

"Aplicación de un modelo de onda distorsionada para captura electrónica en colisiones atómicas"

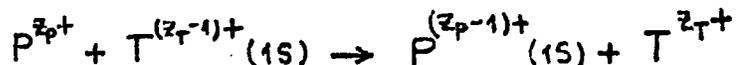
G.R. Deco^o,⁺, A.E. Martínez⁺ y R.D. Rivarola⁺

⁺ Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), Rosario, Argentina

^o Institut für Theoretische Physik, Justus-Liebig Universität, Giessen, Alemania Federal.

En el siguiente trabajo se presenta la aproximación CDW-EIS, aplicando la a la descripción de procesos de captura electrónica en colisiones ión-átomo. Se evalúan las secciones eficaces diferenciales y totales y se comparan con resultados obtenidos con otras modelizaciones teóricas, así como con datos experimentales.

El modelo CDW-EIS, aplicado exitosamente a la descripción de procesos de ionización electrónica⁽¹⁾, ha sido extendido a la descripción de procesos de captura electrónica:



simbolizando P y T el proyectil y el blanco de cargas nucleares Z_P y Z_T respectivamente. En el cálculo se emplea la versión de línea recta del método de parámetro de impacto.

La influencia de la interacción proyectil-electrón activo es tomada en cuenta en el canal inicial distorsionando la función ligada inicial ϕ_i , con una fase eikonal, de manera que la función de onda distorsionada inicial resulta:

$$\chi_i^+ = \phi_i(\underline{x}) \exp(-i\varepsilon_i t) \exp\left\{-i\frac{Z_P}{v}(\underline{r}\cdot\underline{v} + \underline{v}\cdot\underline{s})\right\}$$

siendo ε_i la energía orbital inicial, $\underline{x}(s)$ la posición del electrón relativo al blanco (proyectil) y v la velocidad de la colisión. En el canal final se propone un producto de las funciones ligada final ϕ_f y del continuo de la interacción electrón activo-blanco residual, obteniéndose la función de onda distorsionada final dada por:

$$\mathcal{K}_f^- = \phi_f(s) \exp(-i\varepsilon_f t + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{x} + i\frac{v^2}{2} t) \times N^*\left(\frac{\tilde{z}_T}{v}\right) \times \\ \times {}_1F_1\left(-i\frac{\tilde{z}_T}{v}; 1; -i\mathbf{v} \cdot \mathbf{x} - i\frac{v^2}{2} t\right)$$

donde \tilde{z}_T es la carga nuclear efectiva elegida como $\tilde{z}_T = (-2\varepsilon_i)^{1/2}$

De esta manera se preservan las condiciones asintóticas correctas, asociadas con el largo rango de la interacción coulombiana tanto en el canal inicial como en el final.

La amplitud de dispersión $a_{if}(\rho)$ en función del parámetro de impacto ρ resulta

$$a_{if}(\rho) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \mathcal{K}_f^- | \phi_i \exp(-i\varepsilon_i t) \times \left[-\frac{\nabla^2}{2} + z_T \hat{\mathbf{x}} \cdot \bar{\nabla} \right] \exp \left\{ \right. \\ \left. -i \frac{z_T}{v} \ln(v s + \mathbf{v} \cdot \mathbf{s}) \right\} \rangle$$

obteniéndose su dependencia con el momento transversal transferido η a través de la transformación:

$$R_{if}(\eta) = \frac{1}{2\pi} \int d\rho \exp(i\eta \cdot \rho) a_{if}(\rho)$$

La expresión anterior nos permite determinar las secciones eficaces diferencial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (\mu v)^2 |R_{if}(\eta)|^2$$

y total

$$Q = \int d\eta |R_{if}(\eta)|^2$$

para las reacciones de interés. En el caso de tratarse de blancos multielectrónicos, se ha utilizado una aproximación de electrones independientes siendo los electrones pasivos considerados como "congelados" durante la colisión. En el estado inicial se elige una función de onda ligada inicial de tipo hidrogenoide, usándose cargas efectivas de Froese-Fischer⁽²⁾ y una energía orbital asociada Rootahn-Hartree-Fock⁽³⁾. El continuo de distorsión en el canal de salida se simula como de tipo coulombiano con carga nuclear efectiva \tilde{z}_T .

(1) P.D. Fainstein, V.H. Ponce y R.D. Rivarola, 1987, Phys. Rev. A 36, 3639.

(2) C. Froese Fischer, Atom. Data 4, 301 (1972).

(3) E. Clementi, C. Roetti, Atom. Data Nucl. Data Tables 14, 177 (1974).