

APROXIMACION DEL TIPO CDW PARA CAPTURA ELECTRONICA A GRANDES ANGULOS

O.A.Fojón * y J.M.Maidagan**

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

Calculamos la probabilidad de captura electrónica de capa K a grandes ángulos usando un modelo simétrico de segundo orden que está relacionado con la aproximación CDW (Continuum Distorted Wave). Estudiamos la influencia de la distorsión Coulombiana de los núcleos comparándola con cálculos del tipo OBK y CIS. Comparamos también resultados numéricos con datos experimentales para impacto de H⁺ sobre C a energías intermedias.

En los últimos años, varios trabajos experimentales han mostrado la interferencia de los fenómenos nucleares y atómicos [1] - [10]. Esta interferencia sólo se pone en evidencia a grandes ángulos de dispersión, donde el scattering de Rutherford no es dominante. Ha habido un limitado número de trabajos teóricos sobre el tema [11] - [15]. En los trabajos [14] - [15] se presentaron las aproximaciones SS y CIST, íntimamente relacionadas con los modelos OBK y CIST standard, respectivamente. A pesar del buen acuerdo entre las probabilidades de captura calculadas según el modelo CIST y los datos experimentales, dicho modelo CIST no es adecuado desde el punto de vista teórico, ya que no satisface las condiciones asintóticas sobre el canal de entrada [16]. Aquí presentamos el modelo CDWT, relacionado con el modelo CDW standard [17], que sí las satisface. Debemos hacer notar que el presente modelo no es la versión de grandes ángulos del CDW standard. Nuestro objetivo es simplemente estudiar la influencia de la interacción proyectil-electrón activo sobre el canal de entrada y hemos elegido una entre varias posibilidades.

Consideremos el proceso de captura electrónica por impacto de protones sobre un átomo multielectrónico. Usaremos un modelo de electrón activo (sección 12 de ref. [16]) así como una descripción semiclassical para el movimiento del proyectil. Adoptamos para ello una trayectoria internuclear rectilínea quebrada como en [13] y [14], con velocidad relativa inicial y final $V^{(-)}$ y $V^{(+)}$, respectivamente. Considera-

mos inicialmente el blanco en reposo en el sistema laboratorio. Luego incorporaremos el efecto del retroceso del blanco en forma perturbativa. Designamos con r_T y r_p el vector posición del electrón respecto del blanco y del proyectil, respectivamente.

Definimos la función de onda final como en [15] +:

$$\chi_f^{CDWT} = \chi_f^{CIST} = \mathcal{L}_f \Phi_f \quad (1)$$

$$\Phi_f = \phi_f(r_f, (r_T - v^{(+)}t) \exp(-i\epsilon_f t) \exp [i(v^{(+)} \cdot r_T - \frac{1}{2}v^2 t)] \quad (2)$$

$$\mathcal{L}_f = \exp(i\frac{1}{2} v_T \pi) \Gamma(1 + iv_T) {}_1F_1(-iv_T, 1, -i(v_T + v^{(+)} \cdot r_T)) \quad (3)$$

con $v_T = Z_T^* / v$, siendo $v = |v^{(+)}| = |v^{(-)}|$ y Z_T^* una carga efectiva de distorsión elegida según [16] y ϵ_f la energía del orbital inicial Φ_f . Esta elección de la función de onda distorsionada Φ_f^{CDWT} tiene en cuenta parcialmente los efectos inerciales relacionados con el cambio abrupto de velocidad del proyectil en un proceso de grandes ángulos: la distribución de momentos no puede seguir (en una imagen temporal revertida) este cambio repentino. El orbital Φ_f se mueve siempre sobre la línea recta $v^{(+)}t$, mientras que el proyectil real se mueve sobre la recta quebrada $v^{(-)}t$ para $t < 0$ y $v^{(+)}t$ para $t > 0$. Dado que en este modelo la velocidad relativa entre el orbital Φ_f y el núcleo blanco distorsionador es $v^{(+)}$, no hay ambigüedad en la elección de la onda distorsionadora \mathcal{L}_f .

Para incluir en una forma simple la distorsión Coulombiana del proyectil sobre la función de onda inicial, definimos:

+ Hay un error de impresión en la fase Galileana de la ec. (2) en [15].

* Becario CONICET

** Investigador CONICET

$$\chi_i^{\text{CDWT}} = \mathcal{L}_i \Phi_i \quad (4)$$

$$\Phi_i = \phi_i(\mathbf{r}_i) \exp(-i \varepsilon_i t) \quad (5)$$

$$\mathcal{L}_i = \exp(\frac{1}{2} v_p \pi) \Gamma(1 - i v_p) {}_1F_1(i v_p, 1, i(v v_p + v^{(*)}, \mathbf{r}_p)) \quad (6)$$

con $v_p = Z_p^*/v$ y ε_i la energía del orbital inicial ϕ_i .

Con esta elección, la amplitud de captura resulta:

$$a^{\text{CDWT}} = a_{(-)}^{\text{CDWT}} + a_{(+)}^{\text{CDWT}} \quad (7)$$

$$a_{(\pm)}^{\text{CDWT}} = \pm i \int_0^{\pm\infty} dt \langle \chi_f^{\text{CDWT}} | A_i \chi_i^{\text{CDWT}} \rangle \quad (8)$$

$$A_i \chi_i^{\text{CDWT}} = \phi_i \left[-\frac{\nabla \phi_i}{\phi_i} + i(v^{(*)} - v^{(*)}) - \nabla \mathcal{L}_i \right] \quad (9)$$

El primer término de la ecuación (9) es similar al del caso CDW standard, mientras que el segundo aparece debido a nuestra particular elección de (6). La inclusión de $v^{(*)}$ para todo tiempo da cuenta parcialmente de los efectos inerciales en forma análoga al caso de la función final. Esta elección conserva la continuidad de χ_i para $t = 0$. Sin embargo, hemos incluido implícitamente la velocidad relativa real a través de \mathbf{r}_p en el argumento de la onda distorsionadora \mathcal{L}_i . Esta es la razón de la aparición del segundo término de (9). Es claro que, debido a este término, nuestra elección será inadecuada cuando la energía de la colisión se incremente. Sin embargo, para las energías intermedias de interés en este cálculo, los dos términos de (9) son del mismo orden, ya que en este caso la velocidad orbital (contenida implícitamente en $\nabla \phi_i$) resulta comparable a v . Una elección alternativa, sin duda, más adecuada para altas energías, sería reemplazar \mathbf{r}_p por $\mathbf{r}_T - v^{(*)}t$ para todo tiempo en (6). Esto conduciría a un segundo término en (9) de la forma $V_p(\mathbf{r}_T - v^{(*)}t) - V_p(\mathbf{r}_T - v^{(*)}t)$. Sin embargo, su tratamiento numérico resulta mucho más complicado que el que hemos elegido aquí.

Incorporamos los efectos del retroceso del blanco a la amplitud de captura en forma perturbativa, como en [14], agregando a a^{CDWT} la siguiente amplitud de retroceso:

$$a_{\text{rec}}^{\text{CDWT}} = \langle \chi_f^{\text{CDWT}} | \exp(-i v_{\text{rec}} \cdot \mathbf{r}_T) - 1 | \chi_i^{\text{CDWT}} \rangle \quad (10)$$

donde v_{rec} es la velocidad de retroceso del blanco y el bracket debe calcularse en $t = 0$.

No detallaremos aquí el cálculo numérico de las amplitudes de captura, porque el esquema es similar al desarrollado en [14] y [15]. Como en las citadas

referencias, nos hemos limitado al caso de velocidades de impacto mucho más grandes que la velocidad orbital final. Aunque el cálculo es directo, la expresión final resulta algo extensa y no la daremos aquí. Esta expresión involucra una integración numérica tridimensional de funciones elementales.

Para aplicar nuestro modelo a captura electrónica de capa K hemos usado funciones hidrogenicas con carga nuclear efectiva $Z_{\text{reft}} = Z_T - 5/16$ y energías orbitales de [18].

En las figuras 1 y 2 mostramos las probabilidades de captura electrónica teóricas para impacto de protones sobre C así como datos experimentales para el proceso $H^+ + CH_4$ extraídos de ref. [5-6] y [2], [19]. A fin de mostrar la importancia relativa de las distorsiones Coulombianas de los núcleos sobre dichas probabilidades, presentamos cálculos relativos a los modelos SS (sin distorsión del blanco) y CDWT (con distorsión del blanco y del proyectil). Es evidente que la inclusión de la distorsión Coulombiana del proyectil modifica levemente las probabilidades CIST. Por el contrario, la inclusión del blanco es crucial a fin de describir la tendencia de los datos experimentales.

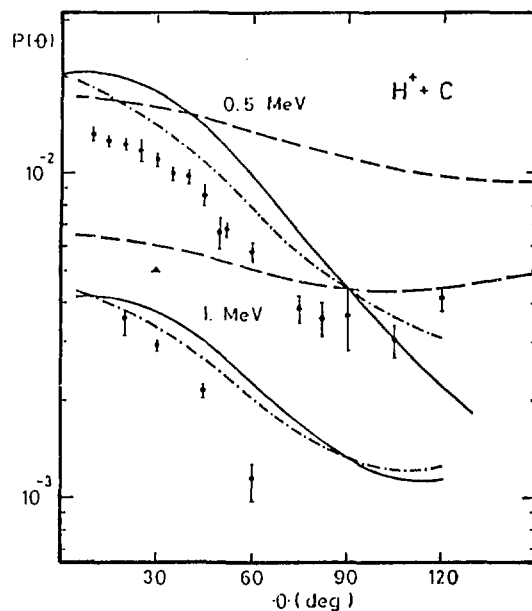


Figura 1: Probabilidades de captura electrónica por impacto de H^+ sobre C a 0.5 MeV y 1 MeV para: — presente CDWT; - - - presente CIST; - · - · presente SS; datos experimentales (♦) de [5] y (Δ) de [6].

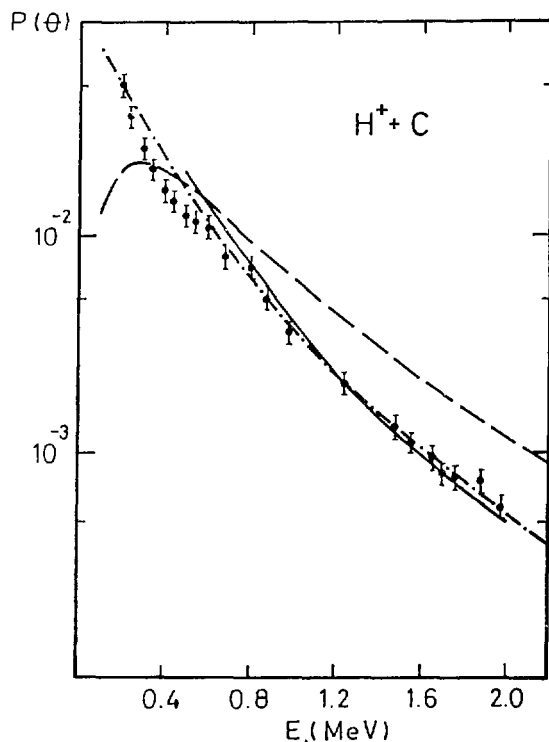


Figura 2: Idem figura 1. Los datos experimentales debajo de 1.5 MeV corresponden a $\theta=20$ grados y encima de 1.5 MeV a 15 deg. de referencia [2] y [19], respectivamente.

Otra conclusión que puede extraerse del examen de dichas figuras es que la bien conocida sobreestimación de los datos experimentales por parte de la aproximación OBK es la regla también para colisiones a grandes ángulos de dispersión. Lo mismo ocurre con la sobreestimación de los datos experimentales por parte del modelo CDWT cuando la energía de impacto decrece. Hay que hacer notar que las energías aquí consideradas son ligeramente inferiores al límite empírico de aplicación de la aproximación CDW [16].

Podemos concluir entonces que, desde el punto de vista práctico, la inclusión de la distorsión Coulombiana del núcleo "débil" en colisiones asimétricas a grandes ángulos no es indispensable para describir globalmente los datos experimentales. Pero debe ser

remarcado que la inclusión de dicha distorsión Coulombiana o cualquier otra que satisfaga las condiciones asintóticas es, desde el punto de vista teórico, inevitable. Es por eso que el presente modelo es el único de los aquí considerados que está teóricamente bien fundado.

REFERENCIAS

1. E.Horsdal-Pedersen, P.Loftager and J.L.Rasmussen, *J.Phys.* **B 15** (1982) 2461.
2. E.Horsdal-Pedersen, P.Loftager and J.L.Rasmussen, *J.Phys. B At. Mol. Phys.* **15** (1982) 4423.
3. E.Horsdal-Pedersen and J.L.Rasmussen, *IEEE US-30* (1983) 891.
4. E.Horsdal-Pedersen, *J.Phys.* **B20** (1987) 785.
5. E.Horsdal-Pedersen, *Nucl. Instr. Meth.* **B24/25** (1987) 130.
6. J.N.Scheurer, O.K.Baker and W.E.Meyerhof, *J. Phys.* **B18** (1985) L85.
7. J.N.Scheurer, S.Andriamonje, F.Azaiez, D.Bertault, J.F.Chemin, H.Oubaha "XIIème. Colloque National sur la Physique des Collisions Atomiques et Electroniques" Caen, 21-24 Juin 1988.
8. E.Horsdal, B.Jensen and K.O.Nielsen, *Phys. Rev.Lett.* **57** (1986) 675.
9. O.K.Baker, C.Stoller and W.E.Meyerhof, *NIM B24/25* (1987) 89.
10. O.K.Baker, W.E.Meyerhof, D.W.Spooner, C.H.Stoller and J.N.Scheurer, *Phys. Rev. Lett.* **60** (1988) 913.
11. R.Shakeshaft and Spruch, *Phys.Rev. A* **29** (1984) 605.
12. P.A.Amundsen and D.H.Jakubassa-Amundsen, *J.Phys. B At. Mol. Phys.* (1984) 2671.
13. L.Kochbach and J.S. Briggs, *J.Phys.B At.Mol.Phys.* **17** (1984) 3255.
14. J.M.Maidagan, *J.Phys. B* **21** (1988) 1395.
15. J.M.Maidagan, *J.Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **21** (1988) 4177.
16. Dz Belkic, R.Gayet and A.Salin, *Phys.Rep.* **56** (1979) 279.
17. I.M.Cheshire, *Proc.Phys.Soc.* **84** (1964) 89.
18. E.Clementi and C.Roetti, *At.Data Nucl. Data tables* **14** (1974) 177.
19. E.Horsdal-Pedersen, extraído de ref.[12], (1982).