^\circ$. Las diferencias se observan principalmente en los ángulos de dispersión en los que se producen los valles.

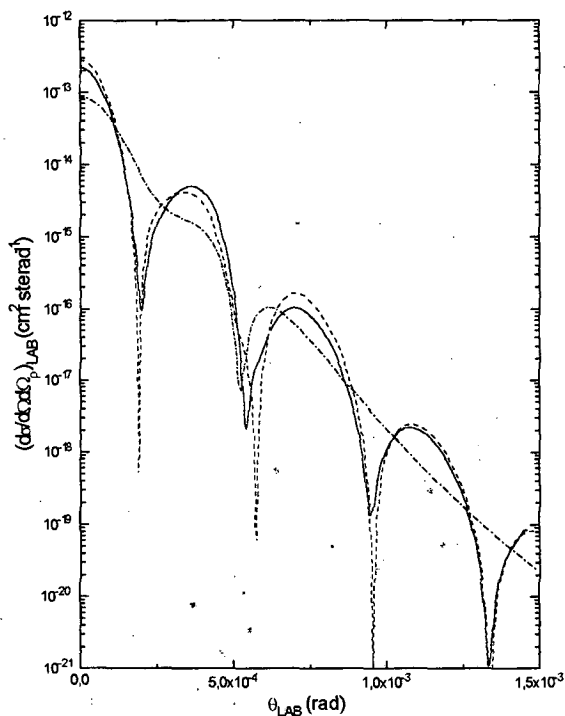


Figura 3: Idem figura 1 pero para una orientación molecular dada por $\theta_p = 90^\circ$, $\varphi_p = 0^\circ$.

De las tres figuras puede verse que las discrepancias entre los dos modelos moleculares disminuyen al aumentar θ_p .

Conclusiones

En el presente trabajo se presenta un modelo de Onda Distorsionada del Continuo para el estudio del proceso de captura electrónica desde blancos moleculares monoelectrónicos. Las secciones eficaces doble diferenciales obtenidas con el mismo son comparadas con las que resultan del uso de un modelo de *centros efectivos independientes*. El objetivo principal del trabajo es estudiar la influencia que tiene, sobre las secciones eficaces, el uso de distorsiones en el canal final que tengan en cuenta el carácter molecular del ion residual.

En general, se ha encontrado que la forma de los patrones de interferencia mostrados por las SEDD calculadas con ambos modelos es muy similar, encontrándose comportamientos tanto más similares

cuanto mayor es el ángulo formado por la velocidad v del proyectil y el eje internuclear.

Referencias

- 1 - T.F. Tuan y E. Gerjuoy, Phys. Rev. **117**, 756 (1960).
- 2 - N.C. Deb, A. Jain y J.H. McGuire, Phys. Rev. A **38**, 3769 (1988).
- 3 - R. Shingal y C.D. Lin, Phys. Rev. **A40**, 1302 (1989).
- 4 - Y.D. Wang, J.H. McGuire y R.D. Rivarola, Phys. Rev. **A40**, 3673 (1989).
- 5 - Y.D. Wang y J.H. McGuire, Phys. Rev. **A44**, 367 (1991).
- 6 - S.E. Corchs, R.D. Rivarola, J.H. McGuire y Y.D. Wang, Phys. Rev. **A47**, 201 (1993).
- 7 - S.E. Corchs, R.D. Rivarola, J.H. McGuire, Phys. Rev. **A47**, 3937 (1993).
- 8 - J.R. Oppenheimer, Phys. Rev. **31**, 349 (1928); H.C. Brinkman y A. Kramers, Proc. Acad. Sci. Amsterdam **33**, 973 (1930).
- 9 - I.M. Cheshire, Proc.Phys. Soc. **84**, 89 (1964).
- 10 - G.R. Deco y R.D. Rivarola, J. Phys. B **22**, 1043 (1989).
- 11 - P.D. Fainstein, V.H. Ponce y R.D. Rivarola, J. Phys. B **24**, 3091 (1991).