

CALCULO DE LA DISTRIBUCION DE PROBABILIDADES DE IONIZACION EN LA COLISION DE ANTIPROTONES CON ATOMOS DE HIDROGENO

J. M. RODRÍGUEZ AGUIRRE⁽¹⁾; M.R. VALENZUELA⁽¹⁾; E. CUSTIDIANO⁽¹⁾ y M.M. JAKAS⁽²⁾

RESUMEN: Se estudió el proceso de ionización de átomos de H(1s) producido durante la colisión con Antiprotones de 5 a 600 keV de energía. Para esto se utilizó el método de Trayectorias Clásicas Monte Carlo (CTMC) en la aproximación del parámetro de impacto. Las condiciones iniciales del sistema se obtienen usando las distribuciones clásicas (a) microcanónica y (b) la propuesta previamente por Cohen [3]. Los resultados obtenidos se comparan con cálculos teóricos cuánticos y experimentales existentes.

ABSTRACT: The processes of ionization of (1s)-Hydrogen atoms during 5 to 600 keV Antiproton bombardment was studied. To this end, the Classical trajectories Monte Carlo Method (CTMC) and the impact parameter approximation were used. The classical initial distributions of the system were determined using both: (a) the microcanonical and (b) the distribution proposed by Cohen [3]. The results are compared with previous quantum calculations and experimental data.

Palabras Claves: Frenado, fragmentación, nanodosimetría, ionización

Key words: fragmentation, nanodosimetry, ionization

INTRODUCCIÓN

Existen muchos estudios teóricos, tanto clásicos [2-4,11] como cuánticos [8,12-14] de la colisión de iones con átomos. Por ejemplo, la colisión de protones con átomos de H, que constituye unos de los sistemas más simples en el cual se producen colisiones elásticas e inelásticas. Entendiéndose estas últimas a aquellas en donde el electrón absorbe energía del proyectil dando lugar a los procesos de ionización, excitación y captura. Pero el estudio de la colisión de antiprotones con átomos de H resulta muy atractivo, por que a diferencia de la colisión de protones con átomos de H, en este no se produce el proceso de captura electrónica.

En este trabajo se estudia la ionización de átomos de H como consecuencia de la colisión con antiprotones. Se utilizó el método de Trayectorias Clásicas Monte Carlo (CTMC), en la aproximación del parámetro de impacto y trayectorias rectilíneas; este método a sido utilizado previamente para el estudio de la colisión de iones con átomo y moléculas [1-4]; siendo los resultados aceptables para velocidades de impacto del ión del orden de la velocidad orbital del electrón.

(1) Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura de la UNNE. Av. Libertad 5470, (3400) Corrientes, Argentina. E-mail: cemesto@exa.unne.edu.ar; juarcho@gmail.com

(2) Departamento de Física Fundamental y Experimental, Universidad de La Laguna, Tenerife, España.

Método de cálculo

La ionización del átomo de Hidrógeno en su estado fundamental se puede describir en el modelo clásico como un sistema compuesto de tres partículas: un electrón de masa m_e y carga $-e$, enlazado a un núcleo de carga Z_2e , con el que interactúa por medio de un potencial de Coulomb describiendo órbitas clásicas, y una partícula de carga Z_1e que se mueve a velocidad v_1 .

En el caso del proceso de colisión $p^- - H(1s)$, y utilizando unidades atómicas: $Z_1 = -1$, $Z_2 = 1$, las cargas del antiprotón incidente y del núcleo de hidrógeno. $m_1 = m_2 = 1836$, las masas del antiprotón y del núcleo.

El método CTMC se puede separar en tres etapas principales: a) elección del estado inicial, b) solución de las ecuaciones de movimiento y c) caracterización del estado final. La parte más sencilla del método es la solución de las ecuaciones de movimiento. La ecuación que gobierna el movimiento del electrón será entonces [4]:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -Z_2 e^2 \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3} - Z_1 e^2 \frac{\vec{r} - \vec{R}}{|\vec{r} - \vec{R}|^3} \quad (1)$$

donde m es la masa del electrón y e la carga elemental y Z_1 y Z_2 son la carga del ión y del núcleo, respectivamente.

$\vec{R} = \vec{p} + t\vec{v}_1$ siendo \vec{v}_1 la velocidad inicial del ión y \vec{p} el parámetro de impacto.

Luego de calcular N trayectorias estadísticamente independientes, dentro de un rango de parámetros de impacto entre $p_i - \Delta p/2$ y $p_i + \Delta p/2$, se puede calcular la probabilidad para un canal determinado y un parámetro de impacto p_i representativo de ese rango.

$$P_j(p_i) = \frac{N_j}{N} \quad (2)$$

donde j se refiere al canal de interés y N se elige de manera de asegurar que el error estadístico de $P_j(p)$ sea menor que cierto valor predeterminado ϵ .

La sección eficaz total se obtiene integrando numéricamente $P_j(p)$ sobre un conjunto finito de parámetros de impacto:

$$S = 2\pi \int_{p_{\min}}^{p_{\max}} p P(p) dp \quad (3)$$

La generación de los estados iniciales electrónicos es una de las partes más delicadas del cálculo: Abrines y Percival [1] propusieron extraer los estados iniciales de un conjunto estadístico microcanónico con energía fijada en el primer autovalor de la solución del átomo de hidrógeno. Esta distribución tiene la ventaja de representar exactamente la distribución electrónica inicial del átomo de H en el espacio de los momentos, pero presenta el inconveniente de truncar la distribución radial, siendo nula la contribución para radios mayores a $r = 2$. Esta elección está basada en la suposición que el estado

energético y la relación de velocidades entre el electrón y proyectil son las magnitudes que determinan el resultado de la colisión; siendo la distribución espacial irrelevante.

Cohen [3] propuso que la función de distribución en el espacio de fases se podría expresar mediante una función de distribución en energías; estando la energía de enlace relacionada con la distribución en el espacio de fases por medio de la siguiente expresión:

$$E = -\frac{p^2}{2m} + \frac{Z}{r} \quad (4)$$

Luego, imponiendo la condición que la distribución radial obtenida debe coincidir con la distribución radial cuántica obtuvo la siguiente solución:

$$f(E) = \frac{e^{-\frac{1}{E}}}{2^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{5}{2}} E^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{1}{4} W_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \left(\frac{2}{E} \right) - \left(1 - \frac{2}{E} \right) W_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \left(\frac{2}{E} \right) \right] \quad (5)$$

donde $W_{\mu, \kappa}(x)$ es la función de Whittaker. Esta es una función confluyente hipergeométrica que constituye una de las dos soluciones linealmente independientes a la ecuación diferencial de Whittaker.

Debido a su planteo, esta función de distribución reproduce exactamente la distribución radial cuántica y por esta razón identificamos como CTMCr el cálculo que hace uso de esta distribución. Para distinguirlo del método que inicializa sus valores con la distribución microcanónica, que la identificaremos con CTMCp.

La última etapa del método es la clasificación de la interacción que permita hallar los valores de sección eficaz, para cada uno de los canales; además de servir de referencia para la finalización del cálculo en la etapa de integración. Para esto se evalúan los criterios que definen cada caso posible, y se finaliza el cálculo en el momento que alguna de ellas es satisfecha.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se resuelve numéricamente la ec. (1) para el sistema antiprotón-H en la aproximación de trayectorias rectilíneas para el proyectil. La distancia del ión al origen del sistema de coordenadas está dado por $\vec{R} = \vec{p} + t\vec{v}_1$, donde p es el parámetro de impacto y \vec{v}_1 es la velocidad de impacto del ión. Los resultados se muestran en las figuras 1 y 2.

La Fig. 1 muestra la comparación de las secciones eficaces de frenado para la colisión de antiprotones con átomos de H. Para estos resultados se utilizó el método CTMC, con las distribuciones microcanónica (CTMCp) y de Cohen [3] (CTMCr) para la determinación de las condiciones iniciales del electrón en su órbita. Mientras que los resultados experimentales son de Agnello y otros [10]. En la Fig.1 se observa un acuerdo razonable con los resultados teóricos [7] y experimentales en la región de energías intermedias. Por debajo de 100 keV, los cálculos sobreestiman los datos experimentales en un

factor que se acerca al dos, mientras que por encima de 100 keV esta tendencia se invierte, y los valores calculados aparecen subestimar el frenado en un factor que puede estar alrededor de 1,5.

Siendo que el frenado del antiprotón se debe fundamentalmente a la ionización del Hidrógeno, es interesante estudiar la probabilidad de ionización como una función del parámetro de impacto y de la energía del proyectil. En las Figs. 2 a) y b) se muestran las distribuciones de probabilidad de ionización multiplicadas por el parámetro de impacto como funciones del parámetro de impacto. Aparecen también los resultados teóricos obtenidos por Tong. Et.al [6]. Como puede verse, los resultados del presente cálculo reproducen muy bien los valores teóricos mencionados para una energía de 100 KeV, pero se apartan ligeramente de aquellos para una energía de 10 KeV. Este comportamiento está en concordancia con otros resultados similares publicados anteriormente, según los cuales los cálculos obtenidos con el método clásico CTMC se aproximan bien a los resultados cuánticos [7] y experimentales [10] en la región de energías intermedias.

Estas diferencias se deben al hecho que las distribuciones iniciales de los electrones utilizadas en el presente trabajo son finitas, mientras que para el átomo de Hidrógeno la mecánica cuántica explica que el electrón puede estar más allá del límite clásico, y por lo tanto “encontrarse” en la trayectoria del ión aún cuando éste pase suficientemente lejos del átomo. Que esto sea observado solo a altas energías tampoco es inesperado, puesto que entonces el electrón puede absorber mucha energía del proyectil si ocurriese que el primero se encontrase cerca del camino del ión, produciéndose lo que se ha dado en llamar una “colisión cercana”.

A pesar de las diferencias entre las dos distribuciones iniciales utilizadas no se distinguen grandes diferencias en la sección eficaz de frenado para el rango de energías considerado (Fig.1). Siendo la diferencia más notable un aumento en los valores para energías de colisión bajas. Los cálculos por medio del método de canales acoplados de centro simple, basado en expansión de funciones de onda atómicas, se muestran comparativamente los resultados obtenidos por Schiwietz [7]. Así como los resultados experimentales de la Ref. [10]. Se aprecia un notable acuerdo con los valores de referencia en el rango de media y altas energías. Mientras que hay un buen acuerdo general con los cálculos cuánticos.

El incremento del frenado electrónico se ve correlacionado con el exceso de sección eficaz de ionización que se aprecia por debajo de los 40 KeV, haciendo suponer que los efectos cuánticos empiezan a influenciar con más importancia a bajas velocidades de acercamiento de los iones (Fig.2).

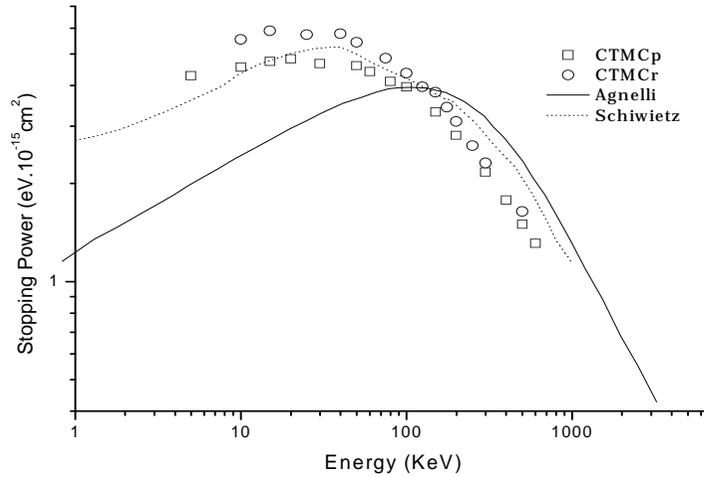


Fig. 1: Sección eficaz de frenado electrónico en colisión $p^- - H(1s)$. Cálculos por CTMCp (cuadrados), y por CTMCr (círculos). Los resultados experimentales (línea llena) son de la Ref. [10], y los cálculos cuánticos de la Ref. [7] (línea de puntos)

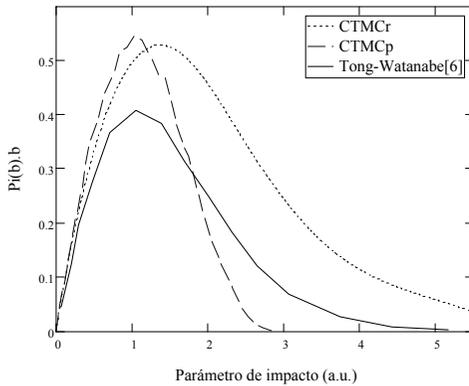


Fig. 2a: Distribución de probabilidad de ionización multiplicada por el parámetro de impacto, en función del parámetro de impacto. Para colisión $p^+H(1s)$, a 10 KeV.

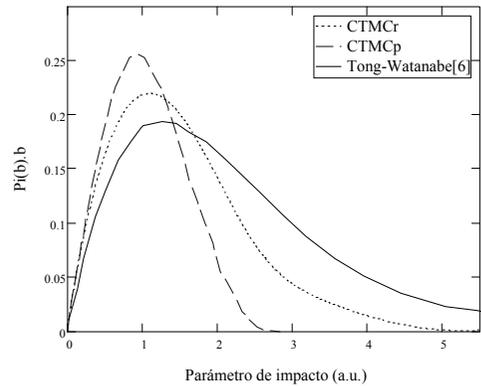


Fig. 2b: Distribución de probabilidad de ionización multiplicada por el parámetro de impacto, en función del parámetro de impacto. Para colisión $p^+H(1s)$, a 100 KeV.

CONCLUSIONES

Se han calculado las secciones eficaces de frenado para átomos de H bombardeados con antiprotones usando el método de las trayectorias clásicas (CTMC), en donde las condiciones iniciales del electrón fueron obtenidas a partir de (a) la distribución propuesta por Cohen (CTMCr) y (b) la microcanónica (CTMCp). Se observa que no hay una significativa diferencia entre las secciones eficaces de frenado obtenidas con una u otra distribución y que, en ambos casos, los resultados muestran un buen acuerdo tanto con cálculos previamente obtenidos usando métodos cuánticos [6,12-13] como con datos experimentales disponibles [10].

REFERENCIAS

- [1] ABRINES, R and I.C. PERCIVAL. Proc. Phys. Soc. **88**, 861 (1966).
- [2] OLSON, R.E. and A. SALOP. Phys. Rev. A **16**, 531-541 (1977).
- [3] COHEN, J.S. J.Phys. B: At. Mol. Phys.,**18**: 1759-1769 (1985).
- [4] CUSTIDIANO, E.R. and M.M. JAKAS. Phys. Rev. A **72** 022708 (2005)
- [5] SAHOO, S.; S.C. MUKHERJEE and H.R.J. WALTERS. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **37**, 3227-3237 (2004)
- [6] TONG, X.; T. WATANABE; D. KATO and S. OHTANI. Phys. Rev. A, **64** 022711 (2001).
- [7] SCHIWETZ, G. and P. GRANDE. Radiat. Eff. Defects Solids **130-131**, 137(1992).
- [8] SCHIVETZ, G. Phys. Rev. A, **42**, 296 (1990).
- [9] KNUDSEN, H. *et al.* Phys. Rev. Lett. **74**, 4627 (1995).
- [10] Agnello, M. *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 371 (1995).
- [11] CUSTIDIANO, E.R.; F.J. PEREZ de la ROSA, and M.M. JAKAS. Phys. Rev. A, **66**, 052902 (2002).
- [12] IGARASHI, A.; S. NAKASAKI and A. OHSAKI. Phys.Rev. A, **61**, 062712 (2000).
- [13] TOSHIMA, N. Phys.Rev. A, **64**, 024701(2001).

Recibido/Received/: 28-Ago-07
Aceptado/Accepted/: 13-Set-07