

DOBLE TRANSFERENCIA ELECTRONICA EN LA COLISION ION-ATOMO.

A.E. Martínez #, R. D. Rivarola,

Instituto de Física Rosario (CONICET -Universidad Nacional de Rosario),
Avenida Pellegrini 250, 2000 Rosario.

Robert Gayet y Jocelyn Hanssen.

Laboratoire des Collisions Atomiques, Université Bordeaux I, 33405 TALENCE CEDEX, France.

Se utilizan las aproximaciones CDW y CDW-EIS para estudiar la doble captura resonante por partículas alfa incidiendo sobre blancos de He, para energías intermedio-altas. Se presentan resultados de secciones eficaces totales calculadas en Aproximación de Eventos Independientes. Se encuentra un muy buen acuerdo con los resultados experimentales, aún cuando en los cálculos no se ha incluido correlación angular o dinámica de los electrones capturados.

INTRODUCCION

El proceso de doble captura electrónica $\text{He}^{2+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{He}(1s^2) + \text{He}^{2+}$, fue estudiado anteriormente en [1] en el marco de un modelo de Electrón Independiente, utilizando la aproximación CDW [2].

La comparación de las secciones eficaces totales para este proceso con los datos experimentales [3,4,5] disponibles hasta ese momento, indujo a suponer que la correlación electrónica debería jugar un papel importante en esta reacción. Sin embargo, dichos datos experimentales presentan comportamientos cualitativos diferentes en la zona de mayores energías donde fueron medidos (1.5 MeV), discrepando también con la predicción teórica salvo en el caso de los resultados de Nikolaev [3].

Resultados recientes [6] a mayores energías (hasta 3 MeV), han confirmado los datos de Nikolaev, habiéndose medido también datos a bajas energías [7] que concuerdan con los anteriores de Berkner [8].

Se plantea en este trabajo el estudio del proceso mencionado, en el marco de una Aproximación de Eventos Independientes (IEA), en la cual suponemos que los electrones evolucionan independientemente en el tiempo, y donde se utiliza además una descripción de electrón independiente para los estados ligados. Se evalúan las secciones eficaces totales a través de las aproximaciones CDW y CDW-EIS [9]

TEORIA

Trabajando en el marco de la versión de línea recta de la aproximación de parámetro de impacto, consideramos el proceso de doble captura electrónica de un proyectil desnudo (P) de carga nuclear Z_p que incide sobre un ión (T) con dos electrones y carga nuclear Z_T para energías intermedio-altas. La distancia internuclear viene expresada por $\mathbf{R} = \rho + \mathbf{v}t$, donde ρ , es el parámetro de impacto y \mathbf{v} la velocidad de la colisión.

La amplitud de transición, en su forma prior, resulta de la forma

$$\mathcal{A}_{if}^- = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \Psi_f^- | \Phi_i^+ \rangle \quad (1)$$

con Ψ_f^- solución exacta de la ecuación de Schrödinger

$$(H - i \partial/\partial t) \Psi_f^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, t) = 0 \quad (2)$$

En la ecuación (2), el Hamiltoniano total H está dado por

$$H = \sum_{k=1}^R \left(-\frac{\nabla_k^2}{2} - \frac{Z_T}{x_k} - \frac{Z_p}{S_k} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{Z_T Z_p}{R} \quad (3)$$

verificando Ψ_f^- la condición asintótica de contorno

$$\Psi_f^- \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \Phi_f^- \quad (4)$$

Además,

$$(H_g + i \partial/\partial t) \Phi_g^\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = 0 \quad ; j = i, f \quad (5)$$

Actualmente en la División Colisiones Atómicas, Centro Atómico Bariloche, (8400) S. C de Bariloche

(donde el signo (+) corresponde a $j=i$ y el signo (-) a $j = f$), siendo

$$H_i = h_i + \frac{Z_p(Z_i-2)}{R} = \sum_{k=1}^2 \left(-\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z_i}{x_k} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{Z_p(Z_i-2)}{R} \quad (6a)$$

$$H_f = h_f + \frac{Z_p(Z_f-2)}{R} = \sum_{k=1}^2 \left(-\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z_f}{x_k} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{Z_p(Z_f-2)}{R} \quad (6b)$$

los Hamiltonianos electrónicos correspondientes a cada canal.

Designamos con \mathbf{x}_k , \mathbf{s}_k y \mathbf{r}_k los vectores posición del electrón k referido a T, P y el punto medio de P-T respectivamente y r_{12} la coordenada interelectrónica.

Explícitamente,

$$\Phi_i^+ = \varphi_i(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \exp \left\{ -i \frac{v^2 t}{4} - i \varepsilon_i t - i \frac{v}{2} (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\} \exp \left\{ i \frac{Z_p(Z_i-2)}{v} \ln(vR-vR) \right\} \quad (7a)$$

$$\Phi_f^- = \varphi_f(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \exp \left\{ -i \frac{v^2 t}{4} - i \varepsilon_f t - i \frac{v}{2} (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\} \exp \left\{ -i \frac{Z_p(Z_f-2)}{v} \ln(vR-vR) \right\} \quad (7b)$$

donde $\varphi_i(\varphi_f)$ es la función de onda ligada inicial (final), solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$(h_g - \varepsilon_g) \varphi_g = 0 \quad j = i, f \quad (8)$$

con ε_j la energía electrónica orbital inicial o final respectivamente.

Elijiendo potenciales de distorsión U_j , los Hamiltonianos distorsionados de cada canal verifican

$$H_g^d = h_g + U_g(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = H - W_g \quad j = i, f \quad (9)$$

siendo las correspondientes funciones de onda distorsionadas χ_j^\pm de la forma

$$\chi_i^+ = \mathcal{L}_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) \Phi_i^+ \exp \left\{ i \frac{2Z_p}{v} \ln(vR-vR) \right\} \quad (10a)$$

$$\chi_i^- = \mathcal{L}_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) \Phi_i^+ \exp \left\{ -i \frac{2Z_p}{v} \ln(vR+vR) \right\} \quad (10a)$$

Introduciremos ahora dos modelos de onda distorsionada, CDW y CDW-EIS. En ambas aproximaciones las funciones de distorsión \mathcal{L}_j (ver ref. [1]) pueden escribirse como el producto de funciones de distorsión \mathcal{L}_j^k para cada electrón, siendo en el caso de

CDW

$$\mathcal{L}_i^{CDW,k}(\mathbf{s}_k) = \exp(\pi Z_p/2v) \Gamma(1-i \frac{Z_p}{v}) F_1(i \frac{Z_p}{v}; 1; i(vs_k+vs_k)) \quad (11a)$$

$$\mathcal{L}_f^{CDW,k}(\mathbf{x}_k) = \exp(\pi r_f/2v) \Gamma(1-i \frac{Z_f}{v}) F_1(i \frac{Z_f}{v}; 1; i(vx_k+vx_k)) \quad (11b)$$

En la aproximación CDW-EIS, la función de distorsión final se elige como en CDW, pero la inicial se toma con una fase eikonal

$$\mathcal{L}_i^{CDW-EIS,k}(\mathbf{s}_k) = \exp(-i \frac{Z_p}{v} \ln(vs_k+vs_k)) \quad (12)$$

Así, las funciones de onda distorsionadas verifican en todos los casos las correctas condiciones asintóticas.

$$\chi_i^{CDW-EIS+}, \chi_i^{CDW+} \xrightarrow{T \rightarrow -\infty} \Phi_i^+ \quad (13a)$$

$$\chi_f^{CDW-EIS-}, \chi_f^{CDW-} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \Phi_f^- \quad (13a)$$

La amplitud de transición en su forma prior (1), de acuerdo con la definición de R, resulta entonces

$$\begin{aligned} \bar{a}_{if}^- &= (\rho v) \frac{2i Z_i Z_p}{v} \lim_{T \rightarrow \infty} \langle \hat{\Psi}_f^- | \hat{\chi}_i^+ \rangle = \\ &= (\rho v) \frac{2i Z_i Z_p}{v} a_{if}^- \quad (14) \end{aligned}$$

siempre que los potenciales de distorsión no produzcan por sí mismos la transición de interés. Con $\hat{\Psi}_f^-$ y $\hat{\chi}_i^+$ hemos designado a las funciones de onda reducidas que no contienen la fase debida al potencial internuclear.

Proponemos ahora que las funciones de onda ligadas $\tilde{\varphi}_j^k$ sean aproximadas por el producto de orbitales de capa K de un electrón φ_j ($k=1,2$), con cargas determinadas según el método variacional de Raleigh-Ritz: $Z_j^* = Z_j - 5/16$ ($j' = i, f, j' = j$), solución de

$$(\tilde{h}_g^k - \tilde{\varepsilon}_g^k) \tilde{\varphi}_g^k = 0, \tilde{\varepsilon}_g^k = -\frac{(Z_j^* - 1)^2}{2}; j = i, f \quad (15)$$

con

$$\tilde{h}_g^k = -\frac{\nabla^2}{2} \mu_k - \frac{Z_j^*}{\mu_k}; j = i, f \quad (16)$$

donde $\mathbf{u}_k = \mathbf{x}_k$ si $j=i$, $\mathbf{u}_k = \mathbf{s}_k$ si $j = f$.

Las funciones $\hat{\chi}_j^\pm$ resultan así un producto de funciones $\hat{\chi}_j^{k\pm}$ para cada electrón

$$\hat{\chi}_i^{k+} = \mathcal{L}_i^{\Lambda,k} \tilde{\varphi}_i(\chi_k) \exp\left\{-\frac{i v^2 t}{8} - i \epsilon_i t - i \frac{v}{2} r_k\right\} \quad (17a)$$

$$\hat{\chi}_i^{k-} = \mathcal{L}_i^{\Lambda,k} \tilde{\varphi}_i(s_k) \exp\left\{-\frac{i v^2 t}{8} - i \epsilon_i t - i \frac{v}{2} r_k\right\} \quad (17b)$$

Suponiendo que la evolución electrónica del sistema pueda ser vista como el producto de evoluciones independientes de cada electrón, es decir

$$\hat{\Psi}_f = \prod_{k=1}^2 \hat{\Psi}_f^{k-}, \quad (18)$$

la parte electrónica de la amplitud de transición es entonces

$$a_{if}^- = \lim_{t \rightarrow -\infty} \prod_{k=1}^2 \langle \hat{\Psi}_f^{k-} | \hat{\chi}_i^{k+} \rangle \quad (19)$$

Identificando el producto de la ecuación (19) con el producto de amplitudes de transición de cada electrón, tendremos

$$a_{if}^- = \prod_{k=1}^2 a_{if}^{k-} = \prod_{k=1}^2 \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \hat{\Psi}_f^{k-} | \hat{\chi}_i^{k+} \rangle \quad (20)$$

Proponemos denominar a este conjunto de hipótesis "Aproximación de Eventos Independientes" [10].

Estas amplitudes de un electrón son evaluadas al primer orden usando las aproximaciones CDW y CDW-EIS, resultando

$$a_{if}^- \approx a_{if}^{\Lambda,k-} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \hat{\chi}_i^{\Lambda,k+} | W_i^{\Lambda,k} | \hat{\chi}_i^{\Lambda,k+} \rangle, \quad (21)$$

donde $A = CDW, CDW-EIS$ y $W_i^{\Lambda,k}$ es el potencial de distorsión, para un electrón, correspondiente a cada aproximación.

A partir de la amplitud de transición es posible calcular la sección eficaz total σ_2 de doble captura por medio de la expresión

$$\sigma_2 = 2\pi \int d\rho \rho |a_{if}^-|^2 \quad (22)$$

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En la figura 1 se presentan secciones eficaces totales de doble captura electrónica de partículas alfa incidiendo sobre blancos de Helio para energías de colisión entre 100 keV y 3 MeV medidas en el sistema laboratorio.

Hallamos un muy buen acuerdo con los datos experimentales para captura a todos los estados, en el

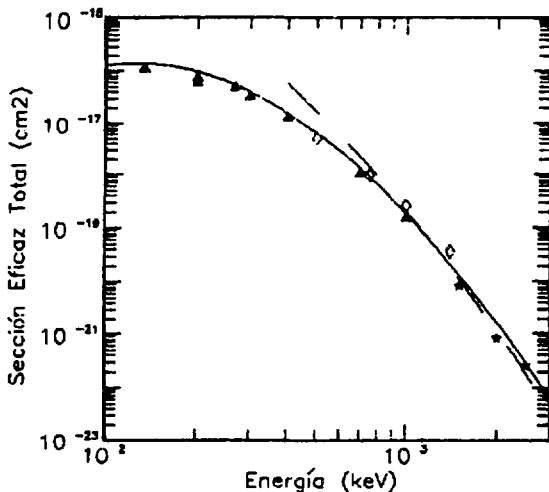


Figura 1: Sección eficaz total de doble captura electrónica para la colisión $He^{2+}+He$ (-----) CDW-EIS y (----) CDW, presente trabajo. Exp.: (Δ) ref [7], (★) ref [6], (◇) ref [5]

rango energético, en el cual se espera que las aproximaciones CDW y CDW-EIS proporcionen buenas predicciones teóricas en el caso de captura simple. Ambas aproximaciones podrán así ser utilizadas, en el marco de la IEA, para calcular las secciones eficaces totales correspondientes a procesos de captura doble desde la capa K del blanco a todos los estados finales del proyectil, en el rango de energías en el cual son aplicables para la captura simple. La introducción de correlaciones "angular" o "dinámica" no parece necesaria para reproducir el comportamiento general de los resultados experimentales.

REFERENCIAS

1. Gayet R., Rivarola R.D., Salin A.; J. Phys. B **14**, 2421 (1981).
2. Cheshire I.M., Proc. Phys. Soc. **84**, 89 (1964).
3. Nikolaev V., Fateeva L., Dimitriev I., Teplova Ya.; Sov. Phys. JETP **14**, 67 (1962).
4. Pivovarov L., Novikov M., Tubaev V.; Sov. Phys. JETP **15**, 1035 (1962).
5. McDaniel E., Flannery M.R., Ellis H.W., Eisele F.L., Pope W.; US Army Missile Research and Development Command Technical Report H, 78 (1977).

6. de Castro Faria N.V., Freire F.L. Jr., de Pinho A.G.; Phys. Rev. A 37, 280 (1988).
7. DuBois R.D.; Phys. Rev. A 36, 2585 (1987).
8. Berkner K. H., Pyle R.V., Stearns W., Warren J.C. Phys. Rev. 166, 44 (1968).
9. Martínez A.E., Deco G.R., Rivarola R.D., Fainstein P.D.; Nucl. Inst. and Meth. B 34, 32 (1988), Nucl.Inst. and Meth. B 43, 24 (1989) - Martínez A.E., Rivarola R.D., J. Phys. B, aceptado para publicación (1990).
10. Gayet R., Hanssen J., Martínez A.E., Rivarola R. D., enviado a Z. für Physik D.