

01.83.06

| | |
|------------------------|-------------|
| C. N. E. A. Biblioteca | |
| ARCHIVO PUBLICACIONES | |
| Nº 1 | AÑO 1983 |

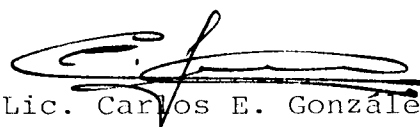
TRANSFERENCIA COLISIONAL DE ELECTRONES AL CONTINUO

DE IONES ATOMICOS Y MOLECULARES

Tesis presentada ante el Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, República Argentina, para optar al título de Doctor en Física.



Dr. Wolfgang Meckbach
Asesor Científico



Lic. Carlos E. González Lepera
Doctorando

San Carlos de Bariloche

1983

INDICE

| | Página |
|--|--------|
| 1 - Resumen | 1 |
| 1.1-Abstract | 2 |
| 2 - Introducción | 3 |
| 3 - Equipo experimental | 7 |
| 3.1-Acelerador de iones | 8 |
| 3.2-Analizador de electrones | 10 |
| 3.3-Analizador de iones | 14 |
| 3.4-Sistema de adquisición de datos | 16 |
| 3.5-Calibración de equipos | 19 |
| 3.6-Preparación de blancos | 24 |
| 4 - Mediciones | 26 |
| 4.1-Preliminares | 26 |
| 4.2-Efecto blanco-haz | 30 |
| 4.3-Efecto molecular | 38 |
| 5 - Discusión de resultados experimentales | 45 |
| 6 - Modelo teórico | 48 |
| 6.1-Funciones de onda del continuo | 48 |
| 6.1.1-Solución de la ecuación angular | 51 |
| 6.1.2-Solución de la ecuación radial | 51 |
| 6.2-Sección eficaz de captura en primera aproximación de Born | 53 |
| 6.3-Sección eficaz de captura en segunda aproximación de Born | 61 |
| 7 - Discusión de resultados teóricos | 65 |
| 8 - Conclusiones | 70 |
| Apéndice 1 | 71 |
| Apéndice 2 | 72 |
| Referencias | 73 |

1 - RESUMEN

El objetivo del presente trabajo consistió en investigar las diferencias observadas en los picos de electrones "convoy" cuando se bombardean láminas delgadas de carbono con proyectiles atómicos y moleculares de igual velocidad.

Las mediciones realizadas muestran un incremento en el rendimiento del mecanismo de producción de dichos electrones para tiempos de permanencia pequeños del proyectil molecular dentro del sólido.

Para tiempos de permanencia mayores se observan pequeñas desviaciones respecto del valor correspondiente al proyectil atómico, aunque en general tienden a disminuir las diferencias.

Confirmamos el mayor rendimiento usando H_2^+ , pero solo cerca del pico y no en las zonas alejadas del mismo. De esta forma se explica el menor ancho de los picos obtenidos con H_2^+ en observaciones anteriores.

Durante el desarrollo de las investigaciones se encontraron alteraciones producidas en los picos de electrones convoy, en relación con el tiempo de irradiación sufrido por el blanco, no reportadas en la literatura.

Se calculó en segunda aproximación de Born la sección eficaz doblemente diferencial de captura al continuo de un electrón, en un estado inicial tipo hidrogenoide (1s), para dos protones correlacionados por una distancia R (proyectil molecular) en función de dicha separación.

Encontramos que la sección eficaz crece respecto del valor obtenido para un proyectil atómico, para separaciones internucleares $R \approx 1.5$ u.a. y tiende al valor correspondiente a un proyectil de carga $Z=1$ para R próximos a cero.

A medida que incrementamos la velocidad de la colisión, mejora la concordancia para ambos límites de la sección eficaz, es decir $Z \rightarrow 2$ ó $Z \rightarrow 1$.

1.1-ABSTRACT

The aim of this work was to investigate the differences that appear in convoy electron peaks when thin carbon foils are bombarded with equal velocity H^+ and H_2^+ projectiles.

The measurements show an increase in the yield of such electrons as the ion dwell time in the solid diminishes. Towards long dwell times the yield ratio H_2^+/H^+ fluctuates around the unity value. The amplitude of this dispersion decreases for longer times.

A higher yield for H_2^+ projectiles is measured, but only for electron velocities near the peak cusp. At the wings the H^+ and H_2^+ electron yields are almost the same. This agrees with the narrower peaks obtained with H_2^+ projectiles reported in previous works.

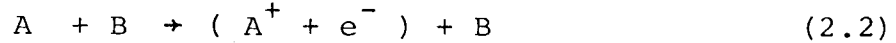
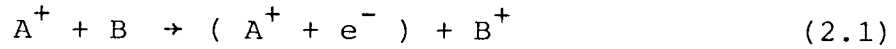
Along the measurements we found changes in the convoy electron peaks related with the target irradiation time.

Double differential cross section (DDCS) for electron capture is calculated in second order Born approximation. A transition from a $1s$ state to the continuum of two correlated protons as a function of their internuclear distance R is considered. As R decreases from ~ 0.5 a.u. towards zero, the DDCS value increases from that corresponding to the atomic projectile ($Z=1$) limit to the united atom value ($Z=2$). It is found that the higher is the projectile velocity, the better is the DDCS value agreement with both limits.

2 - INTRODUCCION

El mecanismo colisional de transferencia de electrones a estados del continuo (ETC)* da origen a electrones que acompañan al proyectil iónico en estados del continuo de este último.

Esquemáticamente la colisión puede describirse según:



donde debemos distinguir dos situaciones diferentes.

La primera de ellas (2.1) representa la colisión entre un ión desnudo (A^+) que viaja con una velocidad \vec{v}_i y un átomo blanco (B), el cual suponemos en reposo, obteniendo como producto, la ionización del blanco (B^+) y un electrón (e^-) que acompaña al proyectil con una velocidad \vec{v}_e muy cercana, en módulo y dirección, a \vec{v}_i . Este tipo de mecanismo se denomina "captura de electrones al continuo" (ECC)*.

En procesos del tipo (2.2) donde el proyectil (A), neutro ó con al menos un electrón es ionizado por el átomo blanco (B), la situación final es similar a la anterior, salvo que el electrón (e^-) que viaja en un estado del continuo del proyectil proviene del mismo proyectil. Corrientemente se lo denomina "pérdida de electrones al continuo" (ELC)*.

Salvo mediante el empleo de proyectiles completamente ionizados, para los cuales solo es posible un proceso del tipo(2.1) de captura, es de suponer que ambos mecanismos coexistan para una dada colisión.

En 1966, Rudd¹ y colaboradores descubrieron que la sección eficaz doblemente diferencial para la eyección de electrones provenientes de átomos bombardeados con protones, se veía incrementada para velocidades de los electrones próximas, tanto en magnitud como en dirección, a la del proyectil.

En 1970, Crooks y Rudd² observaron un fuerte incremento en el número de electrones eyectados con velocidades próximas a la del proyectil para ángulos cercanos a 0° respecto de la dirección del haz, estudiando la colisión $H^+ \rightarrow He$ en condiciones de colisión única.

* Las siglas corresponden a la denominación de tales mecanismos en idioma inglés.

Simultáneamente Harrison y Lucas³ encontraron un pico agudo en distribuciones doblemente diferenciales en ángulo y energía estudiando la colisión entre protones con láminas delgadas de carbono. Dicho pico con forma de cúspide se localiza para una energía de los electrones equivalente a la del proyectil, es decir, $E_{eq.} = v_i^2 / 2$ (en unidades atómicas).

A partir de estos descubrimientos y debido al desarrollo de las técnicas experimentales y teóricas, numerosos investigadores han volcado su esfuerzo en esclarecer el origen del tan pronunciado pico observable.

Diversos desarrollos teóricos llevados a cabo por Salin⁴, Macek⁵ y Dettmann et al⁶, usando diferentes formalismos, concluyen que en procesos de ionización debidos a colisiones ión-átomo, el estado final del electrón no queda determinado solamente por la transferencia de momento involucrada en la colisión, sino también por una interacción Coulombiana de largo alcance entre el electrón y el proyectil luego de la colisión; la cual provocaría el acompañamiento del electrón en un estado del continuo del ión.

Dettmann y colaboradores⁶ realizaron el primer estudio sistemático utilizando blancos sólidos. Estos autores proponen una teoría que describe la emisión de electrones con $\vec{v}_e \approx \vec{v}_i$ basada en suponer que la captura se produce mediante una colisión única ocurrida en las últimas capas del sólido.

Obtienen una sección eficaz de captura del tipo

$$d\sigma/d\vec{v}_e = |f_c(Z'/v_e')|^2 F(\vec{v}_i, \vec{v}_e') \quad (2.3)$$

donde Z' es la carga del proyectil y \vec{v}_e' es la velocidad relativa entre el electrón y el proyectil. El factor de Coulomb, produce una divergencia en la sección eficaz con v_e' ($|f_c|^2 \rightarrow 2\pi Z'/v_e'$ para $v_e' \ll Z'$) mientras que la función F tiende a un valor finito cuando $v_e'/Z' \rightarrow 0$, lo cual mantiene la divergencia de la sección eficaz.

Comparando el rendimiento del proceso para proyectiles atómicos y moleculares (H^+, H_2^+), encuentran que dicho rendimiento por nucleón es mayor en un factor 2 cuando utilizan H_2^+ a igual velocidad que H^+ .

Teniendo en cuenta que el proyectil molecular pierde su electrón en las primeras capas atómicas en su pasaje por el sólido y simultáneamente empieza la explosión Coulombiana, causando del alejamiento progresivo de los componentes, concluyen⁶ que el mayor rendimiento observado se debe a la correlación entre los dos protones al abandonar el sólido; aunque no detallan la naturaleza y forma de actuar de esta correlación.

Duncan y Menéndez⁷ encontraron distribuciones angulares más estrechas para H_2^+ incidiendo sobre láminas de carbono en comparación con H^+ a igual velocidad, pero obtienen el mismo rendimiento del proceso de transferencia al continuo para ambos casos.

Meckbach et al⁸ también observaron picos más estrechos en espectros de electrones tanto longitudinales como transversales, de acuerdo a una descomposición de \vec{v}_e según los ejes $v_{||} \equiv v_E$ y $v_{\perp} \equiv v_{\theta}$.

Un mecanismo totalmente diferente para la producción de electrones convoy provenientes de la interacción entre un haz de iones con láminas delgadas, fue propuesto por Neelavathi y otros⁹. El mismo se basa en la excitación colectiva de los electrones dentro del sólido. De acuerdo a este modelo, un ión que se mueve con una velocidad v_i mayor que la velocidad de Fermi, produce alteraciones en el plasma de electrones; creando zonas de mayor y menor densidad, las cuales se mantienen detrás del mismo bajo la forma de una onda coherente.

Un electrón puede ser atrapado en los pozos positivos de potencial resultantes de estas alteraciones y de esta forma trasladarse con una velocidad muy próxima a la del ión.

Cuando el proyectil emerge de la superficie, desaparece el potencial creado y los electrones se redistribuyen preferencialmente en aquellos estados con mayor superposición con el estado electrónico dentro del sólido.

Las predicciones resultantes de este modelo no muestran, hasta el presente, coincidencias con los resultados experimentales, en cuanto no resultan en un pico en forma de cúspide, como el observado.

Efectos moleculares para diferentes mecanismos al estudiado, entre proyectiles iónicos y blancos sólidos han sido observados por varios autores.

Brandt et al¹⁰ encontraron que la carga de protones correlacionados, relacionada al frenamiento en sólidos, era mayor que la unidad. Los trabajos de Poizat¹¹, Gaillard y su grupo de Lyon¹² presentan un vasto panorama en el estudio de recombinación molecular a la salida de láminas delgadas bombardeadas con proyectiles livianos (H_2^+ , H_3^+).

El objetivo del presente trabajo es la realización de un estudio sistemático de las diferencias observadas en distribuciones de electrones doblemente diferenciales, en ángulo y energía, cuando se comparan espectros obtenidos con proyectiles atómicos y moleculares de igual velocidad, incidentes en láminas delgadas de carbono.

Los primeros resultados experimentales específicos sobre el tema como así también una interpretación teórica del problema, obtenidos en este laboratorio, de la influencia de la correlación existente en los fragmentos de disociación molecular sobre los picos de electrones convoy, pueden verse en la ref. 13.

La magnitud que resulta como parámetro característico en este tipo de evento, es el tiempo de permanencia del proyectil molecular dentro del sólido, y en base a ello se puede estimar la separación media entre ambos componentes moleculares; la cual en definitiva determina el grado de correlación entre los fragmentos moleculares, siendo esta la responsable del efecto observado.

Surge así una de las necesidades básicas de este trabajo: el conocimiento del tiempo de permanencia del proyectil en el sólido. A tal efecto se debe medir la velocidad del proyectil y el espesor de la lámina. Tales requisitos marcan los lineamientos de la situación experimental, los cuales pueden resumirse en los siguientes puntos:

- i) Producción y aceleración de un haz de iones identificado según su especie (carga y masa) y su energía.
- ii) Análisis y detección de los electrones producidos en la colisión entre los iones con el blanco.
- iii) Análisis y detección de los iones, con y sin blanco interpuesto en su trayectoria.

Los puntos mencionados se describen en detalle en la sección 3.

3 - EQUIPO EXPERIMENTAL

La fig.1 muestra un esquema del sistema experimental empleado. A continuación detallaremos sus componentes.

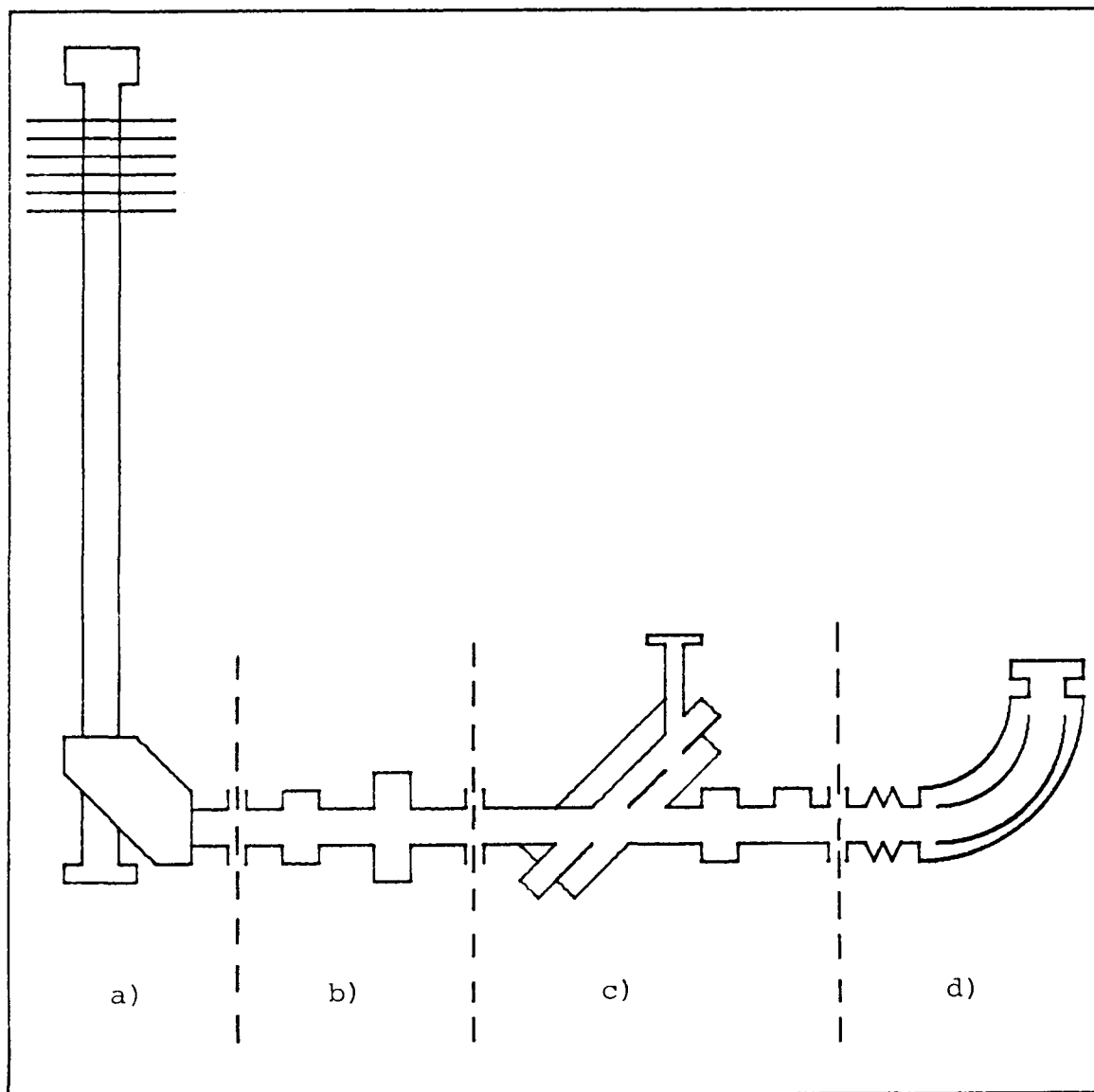


FIG.1: Esquema del sistema experimental. Zonas:

a) Acelerador y deflector de iones.

b) Cámara para cambio de carga y trampa fría.

c) Analizador y detector de electrones. Las colisiones se producen en el cilindro interior del analizador.

d) Analizador de iones.

3.1 - ACELERADOR DE IONES

Como fuente de partículas energéticas, se utilizó un acelerador del tipo Cockcroft-Walton¹⁴ con tensiones de aceleración variables en el rango de 50-300 KV. Una descripción esquemática del mismo puede verse en la fig.2 .

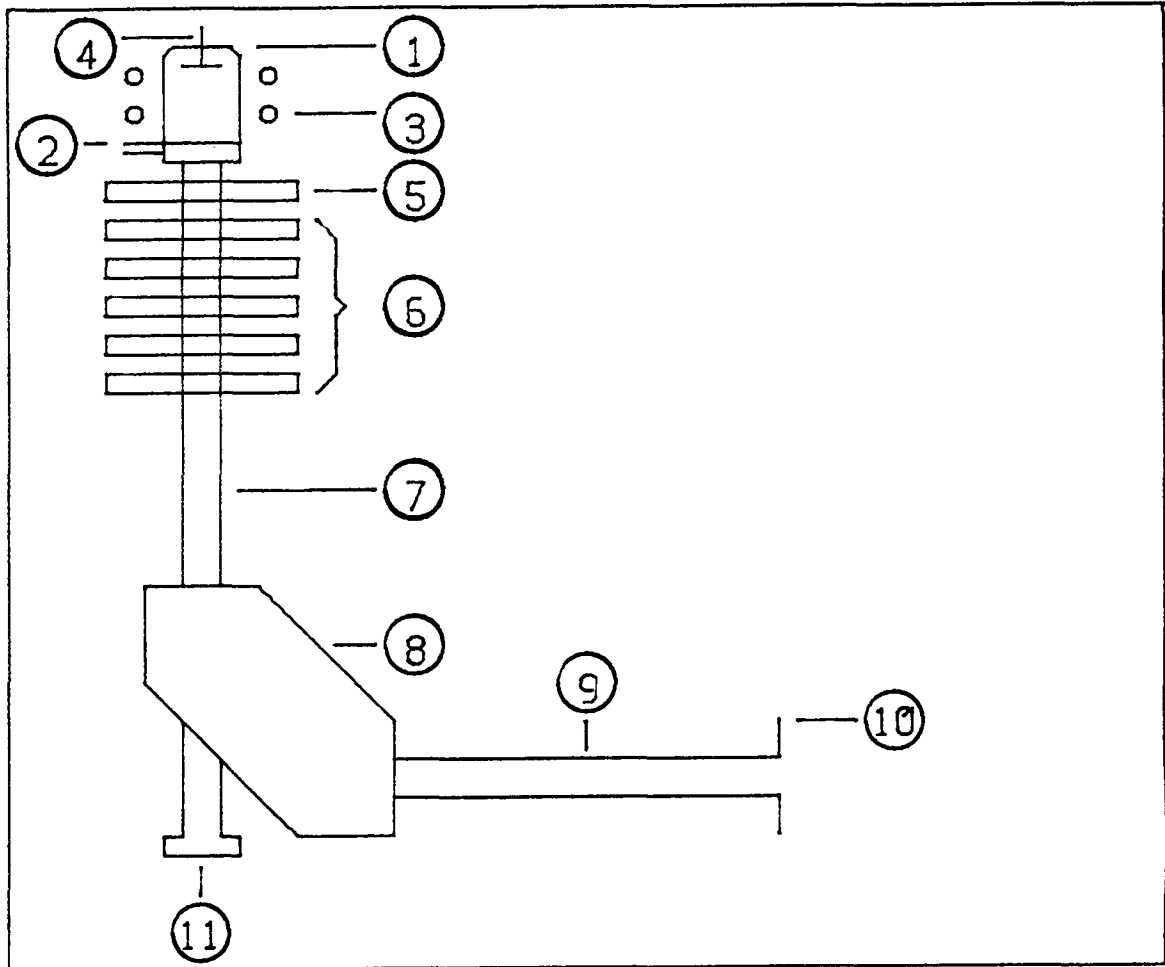


FIG.2: Esquema del acelerador de iones. Zonas:

1)Fuente de iones.-2)Entrada de gas.-3)Bobina para excitación con radiofrecuencia.-4)Cátodo con tensión positiva para facilitar la extracción de iones.-5)Terminal con tensión de enfoque del haz.-6)Conjunto con tensión de aceleración del haz.-7)Línea de transporte del haz.-8)Imán deflector a 90°.-9)Línea de transporte del componente del haz seleccionado por el imán.-10)Brida de adaptación a las líneas experimentales.-11)Electrodo para medición de la corriente total del haz.

La tensión se proporciona mediante un transformador de alta tensión al cual sigue un circuito doblador rectificador.

Al conjunto se halla acoplada una fuente de tensión continua (0-40 KV, 10 mA) la cual se superpone a la tensión proporcionada por el circuito doblador rectificador, compensando las fluctuaciones producidas en la zona de alta tensión. Esta configuración proporciona una alta estabilidad en la etapa de aceleración.

La fuente de iones del tipo de radiofrecuencia, consisten en un botellón de vidrio ubicado en un extremo del tubo de aceleración. Una válvula de aguja permite regular la entrada de gas al sistema.

La descarga gaseosa se logra mediante una bobina circundante al botellón, la cual actúa como emisora de radiofrecuencia produciendo el plasma dentro del botellón.

Una vez producidos los iones son repelidos hacia la línea de aceleración por medio de un electrodo positivo ubicado en el otro extremo de la fuente de iones.

Un primer electrodo en la línea de aceleración permite el enfoque del haz, mientras que los restantes producen la aceleración del mismo por etapas. De esta forma se logra una mayor homogeneidad en el campo eléctrico acelerante.

Producidos y acelerados los iones, se selecciona el componente del haz iónico deseado mediante el electroimán deflector, de acuerdo a su relación carga/masa, el cual ubica el haz en forma horizontal y a su vez tiene la facilidad de poder rotar alrededor de un eje vertical ubicado en la línea de transporte del haz, permitiendo así alcanzar diversas líneas experimentales.

Por medio de un sistema de correas aislantes se transmite la rotación a un generador aislado de tierra el cual proporciona la energía necesaria a los diversos circuitos que actúan en la zona de alta tensión (señal de radiofrecuencia, tensión de enfoque, etc.)

Los valores de tensión alcanzados en el acelerador se deducen de la corriente que circula por un instrumento de alta precisión obtenida a través de una cadena de resistencias calibrada.

El imán deflector es alimentado mediante una fuente de corriente regulada (160 V- 5 A max.), controlable mediante un potenciómetro de 10 vueltas como ajuste grueso y uno de 3/4 de vuelta para el ajuste fino. La fuente posee además una llave inversora de polaridad la cual permite contrarrestar el campo magnético remanente en las piezas polares del imán, facilitando el enfoque del haz total directo sobre un electrodo aislado, ubicado en el extremo de la línea de transporte.

La presión de base del sistema es de 1×10^{-6} Torr.; la cual se logra mediante una bomba difusora de aceite con trampa de aire líquido y vacío preliminar brindado por una bomba mecánica. Las presiones de trabajo varían entre 3 y 6×10^{-6} Torr. de acuerdo a los requerimientos de corriente que se pretenda extraer del sistema.

Cercano al imán deflector se encuentra un sistema de bombeo con las mismas características que el anterior, brindando el vacío necesario en la línea de transporte.

3.2 - ANALIZADOR DE ELECTRONES

Los electrones emitidos son analizados en energía y en ángulo con un deflector electrostático cilíndrico coaxial. La fig. 3 presenta un esquema del mismo.

Varios autores⁵ han estudiado las propiedades y características de este tipo de analizador. Risley¹⁶ realizó una descripción detallada de los parámetros a considerar en el diseño de estos analizadores.

No detallaremos las ecuaciones que rigen la óptica electrónica del equipo, pero sí mencionaremos algunas de sus características.

Básicamente consiste en dos cilindros coaxiales de radios a y b , interior y exterior respectivamente, entre los cuales se aplica una diferencia de potencial V_d , causante de la deflexión de los electrones. El cilindro interior permanece conectado a tierra mientras que sobre el exterior se realiza el barrido con una tensión negativa V_d como ya mencionáramos.

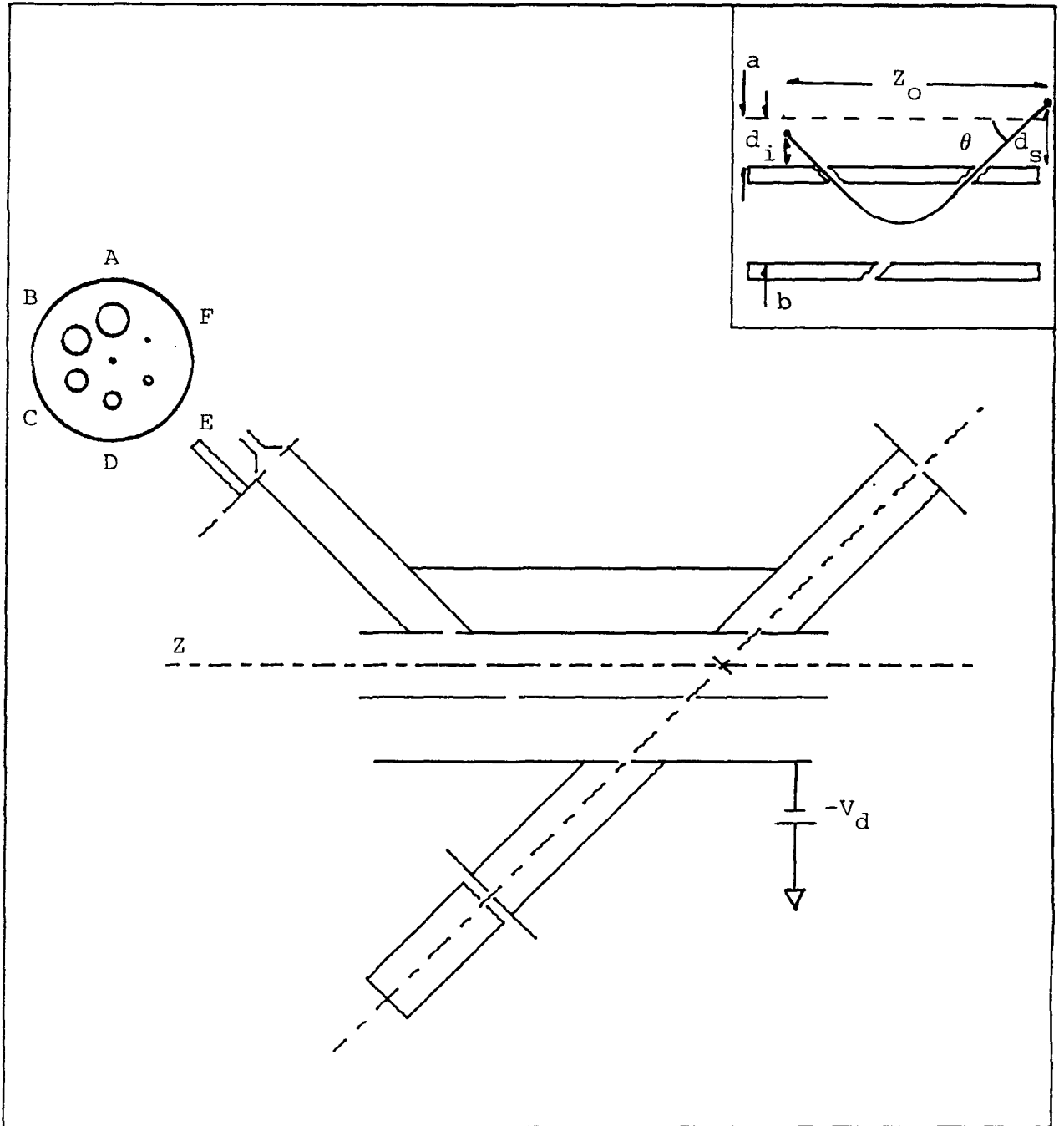


FIG.3: Esquema del analizador electrostático cilíndrico coaxial. El blanco se ubica en el punto de intersección de las dos líneas de puntos. Los electrones son deflectados por el cilindro exterior y colectados por el detector con forma de embudo. Los parámetros que se mencionan se describen en el texto.

La distancia Z_0 (ver recuadro fig.3) entre fuente-objeto y fuente-imagen puede desarrollarse en serie de Taylor según variaciones en energía ΔE y ángulo de entrada $\Delta\theta$ de los electrones provenientes de la fuente-objeto. Este desarrollo permite estimar en que medida aquellos electrones que posean una energía o un ángulo de entrada incorrectos alcanzarán la posición de la fuente-imagen.

Si la primera derivada parcial $(\delta Z/\delta\theta|_{Z_0})$ se anula, el equipo brinda focalización de primer orden. Con una adecuada elección de los parámetros se puede lograr que el analizador cilíndrico coaxial tenga focalización de segundo orden, es decir que la segunda derivada parcial $(\delta^2 Z/\delta\theta^2|_{Z_0})$ sea nula.

Para una configuración dada, a partir de la elección del parámetro $d = d_s + d_i$ que determina las posiciones de los focos objeto e imagen, los restantes parámetros (Z_0, C, θ , etc.) quedan fijos si se desea focalización de segundo orden.

Tomando $d_s = d_i = a$, lo cual implica que tanto la fuente como su imagen se localizan sobre el eje Z del analizador queda definido el ángulo de entrada al mismo, siendo este igual a $\theta = 42.3^\circ$.

De la Tabla 1 en la ref.16 obtenemos los restantes parámetros, a saber: $(b/a)^{E/V_d} = 3.7$; $Z_0 = 6.13$, ambos en unidades del radio interior del cilindro (a).

La constante del analizador definida como $C = V_d/E$, debe ser mayor que $\text{sen}^2\theta$ para evitar que los electrones con una energía E choquen contra las paredes del cilindro exterior.

A partir de un radio dado del cilindro interior se obtuvieron los restantes parámetros:

| | |
|------------------------------|------------------|
| Radio del cilindro interior: | $a = 11.6$ mm. |
| Radio del cilindro exterior: | $b = 25.5$ mm. |
| Distancia fuente-imagen : | $Z_0 = 71.1$ mm. |
| Distancia imagen-detector : | $d = 71.6$ mm. |
| Constante del analizador : | $C = 0.6$ |

Delante del cono de entrada del detector ("channeltron") se sitúa un disco giratorio sobre el cual existen seis orificios

circulares de diferentes radios permitiendo así variar la resolución determinada por el ángulo sólido subtendido entre los diafragmas imagen y el correspondiente al detector.

La Tabla I (ver sección 3.5) muestra las características del analizador para cada uno de los diferentes diafragmas.

El conjunto formado por el cilindro interior y el detector puede girarse desde el exterior del equipo posibilitando el análisis de electrones con trayectorias fuera del plano determinado entre el eje Z y el haz de iones; es decir aquellos electrones que forman un ángulo $\alpha \neq 0$ con el haz.

Para un dado ángulo de rotación externa ψ la relación con su correspondiente ángulo real de detección α viene dada por

$$\alpha = 2 \arcsen(\sen(\psi/2) \times \sen \theta)$$

donde $\theta = 42.3^\circ$. Tal expresión se obtiene mediante una relación geométrica sencilla entre ángulos.

Las principales ventajas de este tipo de analizador, teniendo en cuenta las necesidades experimentales presentes, pueden resumirse en los siguientes puntos:

- I) Exploración de distribuciones de electrones longitudinales y transversales, a través de mediciones de espectros de energía o velocidad como así también distribuciones angulares incluyendo direcciones muy próximas a la dirección del haz sin interceptarlo.
- II) Conocimiento de la resolución en velocidad o energía del espectrómetro y en particular la aceptación angular. Posibilidad de cambiar esta aceptación mediante la elección de un θ_0 dado; es decir el semiángulo plano del cono determinado por los diafragmas imagen y aquel situado frente al detector.
- III) Ajustes precisos en la alineación del equipo de forma tal que la dirección de los electrones detectados coincida con la del haz de iones.
- IV) Fondo experimental pequeño en los espectros de electrones medidos.
- V) Facilidad para cambiar de blancos sólidos a gaseosos.

Luego de atravesar el analizador, el haz de iones penetra en una copa de Faraday la cual presenta una ranura de aproximadamente 0.7mm. en su parte posterior. Detrás de esta ranura se ubica un electrodo aislado de forma tal de facilitar la alineación del equipo, sin blanco interpuesto en la trayectoria del haz, maximizando la corriente medida en este electrodo. Desde el exterior del equipo puede retirarse el electrodo para permitir al haz su pasaje hacia el analizador de iones.

Las presiones de trabajo se encuentran entre 6×10^{-7} Torr cuando se emplean blancos sólidos. Los sistemas de vacío están compuestos por bombas difusoras de aceite con trampas frías de aire líquido y vacío preliminar provisto por bombas mecánicas.

3.3 - ANALIZADOR DE IONES

A continuación del analizador de electrones se encuentra un analizador electrostático cilíndrico de 90° de deflexión. Dadas sus características permite analizar en energía el haz de iones.

La deflexión se logra por medio de un campo eléctrico aplicado entre conductores, los cuales son secciones de cilindros coaxiales entre planos perpendiculares al eje común. Allison y colaboradores¹⁷ describen con detalle la construcción y calibración de este tipo de analizador.

La fig.4 muestra un esquema del equipo. El radio medio de las placas es de 20cm. Tanto las ranuras de entrada como de salida pueden ajustarse por medio de tornillos micrométricos desde el exterior del equipo, posibilitando así la alineación del mismo, como así también su ancho, permitiendo variaciones en la resolución experimental.

El haz de iones deflectado, se colecta con una copa de Faraday y esta señal es enviada a un instrumento para su lectura.

El analizador se encuentra montado sobre un sistema de marcos móviles facilitando su alineación. El acople con la etapa anterior (analizador de electrones) se realiza por medio de un fuelle metálico.

El vacío alcanzado en el equipo es de 1×10^{-7} Torr y es proporcionado por una bomba difusora de aceite con trampa fría y una bomba mecánica.

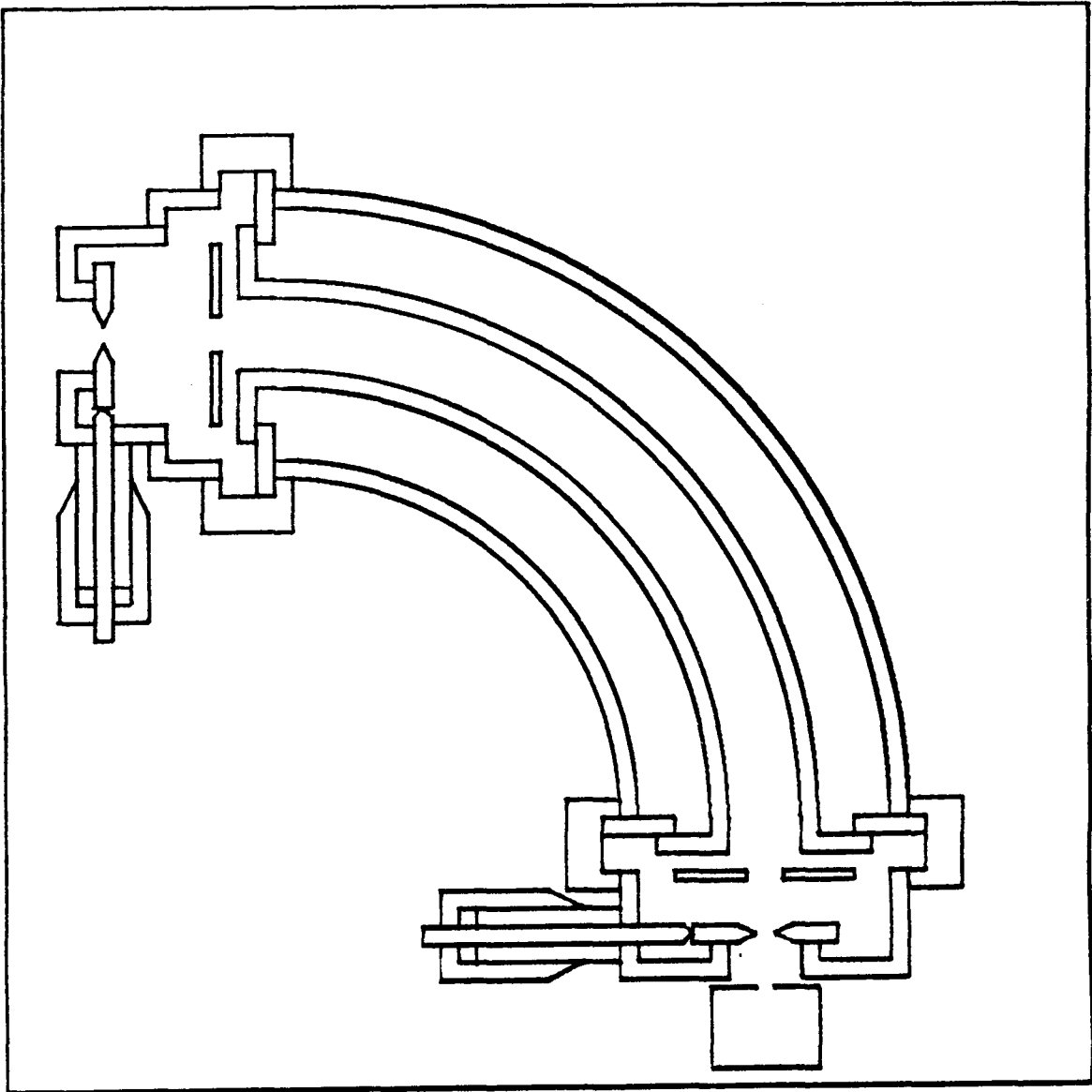


FIG.4: Vista del analizador electrostático de 90°. Se observan las ranuras desplazables con sus correspondientes tornillos micrométricos. El haz de iones ingresa por la parte superior izquierda, siendo deflectado y posteriormente colectado con la copa de Faraday que se encuentra en la parte inferior del dibujo.

3.4 - SISTEMA DE ADQUISICION DE DATOS

Un esquema detallado del sistema puede verse en la fig.5.

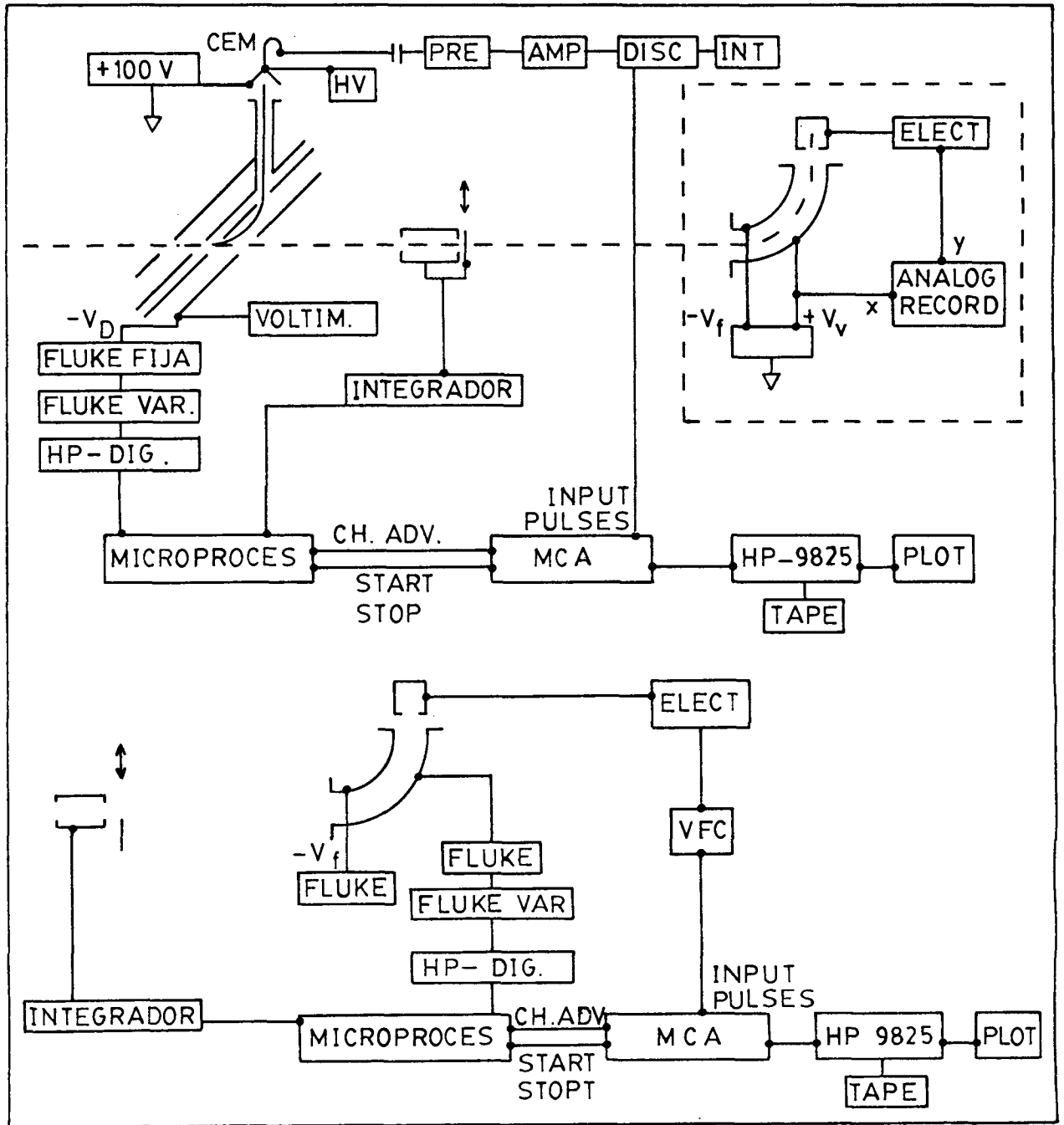


FIG.5: Esquema del sistema de adquisición de datos. El recuadro en la parte superior derecha del dibujo se amplía en la parte inferior del mismo, donde se muestra una variante para la obtención de espectros de iones. En el texto se detalla cada uno de los componentes del dibujo.

Veamos primero como se obtiene la información correspondiente al proceso de transferencia de electrones al continuo.

Los electrones producidos en la interacción entre los iones con la lámina, ingresan en la zona comprendida entre los dos cilindros del analizador. Allí encuentran un campo deflector suministrado por la tensión V_d proveniente de dos fuentes de tensión marca Fluke; una de ellas se ajusta previamente a un valor próximo a la zona de tensión que se desea barrer. La otra fuente, también marca Fluke, es de tipo flotante; es decir, superpone su tensión a la anterior, realizando el barrido en la zona de tensión elegida.

Una vez seleccionados los electrones según su energía, son detectados por un canal multiplicador de electrones (CEM) el cual envía un pulso convenientemente amplificado a un analizador multicanal (MCA), usado en el modo de multiescalímetro.

El monitoreo del haz de iones se realiza tomando la señal de corriente proveniente de la copa de Faraday y enviándola a un electrómetro que actúa como integrador de la carga recibida en la copa.

Hasta aquí vemos cuales son los parámetros a controlar.

El responsable de ordenar y ejecutar las diferentes etapas es un microprocesador (6800-Motorola) convenientemente programado para tal fin.

La toma de un espectro se desarrolla de la siguiente forma.

Una vez cargado el programa en el microprocesador desde una cinta magnética, se seleccionan los canales iniciales y finales correspondientes al MCA; se establece la tensión inicial y rango total de barrido y se ejecuta la instrucción de iniciación.

A continuación es enviada una señal desde el microprocesador al MCA, colocando a este último en posición de recibir datos. Simultáneamente parte una señal digital a una fuente Hewlett-Packard la cual comanda la fuente Fluke que proporciona el barrido de tensión. Mientras tanto el microprocesador cuenta el número de pulsos recibidos desde el integrador de corriente y cuando recibe una cantidad previamente fijada de estos pulsos hace avanzar un canal (o la cantidad de canales ya establecida) al MCA a la vez que varía proporcionalmente la tensión de barrido.

El proceso continúa hasta que se alcanza el canal final.

De esta forma, vemos que cada canal tiene asociada una tensión de barrido y el número de cuentas totalizado en dicho canal es proporcional al número de electrones con una energía correlacionada al voltaje aplicado en el deflector.

La operación puede repetirse en forma automática por medio del microprocesador.

A pesar de ser ya una práctica común el empleo de sistemas de adquisición de datos basados en computadoras, cabe destacar un punto importante. En mecanismos como el estudiado, donde las secciones eficaces involucradas son tan pequeñas, es imprescindible contar con un sistema de normalización de la corriente del haz empleado. El MCA permanece en cada canal, recibiendo pulsos correspondientes a electrones detectados, no un intervalo de tiempo constante, sino que espera una cantidad fija de carga recibida en la copa de Faraday para pasar al siguiente canal. Concluimos así, que los espectros medidos son independientes de las fluctuaciones del haz de iones.

De la memoria del MCA, los espectros son pasados a una computadora HP-9825 la cual permite la elaboración y procesamiento de los datos obtenidos, como así también su grabación en cinta magnética.

Retirando el electrodo que se encuentra ubicado en el fondo de la copa de Faraday correspondiente al analizador de electrones, el haz de iones alcanza el segundo deflector para ser analizado según su energía.

La adquisición de datos cuando se analiza el haz de iones se realiza en forma similar a la anterior.

Una fuente de tensión Fluke (0-10 KV) fija la tensión negativa ($-V_f$) aplicada en la placa de deflección interior. Otra fuente de iguales características sitúa la tensión de la placa exterior en un valor cercano a $+V_f$. El barrido se realiza sobre la placa exterior con una fuente flotante superponiendo la tensión de barrido al valor dado por esta última fuente ($+V_f$). El control de esta operación también se realiza con ayuda del microprocesador.

La señal de corriente recibida en la copa de Faraday, correspondiente al analizador de iones, es leída con un electrómetro de alta sensibilidad, enviando este último una tensión proporcional a la lectura del instrumento, a un convertidor de tensión a frecuencia de pulsos (TTL), el cual se emplea como señal de entrada al MCA.

La normalización se realiza tomando la señal de corriente de la copa de Faraday perteneciente al analizador de electrones. A pesar de no estar el blanco interpuesto en la trayectoria del haz, una pequeña fracción de éste, incide sobre la ranura que se encuentra en el fondo de la copa y esta señal se aprovecha como normalización de las fluctuaciones del haz.

Finalmente, los datos acumulados en el MCA son pasados a la computadora para su procesamiento.

3.5 - CALIBRACION DE EQUIPOS

Se realizó un estudio detallado del comportamiento del analizador de electrones con ayuda de un filamento incandescente como fuente emisora de electrones.

Un esquema del dispositivo utilizado puede verse en la fig.6.

El ángulo determinado entre el eje del analizador y la dirección definida por la punta del filamento y el orificio practicado en la pieza semiesférica, coincide con el ángulo de entrada del analizador ($\theta = 42.3^\circ$).

La ubicación del filamento en el foco del analizador se logró de la siguiente forma.

Por medio de una lámpara ubicada en el extremo de la línea de transporte del haz de iones y con ayuda de un catetómetro, se estableció la visual correspondiente a la dirección de entrada y salida del haz luminoso del analizador, ubicándola en el centro del retículo del instrumento óptico. Tal dirección, por construcción, define un ángulo $\theta = 42.3^\circ$ con el eje del equipo.

A continuación se introdujo el filamento en el analizador, desplazándolo hasta que su posición coincidió con el retículo perteneciente al catetómetro.

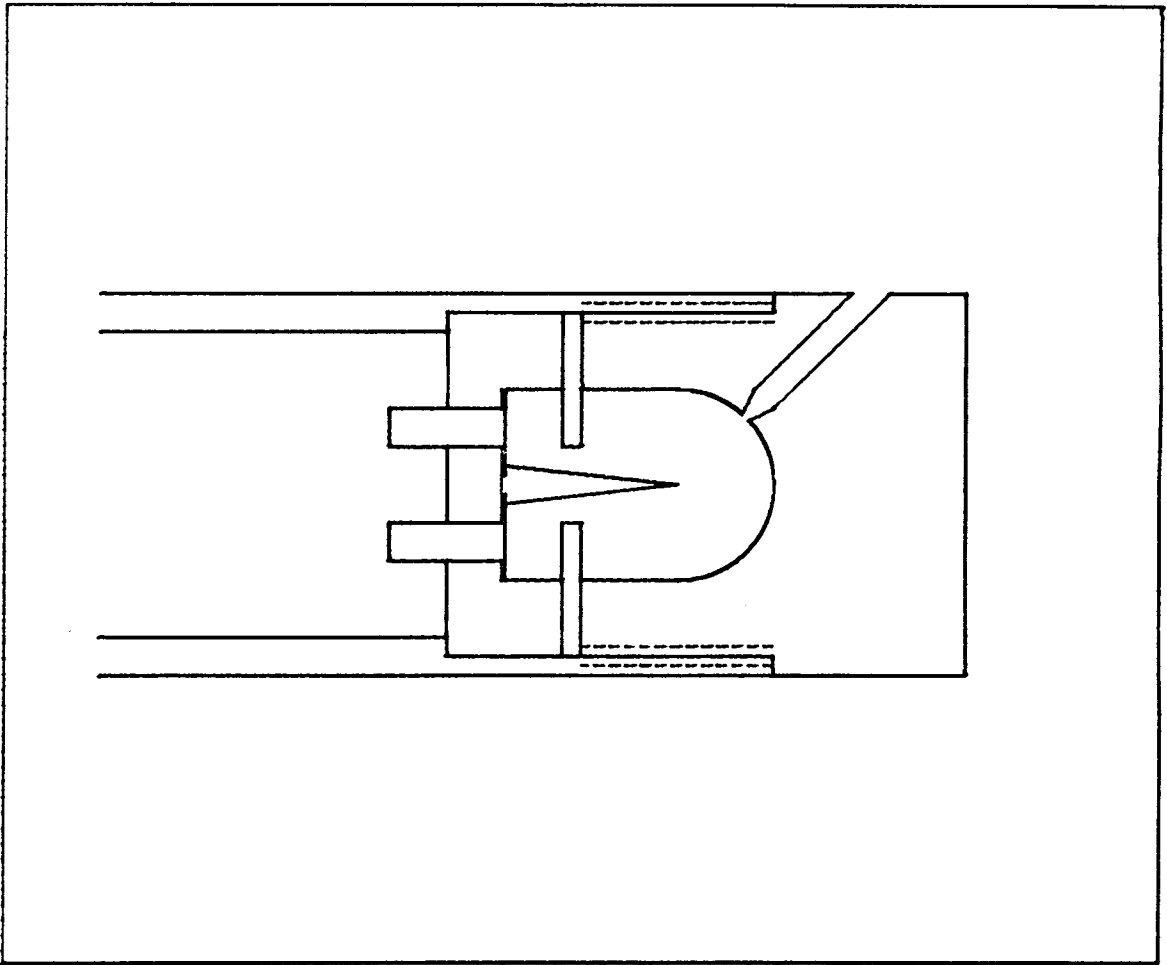


FIG.6: Filamento emisor de electrones. El campo acelerante se establece entre el filamento y la superficie esférica que rodea al mismo. El orificio que permite la salida de los electrones tiene un diámetro de 0.7mm.

Aplicando una tensión negativa al filamento ($-V_a$), los electrones son acelerados por el campo eléctrico radial establecido entre el filamento y el sector semiesférico que lo rodea.

Se tomaron varias series de espectros variando la energía de los electrones en función de la aceptación angular del equipo.

La fig.7 presenta un espectro típico tomado con el filamento como fuente emisora de electrones.

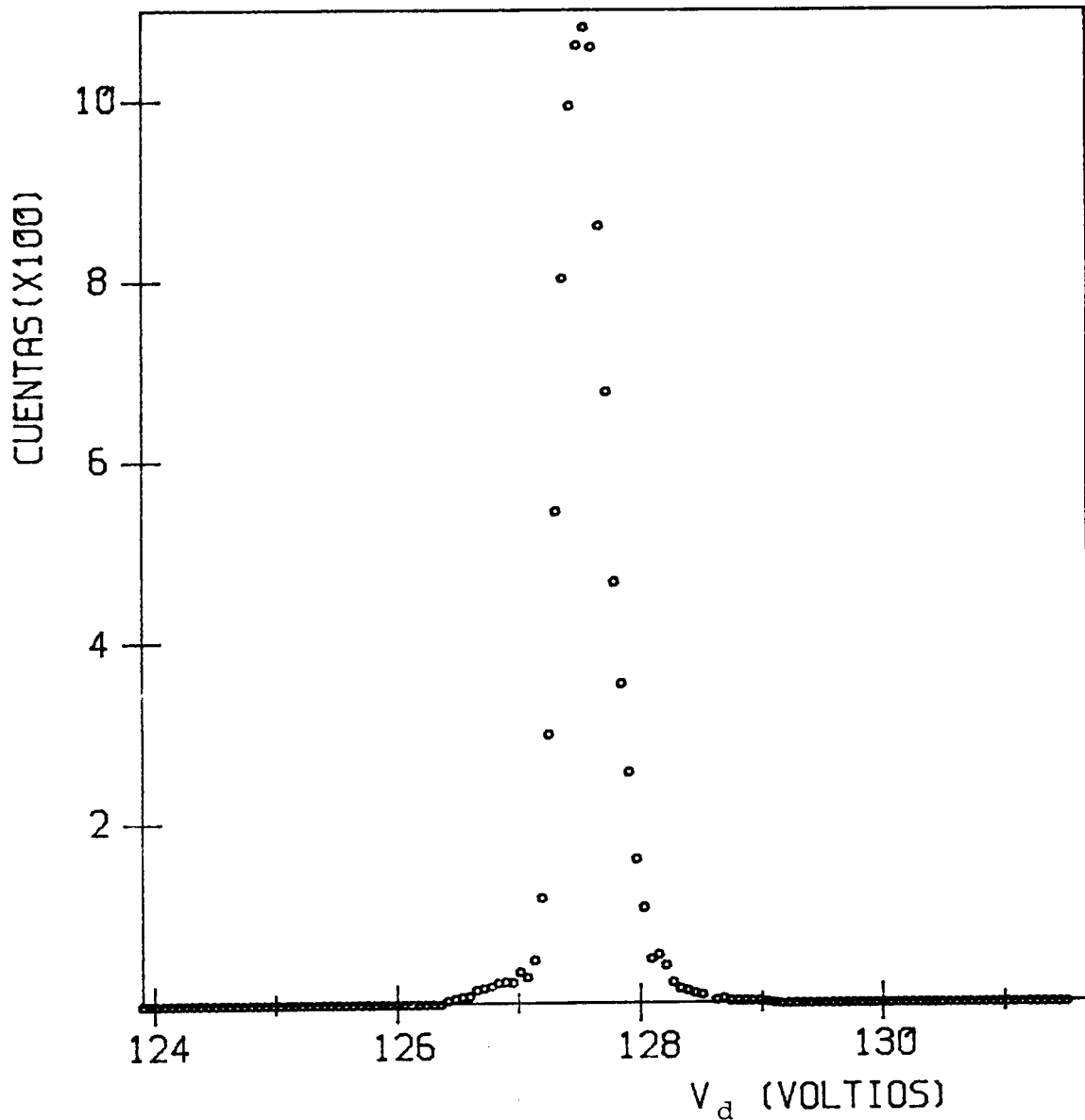


FIG.7: Espectro de energía de los electrones emitido por el filamento para una tensión de aceleración $V_a=200V$, empleando el diafragma más pequeño(F).

Con los datos obtenidos se calculó la resolución del equipo para cada diafragma (ver Tabla I), como así también la constante de calibración en energía (fig.8).

| ORIFICIO | DIAMETRO mm. | θ_0 grados | $\theta_0 \times 10^2$ radianes | R % |
|----------|-----------------|----------------------|------------------------------------|--------|
| A | 6.25 | 2.50 | 4.36 | 1.67 |
| B | 5.0 | 2.00 | 3.49 | 1.62 |
| C | 3.75 | 1.50 | 2.62 | 1.57 |
| D | 2.5 | 1.00 | 1.75 | 1.27 |
| E | 1.25 | 0.50 | 0.87 | 0.60 |
| F | 0.5 | 0.17 | 0.29 | 0.33 |

TABLA I: Características del analizador de electrones para cada uno de los diafragmas intercambiables. El significado del ángulo θ_0 se detalla en la sección 3.2 .

La resolución se obtuvo como $R = \Delta E/E$ donde ΔE corresponde al ancho total tomado en la mitad de altura de cada pico y E es la energía de dicho pico. La constante de calibración, ya definida en la sección 3.2 como $C = V_d/E$, resulta del cociente entre la tensión de deflexión V_d correspondiente al pico y la energía del mismo, tomando esta última como $E = e.V_a$ donde e es la carga del electrón y V_a la tensión de aceleración de los electrones.

Cabe destacar que en el cálculo de la resolución (R), solo se tuvieron en cuenta aquellos valores de V_a donde R se hace constante, lo cual indica que el ancho propio debido al fenómeno de emisión termoiónica es despreciable frente al ocasionado por el sistema de análisis electrostático.

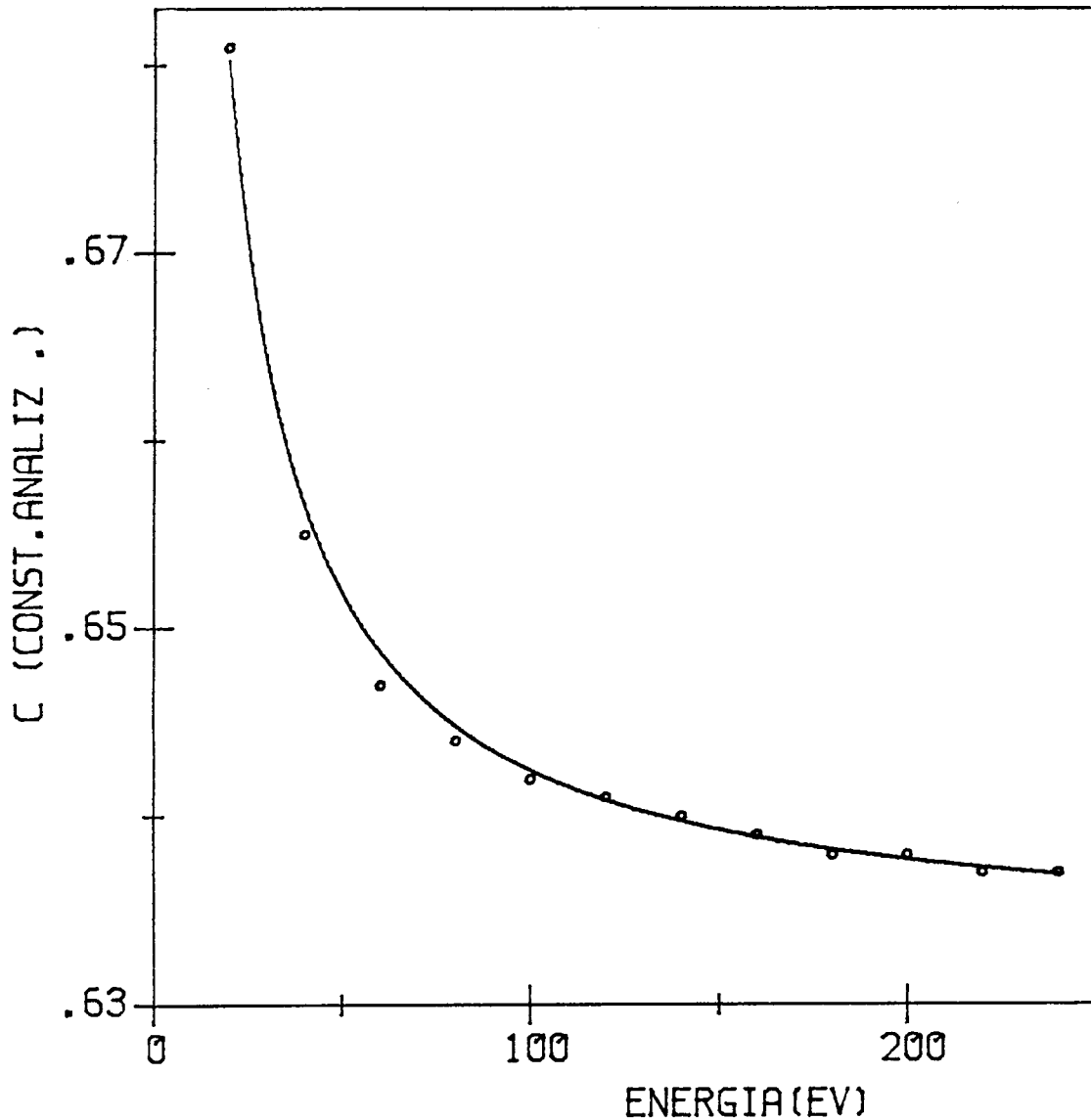


FIG.8: Constante de calibración en energía del analizador de electrones. El valor de C para cada uno de los seis diafragmas coincide para una dada energía.

Los resultados sobre la resolución en energía del analizador fueron empleados en la ref.18 donde se discute ampliamente la influencia de la resolución experimental sobre los picos característicos del proceso de ETC en colisiones de iones livianos con blancos gaseosos.

En la fig.8 se observa que la constante de calibración aumenta al disminuir la energía de los electrones analizados.

Para contemplar esta variación de C, se hizo pasar una curva del tipo $C = A+B/E$ por los puntos de la fig.8 y por el método de cuadrados mínimos se obtuvo: $A = (0.63 \pm 0.03)V/eV$ y $B = (0.90 \pm 0.05)V$, resultando la siguiente ecuación: $E = (V_d - B)/A$ para el cálculo directo de la energía E en función del voltaje de deflexión V_d .

El analizador de iones se calibró utilizando como valor de referencia la energía de resonancia de la reacción nuclear $B^{11}(p,\gamma)C^{12}$. Bombardeando un blanco de B^{11} grueso con protones se contaron los rayos γ con un detector de centelleo hasta que se ubicó el valor de la energía umbral de dicha reacción ($E_r = (163.1 \pm 0.5)KeV$)¹⁹. A continuación se estableció el voltaje de deflexión necesario en el analizador para dicha energía, obteniendo así la constante de calibración del equipo, siendo este valor de : $(19.45 \pm 0.15)KeV/KV$.

Se verificó la linealidad del integrador de corriente para los diferentes rangos de lectura del instrumento, encontrándose que la misma se cumplía dentro del 1%.

Con ayuda del MCA se estudió el comportamiento en altura de pulsos del detector de electrones (CEM) y su electrónica complementaria, estableciéndose las condiciones óptimas para su funcionamiento.

3.6 - PREPARACION DE BLANCOS

Como blancos sólidos se emplearon láminas delgadas de carbono provistas por la firma Yissum Research Development Co., Jerusalem, Israel, con densidades superficiales nominales entre 2 y 20 $\mu g/cm^2$.

Las láminas se encuentran depositadas por evaporación sobre portamuestras de vidrio, sobre los cuales se depositó, previamente, una fina película de detergente. Los portamuestras se sumerjen lentamente y con un cierto ángulo en agua destilada caliente (50-70°C), hasta lograr que la lámina se despegue del vidrio y quede flotando sobre la superficie del agua. A continuación se levantan los trozos de lámina flotantes con los portamuestras, los cuales poseen un orificio central de 3mm. de diámetro, y se las deja secar unas 24hs. hasta su colocación en el analizador de electrones.

El soporte portaláminas tiene capacidad para tres portaláminas. Mediante un sistema de tornillo se logra el desplazamiento a lo largo del eje central del analizador, permitiendo interceptar el pasaje del haz de iones con cualquiera de los tres blancos sin necesidad de romper el vacío existente en el equipo.

Con un portaláminas especialmente diseñado se estudió la influencia en los espectros de electrones convoy cuando éstos se producen fuera del foco del analizador; verificándose que la forma de los picos, como así también su rendimiento, no variaban cuando el blanco se desplazaba 3mm. antes o después del foco objeto según la dirección del haz de iones.

4 - MEDICIONES

4.1 - PRELIMINARES

Las primeras mediciones realizadas mostraron que, en determinadas situaciones experimentales, los espectros tomados con H_2^+ como proyectil incidente diferían notablemente de aquellos en que el proyectil usado era H^+ a igual velocidad.

El criterio utilizado para afirmar que ambos tipos de proyectiles producían electrones convoy a una misma velocidad, se basó en los mismos electrones convoy.

En efecto, tomado un espectro con H^+ incidente, solamente se duplicaba la tensión del acelerador para obtener H_2^+ como proyectil, dejando invariables el resto de las condiciones experimentales. De esta forma sí en ambos espectros coincidía el canal con el máximo número de cuentas, se daba por cumplido el requisito de igual velocidad en los proyectiles.

La fig.9 muestra dos espectros superpuestos tomados con H^+ y H_2^+ incidentes a una velocidad $v = 2u.a.$ (100KeV/u.m.a.) sobre una lámina de $2 \mu g/cm^2$ (según especificaciones del fabricante). Dos características importantes se observan inmediatamente. La primera de ellas es el mayor rendimiento obtenido con el proyectil molecular para aquellos electrones que poseen una velocidad muy próxima a la del proyectil (zona de la cúspide). La segunda muestra la coincidencia de ambos espectros en las zonas alejadas de la cúspide.

Ante la necesidad de contar con un parámetro que describiese en forma cuantitativa el efecto observado, se intentaron diversos procedimientos.

Debido a que los espectros tomados se encuentran normalizados por unidad de carga emergente de la lámina (ver sección 3.4) es lícita la comparación directa de los resultados experimentales.

En un primer intento se optó por realizar el cociente entre el número de cuentas obtenido para cada máximo. Dicha magnitud refleja la diferencia en el rendimiento de ambos proyectiles para aquellos electrones que viajan con una velocidad muy próxima a cero en el sistema de referencia del ión. El principal proble-

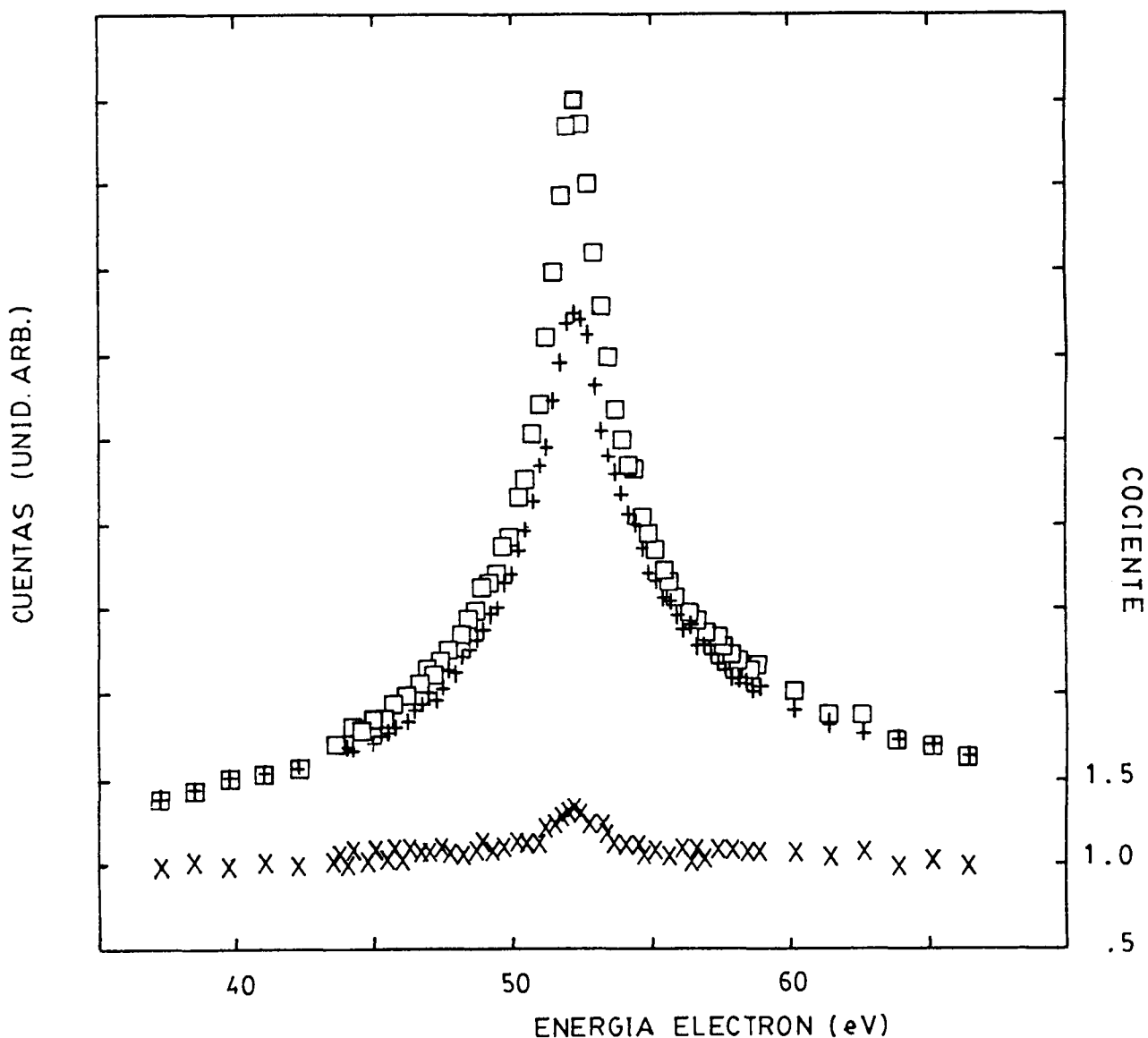


FIG.9: Espectros de electrones convoy tomados con H^+ (+), H_2^+ (\square) para una energía de 100KeV/uma, incidentes sobre una lámina de carbono de $2\mu\text{g}/\text{cm}^2$. En la parte inferior se graficó el cociente entre ambos espectros canal a canal (x).

ma de esta evaluación radica en que ambos números se ven altamente influenciados por las fluctuaciones estadísticas propias del sistema experimental.

A continuación se procedió a tomar el cociente canal a canal entre ambos espectros como puede verse en la parte inferior de la fig.9. Fuera de la zona correspondiente al pico de electrones convoy dicho cociente tiende a uno mientras que a medida que se aproxima al pico crece por encima de la unidad.

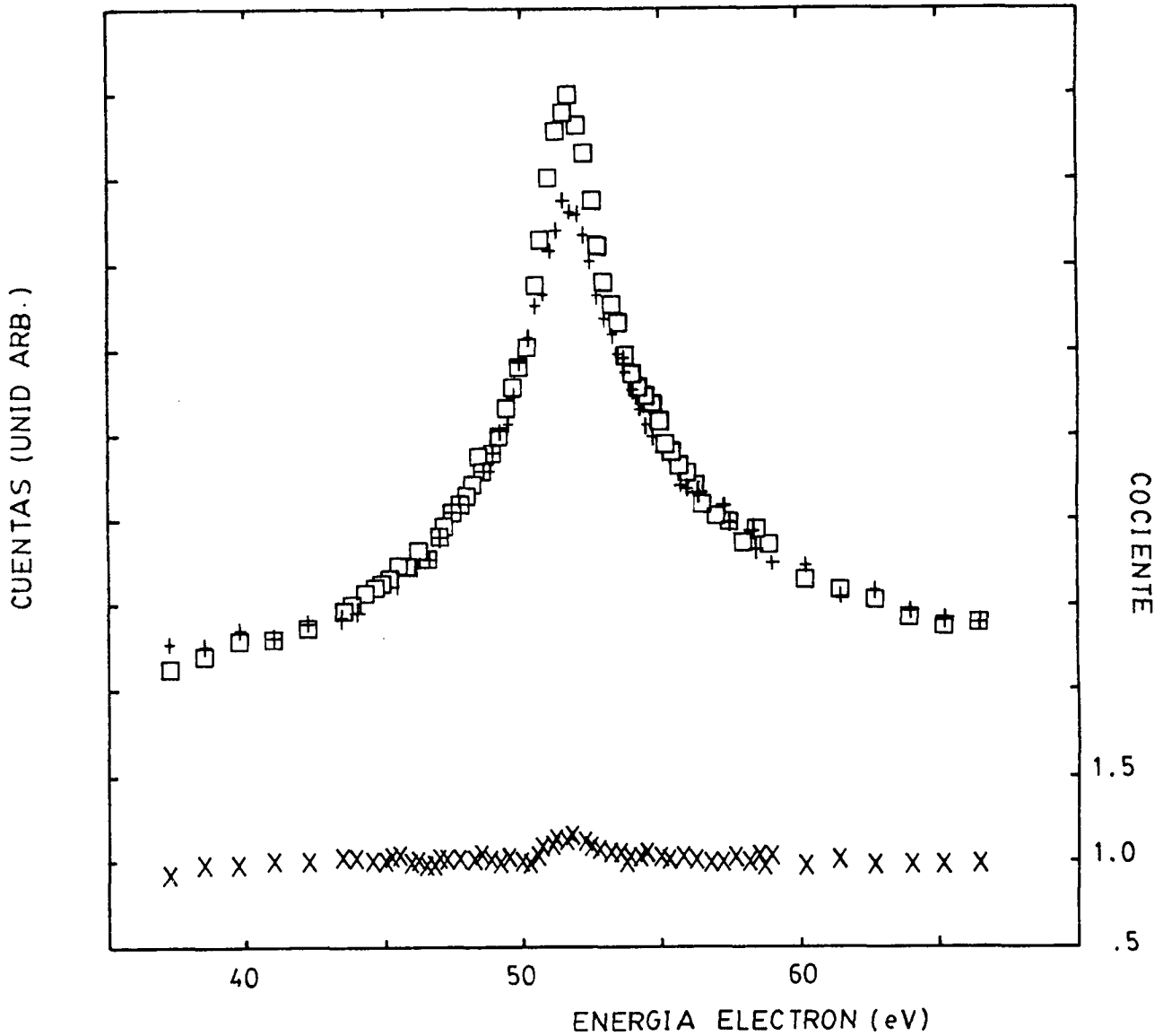


FIG.10: Espectros de electrones convoy tomados con H^+ (+), H_2^+ (□) para una energía de 100KeV/uma, incidentes sobre una lámina de carbono de $5\mu\text{g}/\text{cm}^2$. En la parte inferior se graficó el cociente entre ambos espectros canal a canal (x).

La fig.10 muestra dos espectros tomados a igual velocidad que los correspondientes a la fig.9 pero con una lámina de $5\mu\text{g}/\text{cm}^2$. Nuevamente se observa que ambos coinciden en las colas pero las diferencias en la zona cercana al pico son menores que en el caso anterior.

Como resultante de la comparación de varios espectros tomados a diferentes velocidades de los proyectiles y espesores de

las láminas, concluimos que el parámetro que rige el comportamiento disímil de los proyectiles moleculares respecto de los atómicos es el tiempo de permanencia del proyectil dentro de la lámina.

Cuando el ion molecular (H_2^+) ingresa en la lámina pierde su electrón en las primeras capas del sólido, iniciándose la mutua repulsión entre los protones. Para una distancia inicial R_0 correspondiente a un tiempo $t=0$ la separación R irá creciendo debido a la fuerza repulsiva $Z_1 Z_2 e^2 / R^2$ hasta un valor $R(t)$ a un tiempo¹⁰ :

$$t = t_0 \{ X^{1/2} (X-1)^{1/2} + \ln [X^{1/2} + (X-1)^{1/2}] \} \quad (4.1)$$

donde $X = R/R_0$ y $t_0 = (\mu R_0^3 / 2Z_1 Z_2 e^2)^{1/2}$, siendo μ la masa reducida.

Teniendo en cuenta la relación (4.1) podemos transformar la escala de tiempo de permanencia del proyectil molecular dentro del sólido a una escala de separación media de los protones a la salida de la lámina como puede verse en la fig.11



FIG.11: Gráfico de la ecuac.(4.1) para un $R_0 = 1.29 \text{ \AA}$. Un FS equivale a 10^{-15} seg.

El principal problema aparecido durante la realización de las mediciones fue la falta de reproducibilidad de los espectros en determinadas situaciones experimentales.

Entendemos que la mayor emisión cerca del pico y la coincidencia de los espectros en las colas es uno de los resultados básicos del presente trabajo. Por lo tanto todo el estudio de la posible influencia proveniente del cambio de superficie, estructura cristalina y espesor de láminas fué necesario para poder asegurar la igualdad de emisión electrónica en las colas.

Con el simple propósito de lograr reproducibilidad en las mediciones se decidió estudiar el comportamiento de la emisión secundaria (en particular la zona correspondiente a electrones convoy), variando parámetros tales como corriente del haz, presión en la cámara de colisiones, tipo de proyectil, gas residual, espesor de lámina, etc. .

4.2 - EFEECTO BLANCO-HAZ

La no reproducibilidad de los espectros tomados bajo idénticas situaciones experimentales, indujo a pensar que la permanencia del haz de iones sobre el blanco producía algún tipo de alteración sobre el mismo.

Variaciones de la emisión total de electrones secundarios, provenientes de láminas de carbono bombardeadas con protones, en función del tiempo de bombardeo, ya habían sido observadas en este laboratorio²⁰ en condiciones de ultra alto vacío ($P \sim 10^{-10}$ T).

En los últimos años se han realizado diversos tipos de estudios relativos a los cambios producidos en láminas de carbono por efecto del bombardeo con diferentes proyectiles. El especial interés en el tema radica en el empleo ampliamente difundido de las láminas de carbono como agentes de intercambio de carga en los aceleradores de tipo Tandem Van de Graaff.

El trabajo de Dumont et al²¹ sobre variaciones del espesor de láminas de carbono en función del tiempo de irradiación, medido en base a la reacción nuclear $^{12}\text{C}(d,p_0)^{13}\text{C}$, muestra que el ensanchamiento de las láminas es mayor cuanto mayor es la presencia de hidrocarburos en las proximidades de la misma, lográndose anular este efecto por medio de una trampa fría cercana al blanco.

Sander y colaboradores^{22,23} demuestran que el aumento en la pérdida de energía de proyectiles livianos (H,He,Li) con energías entre 100-400KeV, a medida que el blanco es irradiado, se debe principalmente a cambios en la estructura cristalográfica (transición de carbono amorfo a carbono grafito) como consecuencia del calentamiento producido por el haz y no a deposición de hidrocarburos en la superficie. Este hecho se debe a las condiciones de ultra vacío limpio logradas por estos autores.

Nuestro equipo experimental no se encuentra preparado para este tipo de investigaciones ya que no fué diseñado con tales fines. Por lo tanto, nos hemos limitado a estudiar los efectos producidos por cambios en las láminas bombardeadas, sobre los picos de electrones convoy.

La sistemática empleada consistió, en términos generales, en medir la pérdida de energía sufrida por el haz y de esta forma deducir el espesor de la lámina. A continuación se dejaba el haz incidiendo sobre el blanco y se iban tomando espectros de electrones convoy a intervalos regulares de tiempo. Por último se medía el frenamiento nuevamente.

Estas mediciones se realizaron variando diferentes parámetros, tales como corriente del haz, espesores de lámina y presión en la cámara.

La fig.12 muestra los resultados obtenidos en tres series de mediciones distintas, donde hemos graficado el conteje en el canal de la cúspide y un conteje promedio entre 15 canales (aproximadamente $\sim 6\text{eV}$) para ambos lados del pico.

Para los tres casos vemos una disminución de los contejes en función del tiempo de bombardeo. Las láminas empleadas en esta oportunidad no habían sido previamente irradiadas.

Cuando se utilizaron láminas previamente irradiadas (tiempos de irradiación ≥ 1 hora y corrientes $\sim 1 \times 10^{-8}$ A) los resultados son diferentes como muestra la fig.13. En ambos casos el número de cuentas en el pico aumenta mientras que en las colas se mantiene constante ó a lo sumo disminuye suavemente.

A continuación se realizó la siguiente prueba, empleando para ello láminas frescas. Con el haz incidente sobre la lámina se fueron tomando espectros como en los casos anteriores.

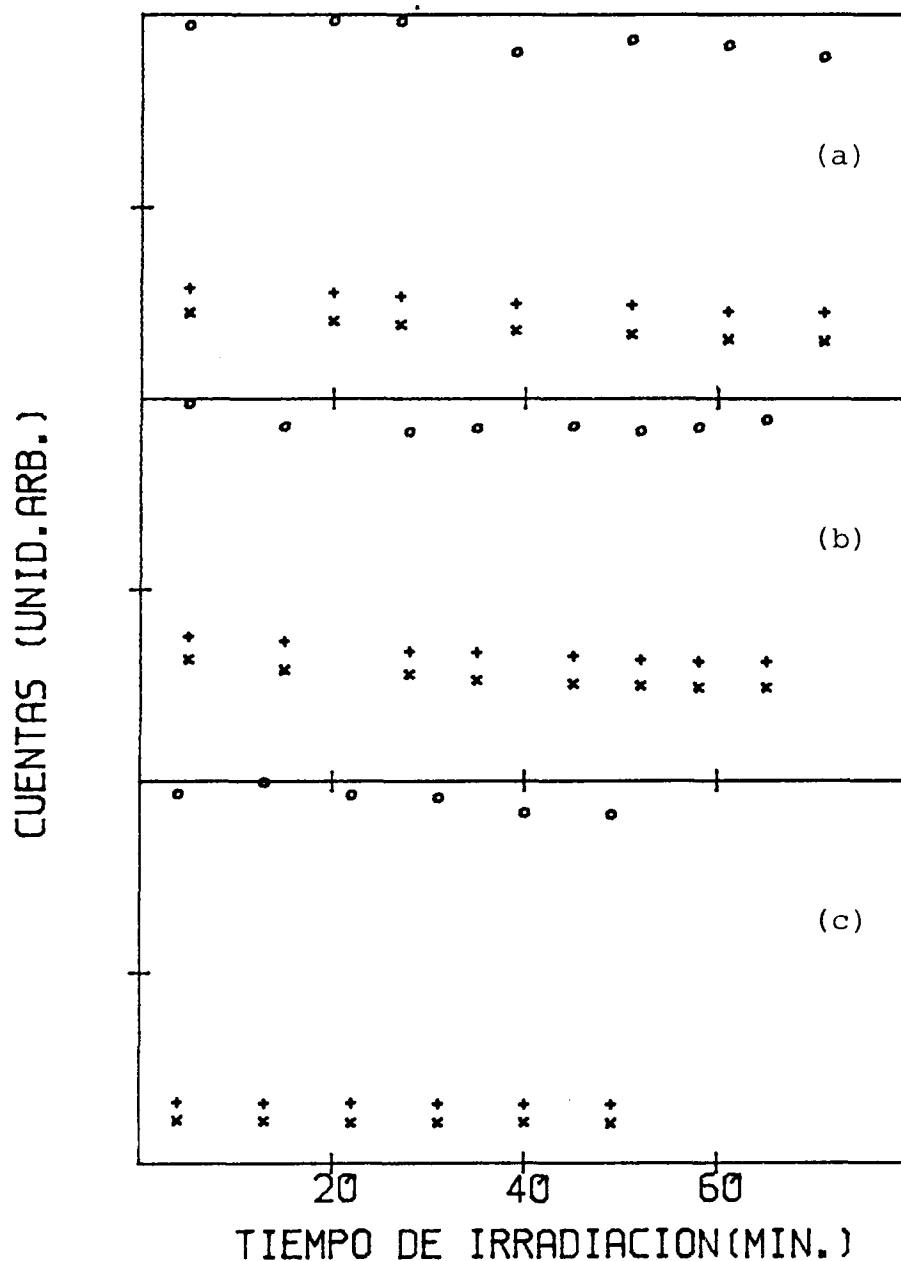


FIG.12: Variación de los contajes en tres zonas diferentes de los picos de electrones convoy en función del tiempo de irradiación sufrido por la lámina. Los círculos(o) corresponden al contaje en el canal del pico. El signo (x) corresponde a un promedio tomado en la zona de menor energía que el pico, mientras que el signo (+) corresponde a un promedio tomado en igual forma que el anterior pero en la zona de mayor energía respecto al pico.

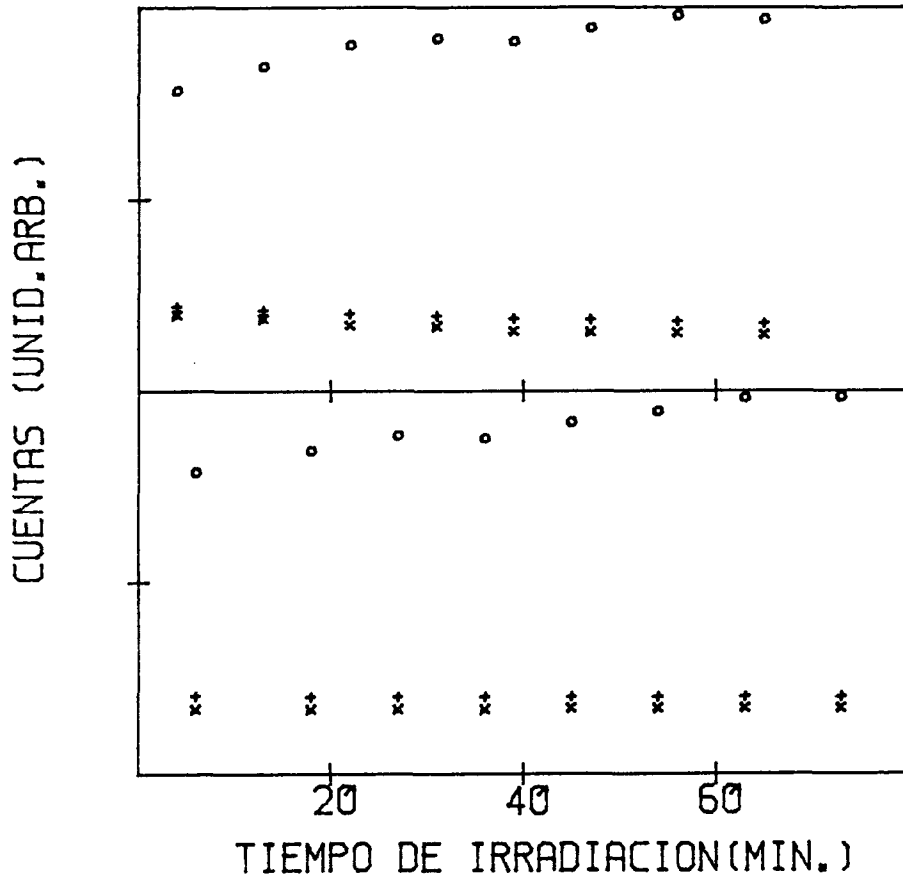


FIG.13: Variación de los contajes en función del tiempo de irradiación sufrido por láminas previamente irradiadas. Los símbolos empleados corresponden a los detallados en la fig.12.

Sin retirar el haz de iones se aumentó un orden de magnitud la presión en el equipo permitiendo el ingreso de oxígeno en la cámara. Los resultados corresponden a las figs.14 y 15. En la primera de éstas (fig.14) se observan cuatro zonas separadas por líneas verticales. La zona (a) fué medida con una presión de 4×10^{-6} Torr y a continuación se incrementó hasta un valor de 2×10^{-5} Torr (zona (b)) dejando entrar aire en el equipo.

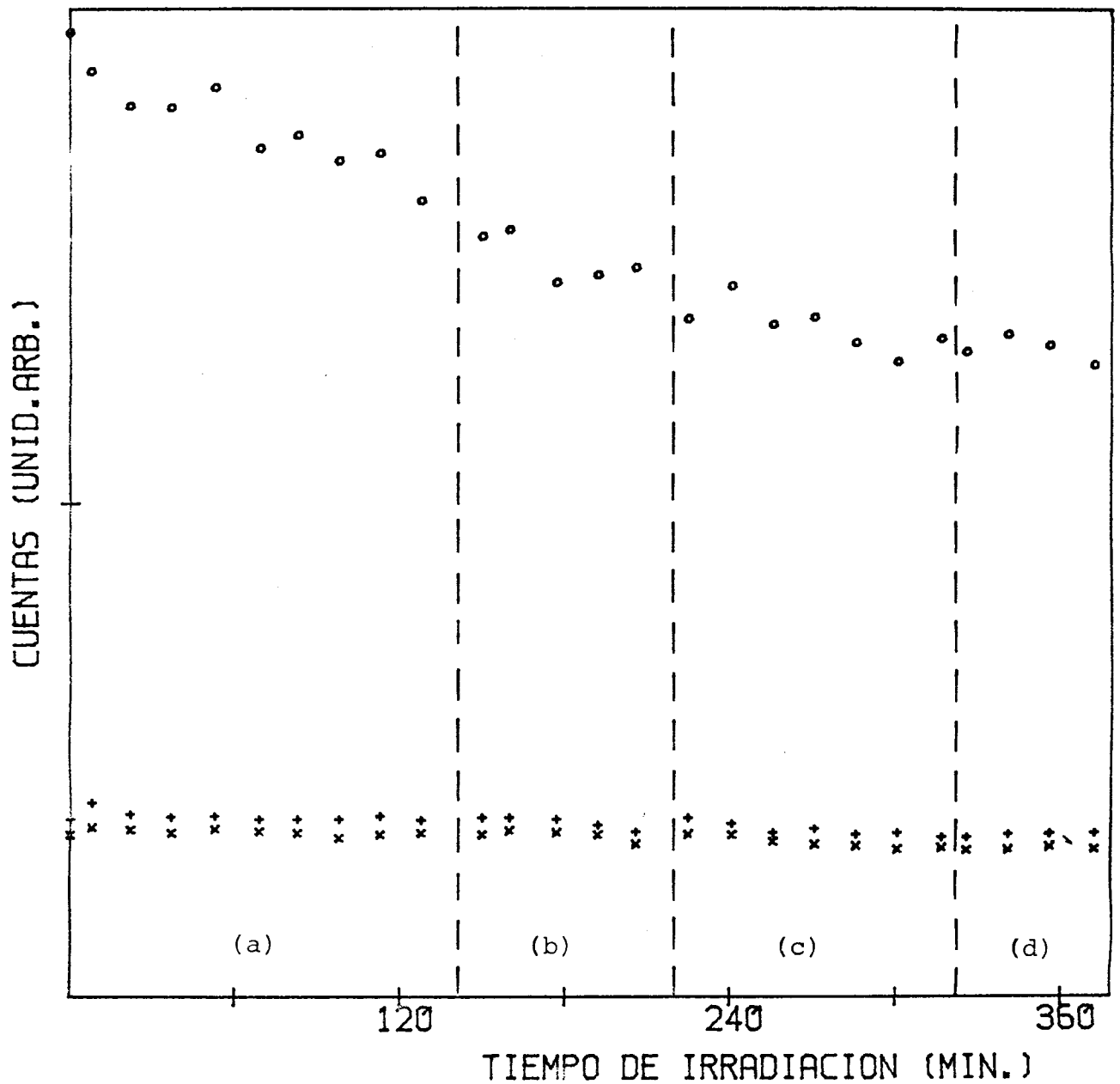


FIG.14: Idem fig.12 y 13, pero con diferentes presiones residuales en el equipo. Los detalles de cada zona pueden verse en el texto.

Luego se mantuvo la presión en 2×10^{-5} Torr, pero ahora permitiendo el ingreso de oxígeno (zona (c)). Finalmente se volvió a la presión inicial de 4×10^{-6} Torr tomando los puntos que se observan en la zona (d).

La fig.15 muestra los resultados obtenidos con una lámina diferente, donde la zona (a) corresponde a una presión de 4×10^{-6} T. y la zona (b) a una presión de 2×10^{-5} Torr de oxígeno.

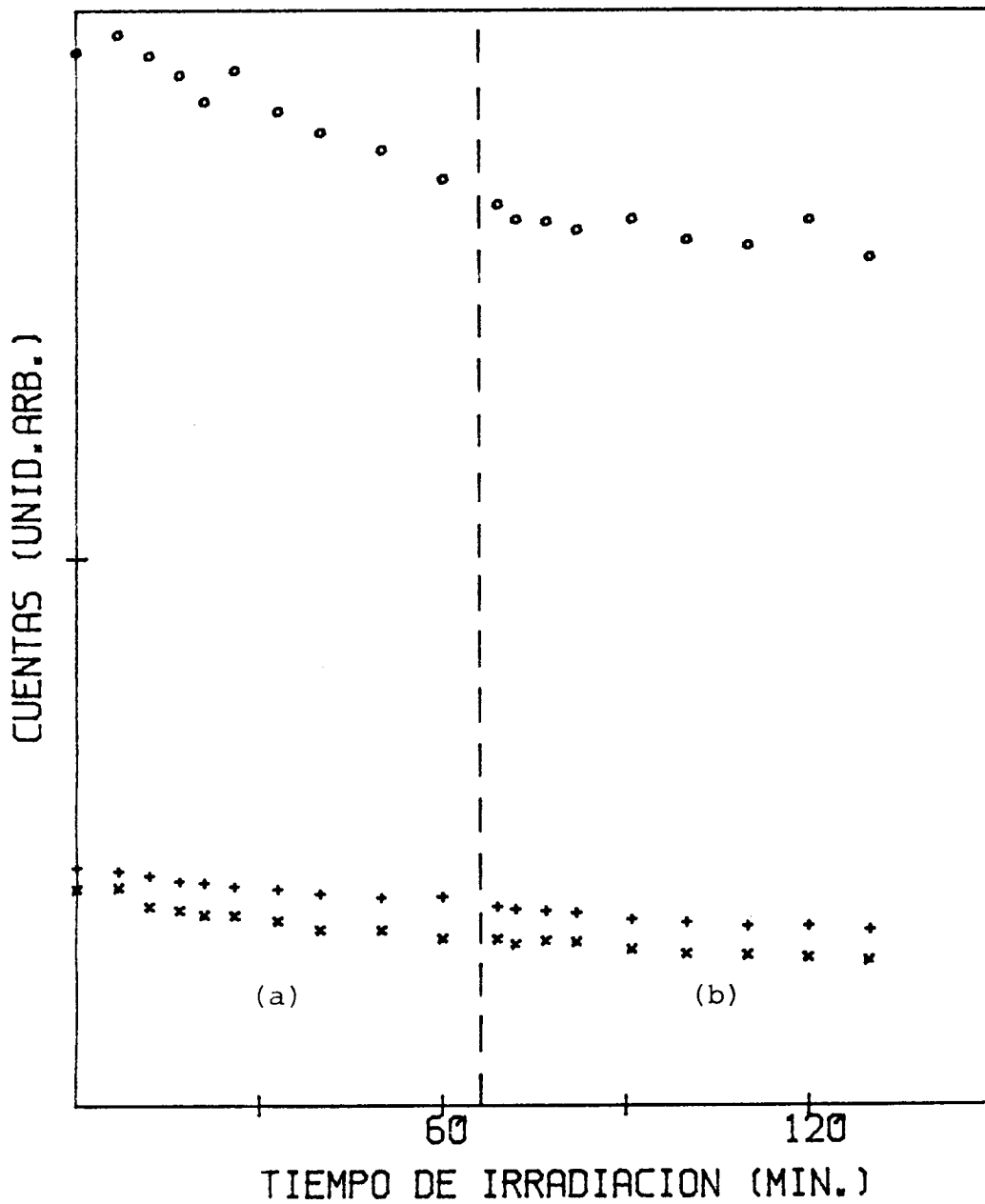


FIG.15: Idem fig.12 y 13 con diferentes presiones residuales. Las dos zonas se detallan en el texto.

Ambos gráficos (figs.14 y 15) presentan iguales características. El conteo en los picos disminuye en función del tiempo, manteniéndose constante el conteo en las colas de los espectros.

Por último se disminuyó un orden de magnitud la corriente incidente sobre las láminas ($\sim 1 \times 10^{-9}$ A) obteniendo los resultados de la fig.16. Vemos allí que se cumplen satisfactoriamente los requisitos de estabilidad buscados para los espectros de electrones convoy.

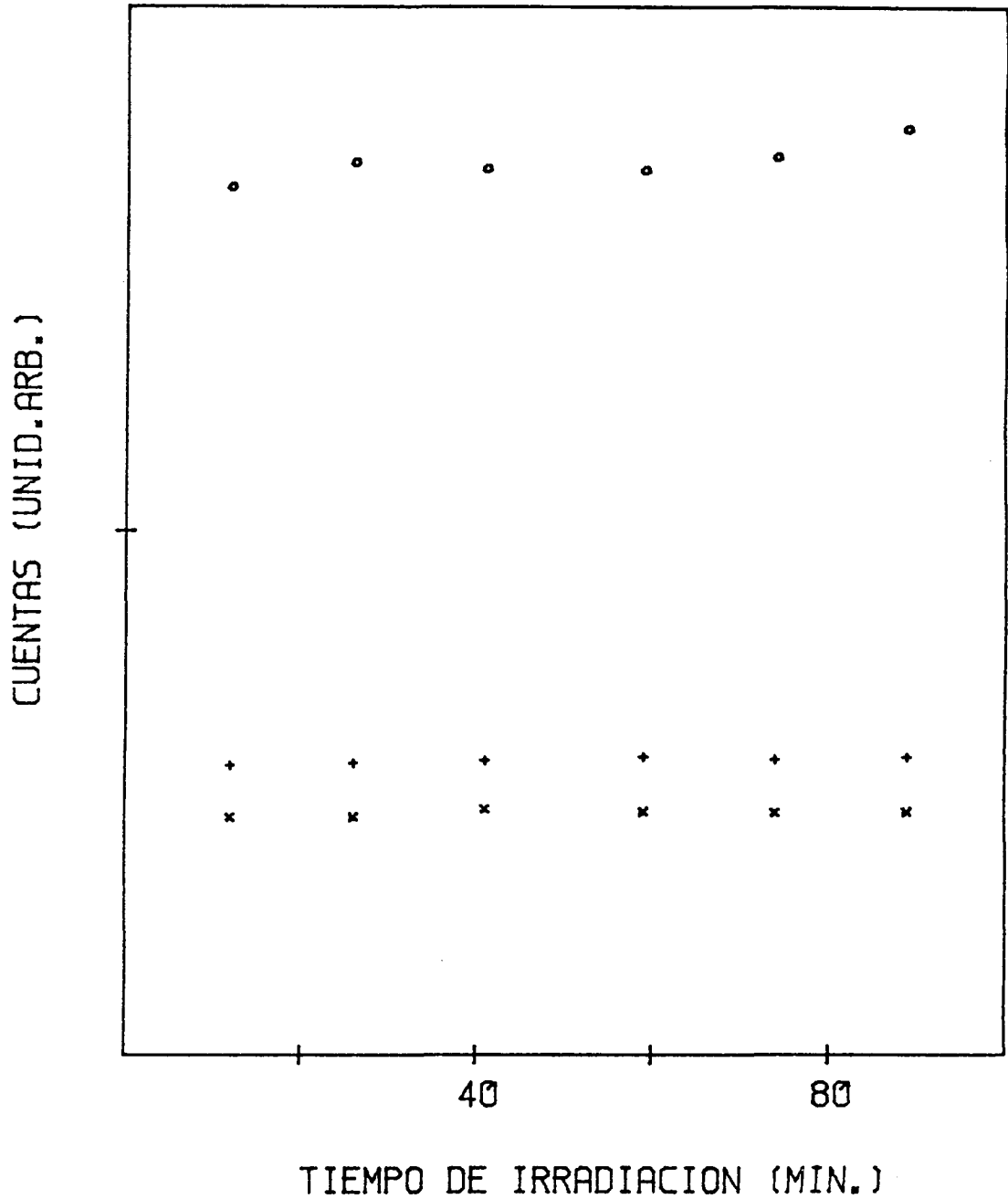


FIG.16: Variación de los contajes en tres zonas diferentes de los picos de electrones convoy, en función del tiempo de irradiación. Contaje en el pico(o), promedio de contajes en la zona de baja energía respecto del pico(x), ídem anterior pero en la zona de mayor energía que el pico(+). Corriente de haz 1×10^{-9} A.

El efecto logrado al disminuir la corriente de iones hizo pensar que las variaciones observadas anteriormente se debían principalmente a cambios en la estructura cristalográfica de la lámina y que la presencia de impurezas adsorbidas en la superficie modificaban solamente la pendiente con que variaban los contajes (figs.14 y 15).

A pesar de no poder obtener una presión final mejor que 1×10^{-6} Torr en la cámara de colisiones, dadas las condiciones experimentales, se intentó mejorar el vacío en las proximidades de la lámina. Con este fin se diseñó un soporte portablancos como muestra la fig.17. De esta forma las láminas se hallan rodeadas por una superficie fría a temperatura de aire líquido²³.

Con esta configuración se lograron dos efectos altamente positivos, a saber: una mejor presión final en la cámara ($\sim 6 \times 10^{-7}$ T) debido al trabajo como bomba de adsorción de todo el cuerpo del soporte y reproducibilidad en los espectros de electrones convoy tomados con corrientes de haz mayores que 1×10^{-9} A.

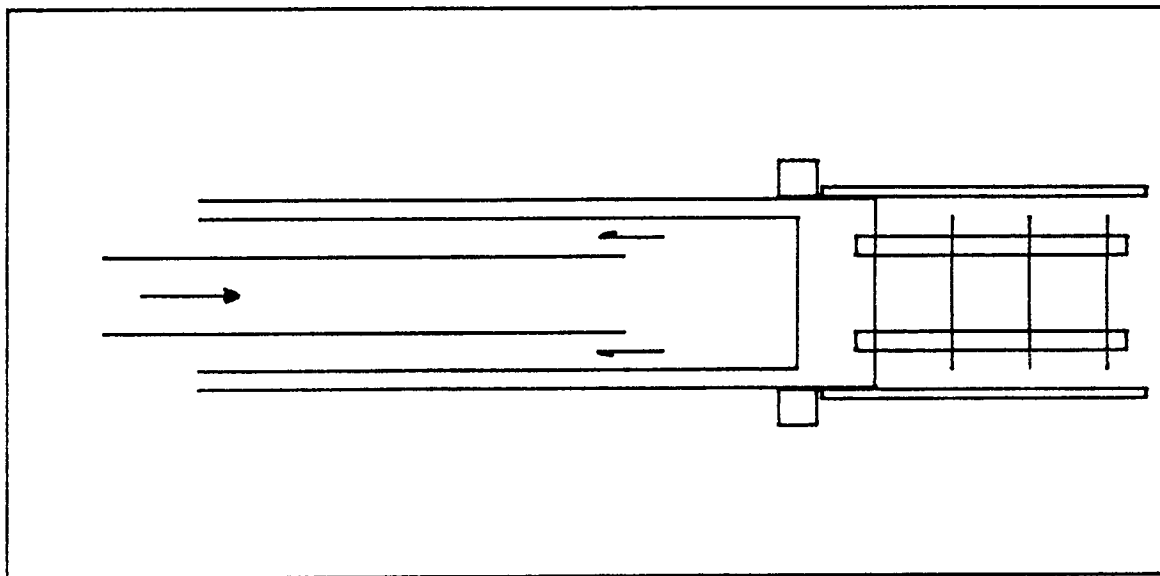


FIG.17: Soporte portablancos con refrigeración de aire líquido. Las flechas indican el sentido de circulación del refrigerante. Las láminas se ubican donde aparecen las tres rayas verticales equidistantes a la derecha del dibujo. Exteriormente a éstas se encuentra la camisa de cobre, la cual se halla en contacto térmico con el resto del cuerpo. Sobre la camisa se han practicado ranuras convenientemente ubicadas para permitir el pasaje del haz y de los electrones.

En todos los casos se observaron incrementos en la pérdida de energía (hasta un 20%) a medida que las láminas eran bombardeadas.

Un hecho interesante es que en ningún caso se observó una variación de la energía correspondiente a los electrones del pico, al menos dentro de la resolución experimental.

Las figs. 12 c), 14 y 15 muestran que la disminución del rendimiento de los picos no es acompañada por una disminución en la emisión secundaria (contajes en las colas de los espectros) dando indicios de orígenes disímiles para ambos procesos.

Una discusión más detallada de los resultados obtenidos en esta sección, requeriría una mayor cantidad de información no disponible hasta el presente y que, por otra parte, escapan a los fines de este trabajo.

Sin embargo, frente a lo sorpresivo de los resultados, cabe destacar que un estudio sistemático sobre el comportamiento de los espectros de electrones convoy en función de parámetros tales como estados de la superficie, estructura cristalográfica del blanco, etc. podría brindar interesante información sobre el origen de los electrones convoy producidos en blancos sólidos.

4.3 - EFECTO MOLECULAR

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos en la sección precedente se realizaron las mediciones correspondientes al efecto molecular empleando la sistemática que se describe a continuación.

En todos los casos se utilizaron corrientes de haz $\leq 5 \times 10^{-9}$ A, obteniendo contajes para los picos de electrones del orden de 5000 cuentas, lo cual representa una buena estadística.

La toma de un espectro demandaba de 3 a 5 minutos, retirando el haz de la lámina inmediatamente después de concluida la medición.

Como precaución adicional se trabajó de la siguiente forma. Se tomaba un espectro con proyectiles atómicos (H^+), a continuación se duplicaba la energía del acelerador para obtener el haz molecular (H_2^+) de igual velocidad que el atómico, procediendo a

tomar otro espectro de electrones convoy sin haber variado ningún otro parámetro experimental. Si la energía correspondiente al pico obtenido con H_2^+ incidente coincidía (± 1 canal) con aquella resultante de la incidencia de protones, se daba por cumplido el requisito de igual velocidad de los proyectiles. A continuación se volvía a tomar otro espectro con H^+ y sí éste reproducía el primero, dentro del error experimental, se consideraba válida la medición.

La fig.18 muestra una medición típica del efecto molecular. Mostramos sólo una de las dos mediciones realizadas con proyectiles atómicos, ya que las mismas coinciden satisfactoriamente en todo el rango de energías observado. También es destacable la coincidencia en las colas para ambos tipos de proyectiles (H^+, H_2^+)

El cociente entre espectros graficados en la parte inferior de la fig.18 muestra pequeñas diferencias cuando se utiliza uno u otro de los espectros obtenidos con proyectiles atómicos como divisor. Como ya mencionáramos anteriormente se realizó la integral de este pico cociente, normalizándola por el intervalo entre el cual se realizaba dicha integración. La diferencia entre ambos valores así calculados se empleó como cota de error para tal magnitud.

Cada medición tiene asociado un tiempo de permanencia del proyectil dentro del blanco según la relación entre espesor de la lámina y velocidad del proyectil.

El espesor de la lámina fué calculado por medio de la pérdida de energía sufrida por el haz, haciendo uso de los valores de frenamiento recopilados en las tablas de Ziegler²⁴.

La curva de la fig.11 brinda la relación entre el tiempo de permanencia t del proyectil molecular dentro del sólido y una separación media R entre ambos fragmentos de disociación a la salida de la lámina, teniendo en cuenta una explosión de tipo Coulombiano sin apantallamiento electrónico dentro del sólido.

Esta relación es biunívoca para cada valor de separación inicial R_0 ; pero las moléculas de H_2^+ provenientes de la fuente de iones pueden encontrarse en uno de los diecinueve estados vibracionales $\nu = 0, 1, \dots, 18$ con una probabilidad f_ν y una distancia

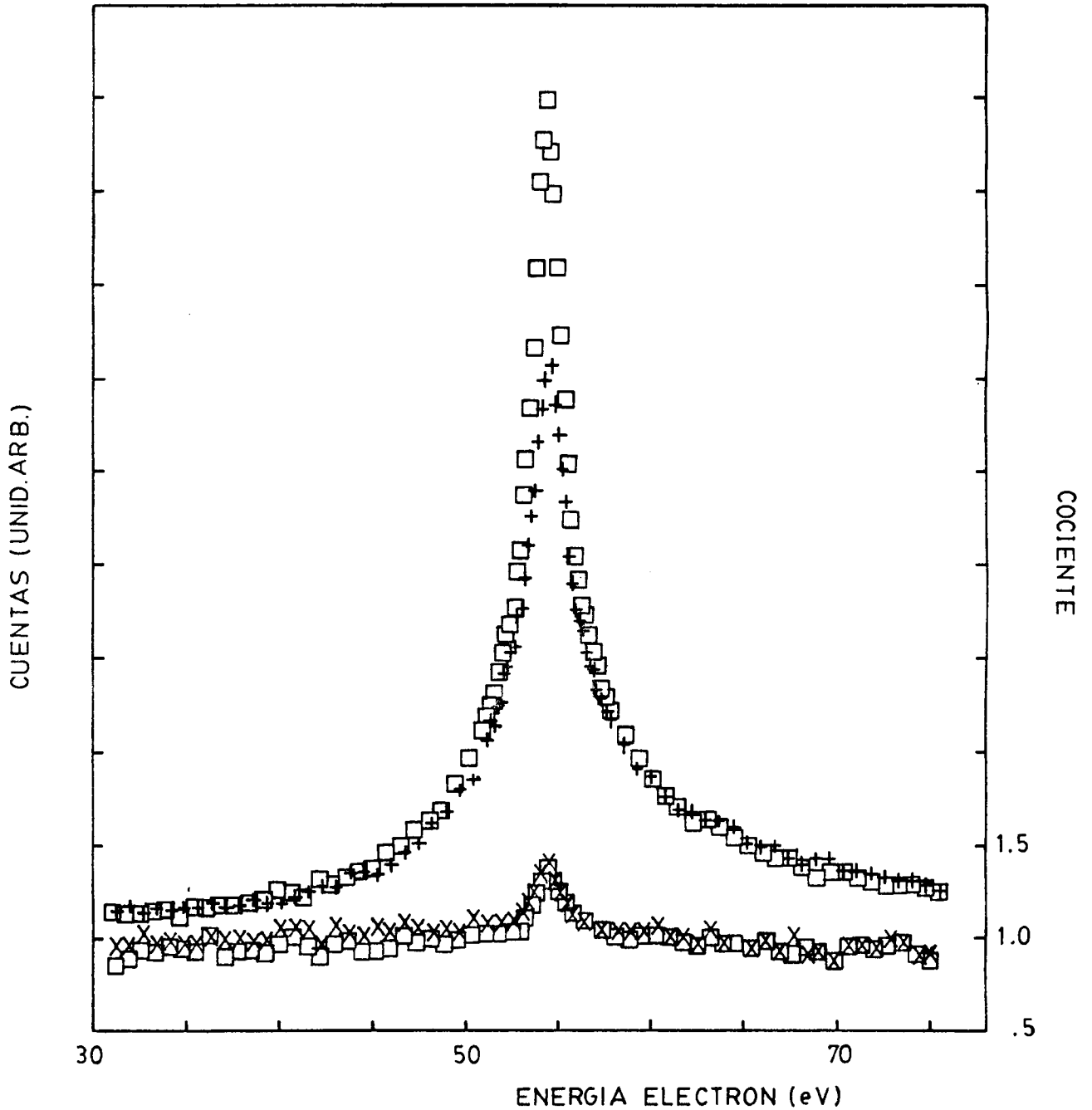


FIG.18: Espectros de electrones convoy tomados con H^+ (+), H_2^+ (□) para una energía de 100KeV/uma, incidentes sobre una lámina de carbono de $(5.5 \pm 0.4) \mu\text{g}/\text{cm}^2$ según mediciones de pérdida de energía. Se incluye sólo uno de los dos espectros tomados con H^+ por razones de claridad. En la parte inferior se observa el cociente entre espectros (H_2^+/H^+) para ambas mediciones con H^+ .

inicial $R_{0\nu}$, como muestra la fig.19¹⁰. Cada una de estas posibles separaciones iniciales proporciona una franja de valores de R para un dado tiempo de pasaje t , destruyendo así la relación bi-unívoca existente.

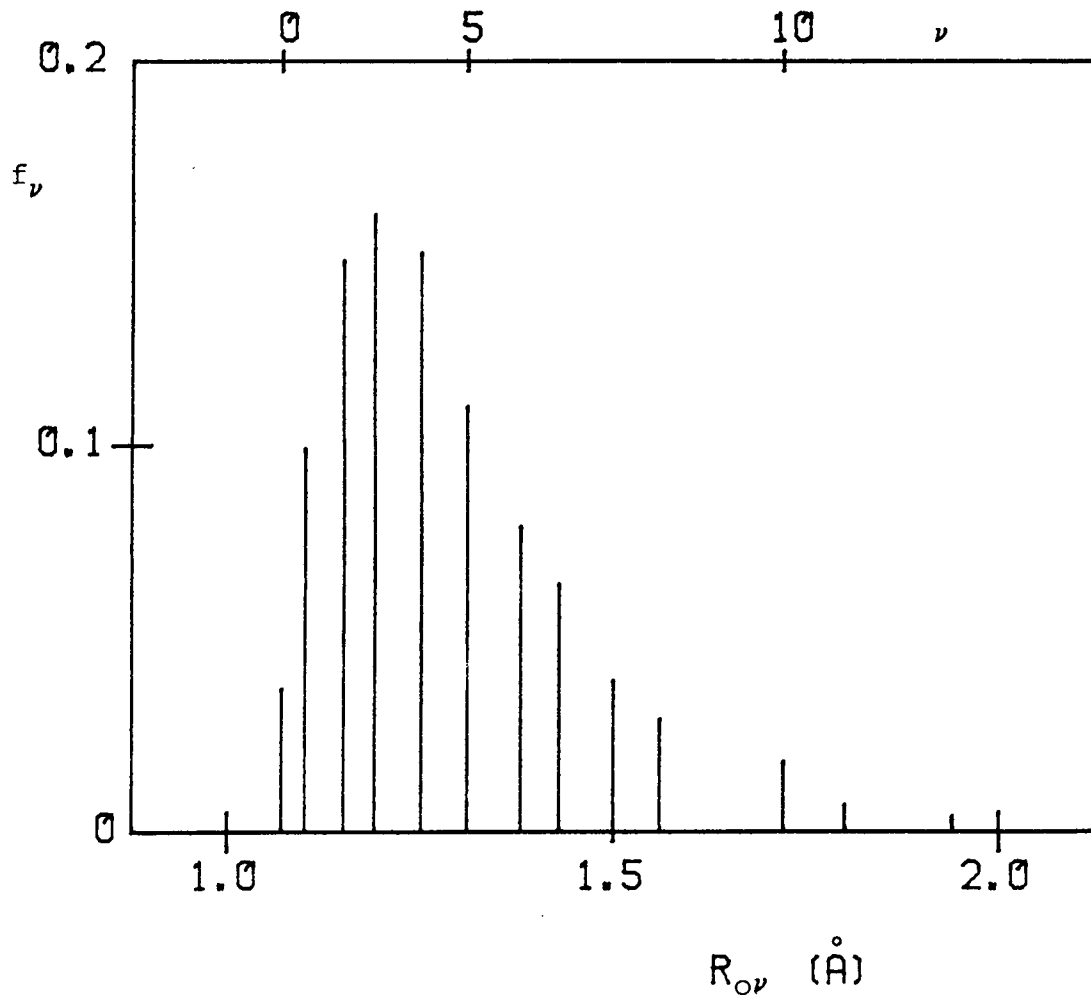


FIG.19: Probabilidad de ocupación de un estado vibracional ν para una separación $R_{0\nu}$ dada según ref.10.

Hemos tomado como cotas de error el mayor de los valores resultantes entre la incerteza experimental con la cual se obtiene el tiempo de pasaje y la indeterminación proveniente de las posibles separaciones iniciales.

Los valores obtenidos de ME (integral normalizada de los picos cociente) se encuentran graficados en la fig.20. Vemos que para valores de $R \leq 8\text{\AA}$ los puntos se agrupan aproximadamente bien y tienden a valores mayores de ME a medida que R disminuye. Para $R > 8\text{\AA}$ los valores de ME sufren dispersiones apreciables respecto de la unidad.

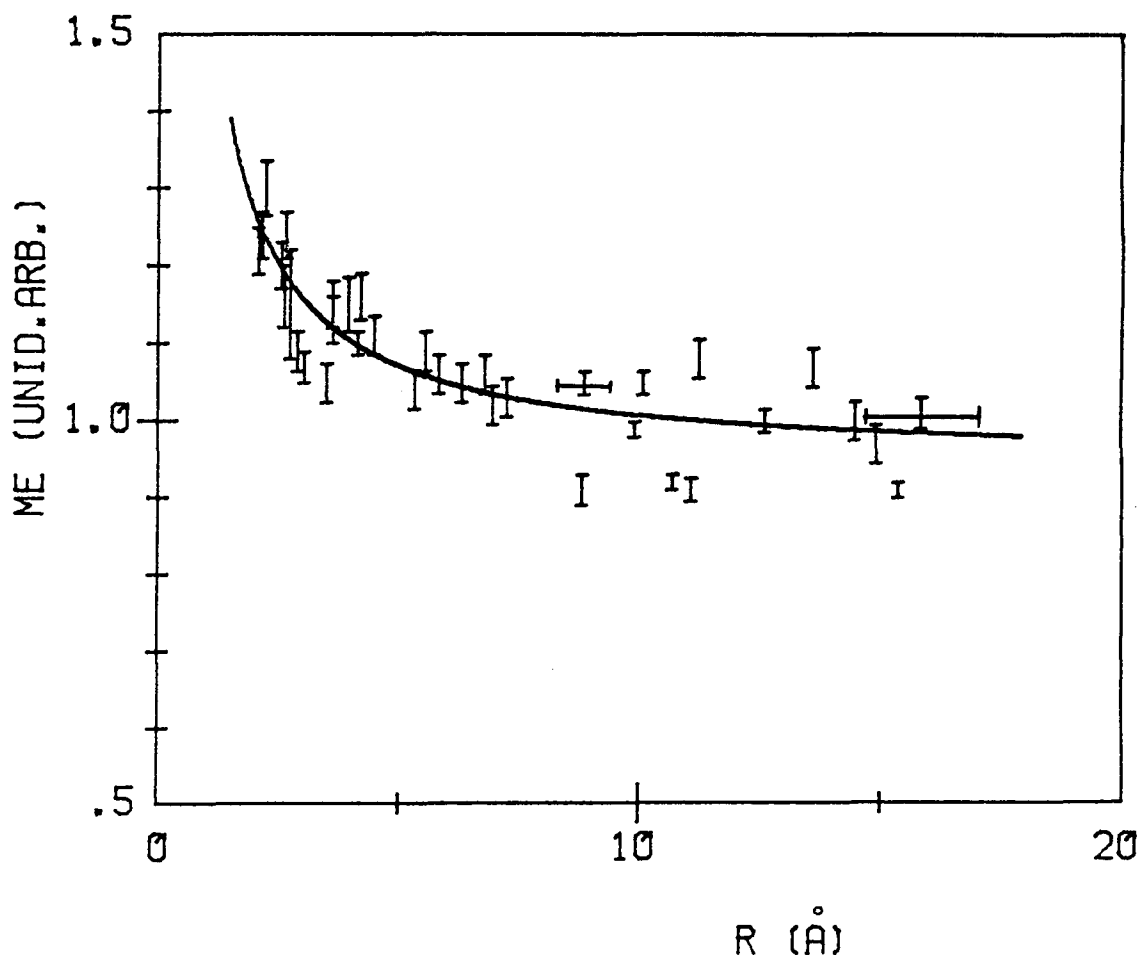


FIG.20: ME(integral normalizada de los picos cociente) vs. R(separación internuclear calculada según fig.11). Las barras de error verticales fueron obtenidas como se detalla en el texto al igual que las horizontales, de las cuales sólo se muestran dos por razones de claridad en el gráfico.

La curva trazada fué obtenida por cuadrados mínimos y es de la forma $ME = A+B/R^N$ donde los valores que hacen mínimo el error son: $A = 0.95 \pm 0.02$, $B = (0.68 \pm 0.06) \text{Å}$ y $N = 1.07 \pm 0.05$; por lo tanto

$$ME = 0.95 + 0.68/R^{1.07} \quad (4.2)$$

ecuación válida para valores de $R \geq 1 \text{Å}$.

Debemos tener presente que los valores de R obtenidos son el resultado de diferentes combinaciones de velocidad del proyectil y espesor del blanco. Hemos intentado graficar los valores de ME como función de R distinguiendo cada punto en base a la velocidad del proyectil y espesor de la lámina, no habiendo obtenido resultados que indiquen algún ordenamiento sistemático.

La dispersión que sufren los puntos de la fig.20 induce a pensar que los mismos no solo dependen de las condiciones del blanco sino también del estado del proyectil molecular.

De acuerdo con la fig.19, cada estado vibracional tiene una probabilidad f_v de encontrarse con una separación inicial R_{ov} . Pero tal distribución puede verse modificada por las condiciones experimentales dadas en la fuente de iones (intensidad de la radio frecuencia, tensiones de extracción y enfoque, presión del gas, etc.), favoreciendo ciertas separaciones iniciales con una probabilidad mayor. Este hecho podría ser el causante de la dispersión que se observa para valores pequeños de R ($\leq 8 \text{Å}$) dadas las diferentes (por no ser controlables) condiciones experimentales en cada medición.

La dispersión que se observa en los valores de ME para valores de $R > 8 \text{Å}$ puede deberse a otras causas, ya que las barras de error son bastante menores que las diferencias relativas entre dichos puntos.

Una posible explicación puede ser la siguiente. Llamemos β al ángulo formado entre el vector separación internuclear y la dirección correspondiente a v_i , velocidad del proyectil. Por razones de simetría basta con analizar dicho ángulo entre 0 y $\pi/2$.

Para aquellos fragmentos de disociación molecular que emergen de la lámina con valores de β relativamente pequeños ($\beta < 20^\circ$) puede ocurrir que la polarización electrónica del medio, ocasionada por el protón que viaja adelante, aumente o disminuya la capacidad del protón que viene en segundo término de producir electrones convoy, dependiendo muy sensiblemente del valor de R .

Estas fluctuaciones (aumento ó disminución) en el rendimiento estarían reflejando las oscilaciones de la densidad electrónica a través del preciso instante en que el segundo proyectil se encuentra en la zona distorsionada por el protón que lo precede.

Fluctuaciones de esta posible naturaleza también se observan cuando graficamos el cociente en el pico como función de la separación media entre los protones emergentes de la lámina como muestra la fig.21

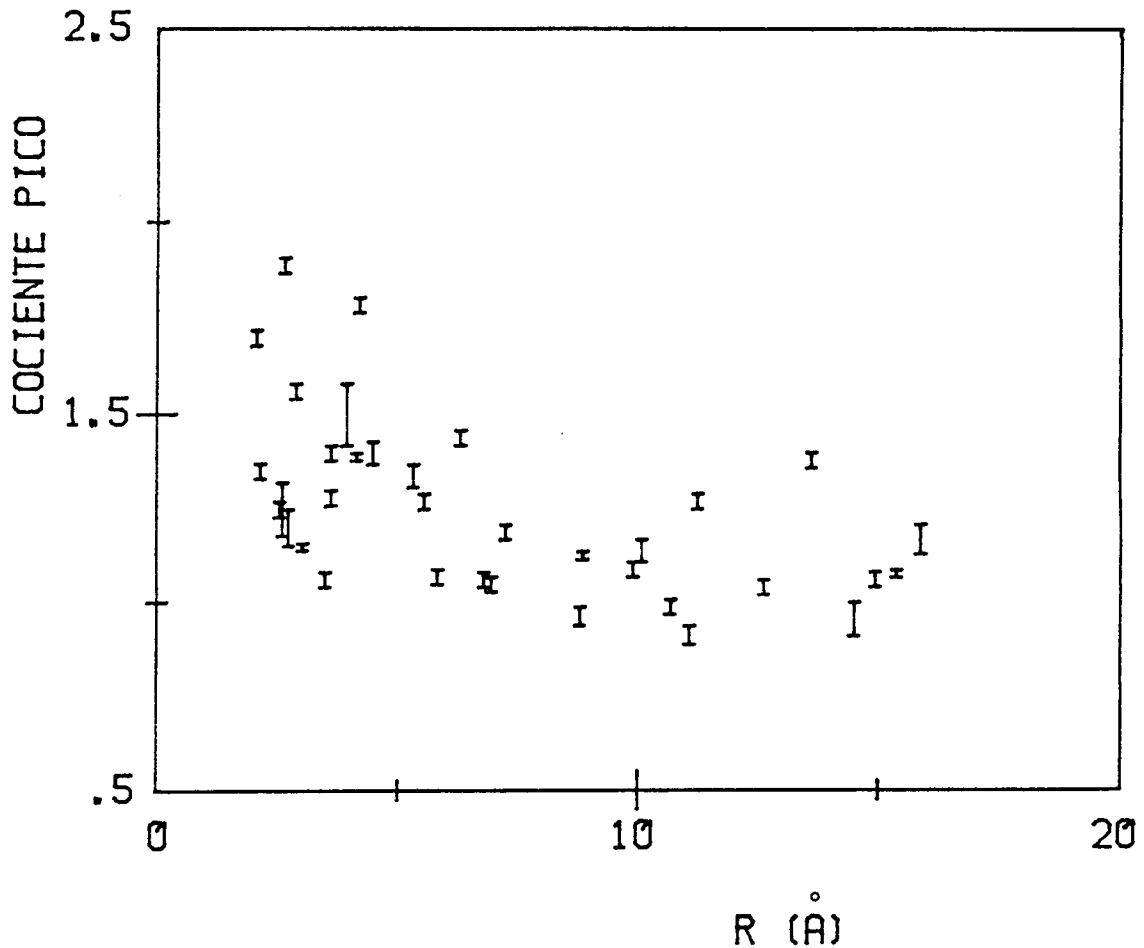


FIG.21: Cociente en el canal del pico vs. R . Las barras de error se obtuvieron en igual forma que las de la fig.20

5 - DISCUSION DE RESULTADOS EXPERIMENTALES

La coincidencia de los espectros de electrones convoy en la zona de las colas, cuando se comparan aquellos obtenidos con proyectiles atómicos y moleculares (fig.18), muestra que la emisión de electrones secundarios no es afectada por mecanismos de correlación entre los fragmentos de disociación molecular. Por otra parte, las diferencias observadas en la zona próxima al pico indican la diferente naturaleza del mecanismo de producción de electrones convoy respecto del de emisión secundaria.

Teniendo en cuenta la ecuación (10) de la ref.13, la sección eficaz de captura al continuo, doblemente diferencial, para un proyectil molecular con una separación internuclear R y un electrón con momento relativo \vec{k}_1 en el sistema del proyectil, puede expresarse como

$$\Sigma_{i, \vec{k}_1} (2H^+, \vec{R}) = 2 \Sigma_{i, \vec{k}_1} (H^+) \left| \bar{\Psi}_{\vec{k}_1} (R/2, R) / f_c (Z/\kappa_1) \right|^2 \quad (5.1)$$

donde $\Sigma_{i, \vec{k}_1} (H^+)$ es la sección eficaz de captura para un protón. $\bar{\Psi}_{\vec{k}_1} (R/2, R)$ es la función de onda molecular de un electrón del continuo con impulso \vec{k}_1 , evaluada sobre uno de los protones y promediada sobre las posibles orientaciones de \vec{R} y $f_c (Z/\kappa_1)$ es el factor de Coulomb donde Z es la carga del proyectil.

El término $|\bar{\Psi}_{\vec{k}_1} / f_c|^2$ puede interpretarse como un factor de correlación, el cual influye sobre la distribución de electrones Σ .

Veamos ahora el efecto de este factor de correlación sobre los espectros de electrones convoy.

La longitud de onda asociada a un electrón, en un orbital atómico del continuo, es asintóticamente $2\pi/\kappa_1$; en las proximidades de los núcleos dicha longitud de onda será menor debido a la presencia del potencial atractivo. Si varias de estas longitudes de onda se hallan contenidas en la distancia internuclear R , podemos esperar que la función de onda del electrón alrededor de cada protón no sea mayormente influenciada por la presencia del otro protón y cerca de los núcleos puede aproximarse por los orbitales atómicos centrados en ellos.

Por lo tanto el factor de correlación es igual a uno y se cumple la condición de que la sección eficaz para un proyectil compuesto de dos protones no correlacionados es el doble de la correspondiente a un protón solo. Este hecho se refleja en las mediciones, ya que en nuestro caso la coincidencia en las colas se debe al sistema de normalización de los espectros por cantidad de carga colectada en la copa de Faraday. Cabe destacar que nuestro sistema experimental no registra las pequeñas diferencias en las fracciones de carga para H^+ y H_2^+ incidentes en láminas de carbono, reportadas por Meggitt et al²⁵.

Veamos que sucede cuando R no es grande comparado con la longitud de onda asociada al electrón.

Próxima a los protones esta longitud de onda es del orden de π/Z , así para $R \ll \pi/Z$ el electrón "ve" una carga unificada de valor $2Z$ y $\bar{\Psi}_{\kappa_1}(R/2, R) \approx f_c(2Z/\kappa_1)$. Por lo tanto, en la zona próxima al pico de la distribución de electrones, es decir para $\kappa_1 \ll Z$, el factor de correlación es

$$|\bar{\Psi}_{\kappa_1}(R/2, R)/f_c(Z/\kappa_1)|^2 \approx 2$$

para $R \ll \pi/Z$.

De esta forma vemos que el cociente entre las distribuciones de electrones convoy obtenidas con $2H^+$ y H^+ respectivamente, se encuentra limitado entre 1 y 2.

A mayores separaciones internucleares R , menor es el incremento observado entre ambos tipos de espectros como vimos en la fig.20.

Para un valor de R fijo (por ej. ver fig.9) se observa que a medida que κ_1 crece, es decir alejándose de la zona del pico, la longitud de onda decrece y alcanzamos la región donde el electrón puede tomarse en un orbital atómico alrededor de cada protón; siendo el factor de correlación igual a uno. Esta región se alcanza para valores menores de κ_1 cuando se incrementa R (por ej. ver fig.10).

Vemos así que con argumentos físicos muy simples podemos explicar en forma cualitativa las diferencias observadas en las

distribuciones de electrones convoy. Pero no debemos olvidar que la deducción de la ecuación (10) de Ponce et al¹³ se basa en suponer la captura de un electrón ligado a un átomo blanco en una colisión única, sin tener en cuenta ningún otro electrón activo durante la colisión.

En un blanco sólido la situación es diferente. No podemos hablar de una colisión única como en el caso del blanco gaseoso. El proyectil sufre pérdidas de energía sucesivas por interacción con los electrones del medio (al menos para estas energías el frenamiento electrónico es el factor predominante). La carga efectiva del proyectil sufre alteraciones debido a efectos de apantallamiento ocasionado por los electrones. Ocurre una transición brusca en el medio que rodea al proyectil cuando emerge através de la superficie de la lámina.

Otra diferencia básica entre blancos gaseosos y sólidos es la capacidad de estos últimos de interacción colectiva con la consiguiente influencia sobre el otro fragmento de disociación molecular aún a distancias relativamente grandes de separación internuclear. Este hecho estaría reflejado en las fluctuaciones que se observan para $R > 8\text{Å}$ en la fig.20 .

6 - MODELO TEORICO

Numerosos autores han tratado el problema de transferencia de electrones a estados del continuo en diferentes aproximaciones^{4,5,6}. En todas ellas el origen del pico se debe al factor de normalización del orbital del continuo, conocido como el factor de Coulomb, el cual diverge cuando la velocidad relativa entre el electrón y el proyectil tiende a cero.

Hasta el presente se han tratado diversas combinaciones de proyectiles (simple y múltiplemente cargados) y blancos (diferentes estados iniciales); dependiendo de las aproximaciones usadas, el rango de velocidades de validez de cada una de ellas. En todos los casos se emplearon proyectiles atómicos.

En este trabajo presentamos los resultados obtenidos del cálculo de la sección eficaz doble diferencial en segunda aproximación de Born para la captura de un electrón en un estado inicial $1s$ a un estado del continuo de un proyectil molecular.

Tanto la primera como la segunda aproximación de Born han sido ampliamente utilizada para este tipo de cálculo. Dado que la originalidad del trabajo reside en el empleo de proyectiles moleculares, nos ocuparemos en primer término de las funciones de onda del continuo de un electrón en el campo de dos centros.

6.1 - FUNCIONES DE ONDA DEL CONTINUO

Bates et al²⁶ realizaron los primeros cálculos para la molécula H_2^+ en relación con el problema de fotoionización del ión molecular.

La dispersión de electrones por dos centros de cargas $Z_a \neq Z_b$ fué tratada por Shimizu²⁷, como así también el problema de fotoionización de la molécula de hidrógeno.

Ponomarev y Somov²⁸, en un trabajo más reciente, brindan un algoritmo para el cálculo computacional de las funciones de onda del continuo de un electrón en el campo de dos centros. Rankin y Thorson²⁹ presentan una alternativa al método de Ponomarev et al²⁸ con considerables ventajas en tiempo de computación.

Gracias a la gentileza de Rankin y Thorson²⁹ hemos obtenido una copia del programa FORTRAN IV, el cual adaptamos convenientemente a nuestras necesidades.

Las funciones de onda del continuo Ψ para el problema de un electrón en el campo de dos centros, de cargas positivas Z_a y Z_b separados por una distancia R , se definen como las soluciones de la ecuación de Schrodinger

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b}\right) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, R) = E_{\vec{k}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, R) \quad (6.1)$$

donde r_a , r_b son las coordenadas del electrón relativas a Z_a , Z_b respectivamente, como puede verse en la fig.22 . Salvo indicaciones en contrario haremos uso de unidades atómicas a lo largo de este desarrollo.

$E_{\vec{k}}$ es la energía (en Rydbergs) del electrón en un estado con momento \vec{k} , por lo tanto $E_{\vec{k}} = k^2$.

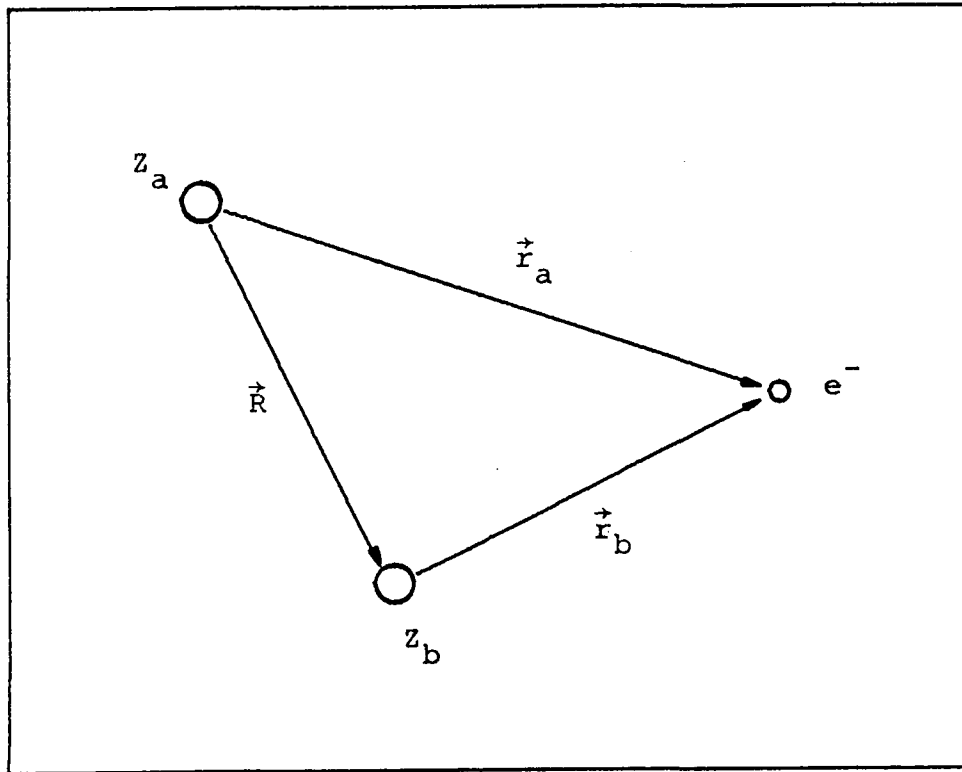


FIG.22: Coordenadas relativas para un sistema compuesto por dos centros de cargas Z_a, Z_b separados por una distancia R , y un electrón.

La solución $\Psi(\vec{r}, R)$ puede separarse en coordenadas elípticas (ξ, η, ϕ) ($1 \leq \xi < \infty$; $-1 \leq \eta \leq 1$; $0 \leq \phi \leq 2\pi$) y la podemos escribir

$$\Psi = (2\pi)^{-1/2} N(k, R) X(\xi) S(\eta) e^{im\phi} \quad (6.2)$$

donde $N(k, R)$ es el factor de normalización y las coordenadas elípticas se obtienen según las relaciones

$$\xi = (r_a + r_b)/R, \quad \eta = (r_a - r_b)/R, \quad \phi$$

Por analogía con las funciones de Coulomb $F_\ell(\gamma, kr)$ para el problema de un solo centro³⁰ llamamos funciones de Coulomb elípticas radial y angular a $X(\xi)$ y $S(\eta)$, respectivamente; las que se definen como soluciones regulares de las ecuaciones

$$d/d\xi [(\xi^2 - 1)dX/d\xi] + [q\xi + c^2\xi^2 - m^2/(\xi^2 - 1) - A]X = 0 \quad (6.3)$$

$$d/d\eta [(1 - \eta^2)dS/d\eta] + [p\eta - c^2\eta^2 - m^2/(1 - \eta^2) + A]S = 0 \quad (6.4)$$

donde los parámetros p , q y c^2 se definen

$$p = R(Z_b - Z_a), \quad q = R(Z_a + Z_b), \quad c^2 = ER^2/4$$

mientras que A y m son constantes de separación.

Para el límite de átomo unido ($R \rightarrow 0$), la ecuación (6.4) tiende a la ecuación para las funciones asociadas de Legendre $P_L^{|m|}(\eta)$ con $A = L(L+1)$ y la ecuación (6.3) se comporta como la ecuación radial para la función esférica de Coulomb³¹.

El factor de normalización $N(k, R)$ se obtiene mediante la condición

$$\int d\vec{r} \Psi_k^*(\vec{r}, R) \Psi_{k'}(\vec{r}, R) = \int d\tau \Psi_k^*(\xi, \eta, \phi; R) \Psi_{k'}(\xi, \eta, \phi; R) = \delta(k - k') \quad (6.6)$$

donde

$$\int d\tau = (R^3/8) \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta \int_0^{2\pi} d\phi (\xi^2 - \eta^2) \quad (6.7)$$

6.1.1 - SOLUCION DE LA ECUACION ANGULAR

Las soluciones de (6.4) deben ser regulares en el intervalo $-1 \leq \eta \leq 1$. Por analogía con la ecuación para $E < 0$ se elige²⁹ el siguiente desarrollo

$$S(\eta) = \sum_{\ell=|m|}^{\infty} d_{\ell} P_{\ell}^{|m|}(\eta) \quad (6.8)$$

el cual da origen a la relación recursiva

$$\begin{aligned} & c^2 [(\ell - |m|)(\ell - |m| - 1) / (2\ell - 3)(2\ell - 1)] d_{\ell-2} - p [(\ell - |m|) / (2\ell - 1)] d_{\ell-1} \\ & + \{[\ell(\ell + 1) - A] + c^2 [2\ell(\ell + 1) - 2m^2 - 1] / (2\ell - 1)(2\ell + 3)\} d_{\ell} \\ & - p [(\ell + |m| + 1) / (2\ell + 3)] d_{\ell+1} \\ & + c^2 [(\ell + |m| + 2)(\ell + |m| + 1) / (2\ell + 5)(2\ell + 3)] d_{\ell+2} = 0 \end{aligned} \quad (6.9)$$

Los coeficientes d_{ℓ} se normalizan de forma tal que

$$\int_{-1}^1 S^2(\eta) d\eta = 1 \quad (6.10)$$

6.1.2 - SOLUCION DE LA ECUACION RADIAL

La solución de la ecuación (6.3) tiene la forma asintótica³²

$$X(\xi) = (B/r) \sin[kr + (q/2c) \ln(kr) + \delta] \quad (6.11)$$

donde r es la distancia al electrón desde el centro geométrico, B es la constante de normalización y δ es el corrimiento de fase.

Proponiendo una solución del tipo

$$X(\xi) = [(\xi - 1) / (\xi + 1)]^{|m|/2} F(\xi) \quad (6.12)$$

vemos que $F(\xi)$ satisface la ecuación diferencial

$$(\xi^2 - 1)F''(\xi) + 2(|m| + \xi)F'(\xi) + [c^2\xi^2 + q\xi - A]F(\xi) = 0 \quad (6.13)$$

La solución $F(\xi)$ se genera de la siguiente forma. Para $1 \leq \xi \leq 2$, $F(\xi)$ se desarrolla en serie de Taylor tomando como variable $(\xi - 1)$, obteniendo una fórmula recursiva de cuatro términos para los coeficientes. Luego se continúa ($\xi > 2$) por integración numérica

de (6.13) por el método predictor-corrector de paso variable debido a Adams-Moulton-Bashfort³³ hasta un valor de ξ apropiado, de forma tal que la solución pueda empalmarse con la forma asintótica (6.11).

La forma asintótica de las soluciones para la ecuación (6.13) puede escribirse

$$F^{\pm}(\xi) = (\xi+1)^{-1} e^{\pm i[c\xi + (q/2c)\ln(\xi+1)]} u^{\pm}(\xi) \quad (6.14)$$

y tomando

$$u^{\pm}(\xi) = \sum_n b_n^{\pm} [2/c(\xi+1)]^n \quad (6.15)$$

los coeficientes b_n^{\pm} satisfacen la relación

$$\begin{aligned} & c[n(n+|m|) - (q/4c^2) \mp i(q/2c)(2n+|m|)] b_{n-1}^{\pm} \\ & - \{n(n+1) - (q^2/4c^2) + q + c^2 - A \mp i[(q/2c)(2n+1) - 2c(2n+|m|+1)]\} b_n^{\pm} \\ & \mp 4i(n+1)b_{n+1}^{\pm} = 0 \end{aligned} \quad (6.16)$$

con $b_{-1}^{\pm} = 0$, $b_0^{\pm} = 1$.

El corrimiento de fase δ se determina haciendo

$$F(\xi) = D[e^{i\alpha} F^+(\xi) + e^{-i\alpha} F^-(\xi)] \quad (6.17)$$

$$F'(\xi) = D[e^{i\alpha} F^{+'}(\xi) + e^{-i\alpha} F^{-'}(\xi)]$$

y obteniendo α .

Trabajando con las ecuaciones (6.14) y (6.17) obtenemos

$$X(\xi) \sim [\Upsilon/(\xi+1)] \sin[c\xi + (q/2c)\ln(c(\xi+1)) + \delta] \quad (6.18)$$

donde

$$\delta = \alpha - (q/2c)\ln(c) + \pi/2 \quad (6.19)$$

El requisito de normalización de las funciones de onda (6.6) en la escala de energías (Rydbergs) requiere³²

$$\Upsilon = 2/R(\pi k)^{1/2} \quad (6.20)$$

Nos hemos limitado a la descripción dada en la ref.29, inclusive usamos la misma notación, por una cuestión de simplicidad en el manejo del programa de cálculo. Una descripción detallada del problema puede verse en el trabajo de Ponomarev et al²⁸.

6.2 - SECCION EFICAZ DE CAPTURA EN PRIMERA APROXIMACION DE BORN

Queremos describir el proceso de captura de un electrón a un estado del continuo de un proyectil molecular para velocidades de la colisión relativamente altas ($v \sim 10-20$ u.a.).

Suponemos un electrón en un estado inicial (1s) ligado a un blanco hidrogenoide y un proyectil molecular (dos protones separados por una distancia \vec{R}) que viaja con una velocidad v . La fig.23 muestra el sistema de coordenadas,

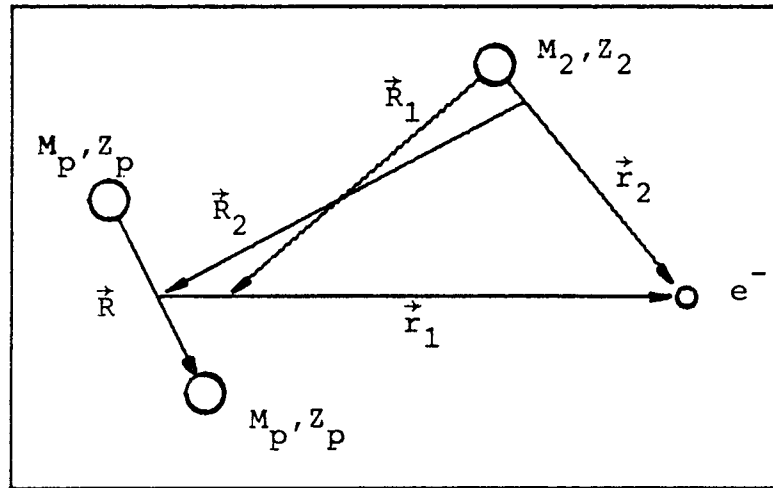


FIG.23: Sistema de coordenadas para la colisión $2H^+ + H(1s)$.

donde M_p, Z_p es la masa y carga de cada uno de los protones ($M_p=1, Z_p=1$); M_2, Z_2 es la masa y carga del núcleo blanco. Las coordenadas \vec{r}_1, \vec{r}_2 corresponden a la posición del electrón en el sistema del proyectil o del blanco respectivamente; mientras que \vec{R}_1 es el vector posición del sistema P+P+e respecto de Z_2 y \vec{R}_2 el correspondiente al sistema P+P respecto del blanco (Z_2+e).

Las relaciones entre sistemas de coordenadas y masas reducidas son:

$$M_1 = 2M_p, \quad \mu_i = M_i / (M_i + 1), \quad \nu_i = M_i (M_j + 1) / (M_i + M_j + 1) \quad \begin{matrix} i=1,2 \\ i \neq j=1,2 \end{matrix} \quad (6.21)$$

$$\begin{aligned} \text{y} \quad \vec{r}_2 &= \vec{R}_1 + \mu_1 \vec{r}_1 \\ \vec{R}_2 &= \mu_2 \vec{R}_1 + (\mu_1 \mu_2 - 1) \vec{r}_1 \\ \text{ó} & \end{aligned} \quad (6.22)$$

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \mu_2 \vec{r}_2 - \vec{R}_2 \\ \vec{R}_1 &= \mu_1 \vec{R}_2 + (1 - \mu_1 \mu_2) \vec{r}_1 \end{aligned}$$

y también

$$\vec{R}_2 = \mu_2 \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \quad \vec{R}_1 = \vec{r}_2 - \mu_1 \vec{r}_1$$

Los potenciales de interacción son

$$V_1(r_1) = - \frac{Z_p}{|\vec{r}_1 - \vec{R}/2|} - \frac{Z_p}{|\vec{r}_1 + \vec{R}/2|}, \quad V_2(r_2) = -Z_2/r_2 \quad (6.23)$$

Las funciones de onda del electrón, inicial y final las tomamos

$$\Psi_{1s}(r_2) = (Z_2^3/\pi)^{1/2} e^{-Z_2 r_2}, \quad \Psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1, \vec{R}) \quad (6.24)$$

mientras que los estados inicial y final del sistema son

$$\begin{aligned} \chi_i &= e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{R}_2} \Psi_{1s}(r_2) \\ \chi_f &= e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{R}_1} \Psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1, \vec{R}) \end{aligned} \quad (6.25)$$

donde vemos que el electrón ha sido capturado desde un estado inicial ls a un estado del continuo del proyectil con momento relativo \vec{k}_1 .

\vec{K}_i y \vec{K}_f^1 son los momentos iniciales y finales para el movimiento relativo en los canales inicial y final.

Las relaciones entre los momentos asintóticos en los canales directo y de intercambio se pueden obtener fácilmente por medio de mecánica clásica³⁴

$$\vec{K}_i = \nu_2 \left. \frac{d\vec{R}_2}{dt} \right|_{t=-\infty} \equiv \nu_2 \nu$$

$$\vec{K}_f^p = \nu_p \left. \frac{d\vec{R}_p}{dt} \right|_{t=\infty} \quad (6.26)$$

$$\vec{k}_p = \mu_p \left. \frac{d\vec{r}_p}{dt} \right|_{t=\infty} \quad p=1,2$$

y usando las relaciones (6.21), (6.22) y (6.26) el momento transferido por el proyectil $\vec{P} = \vec{k}_i - \vec{k}_f^2$ lo podemos escribir en términos de los momentos correspondientes al canal de transferencia de carga

$$\begin{aligned}\vec{P} = \vec{k}_i - \vec{k}_f^2 &= \vec{k}_i - \nu_2 [\mu_2 \dot{\vec{R}}_1 + (\mu_1 \mu_2 - 1) \dot{\vec{r}}_1] = \\ &= \vec{k}_i - \nu_2 \mu_2 \vec{k}_f^1 / \nu_1 + \nu_2 (1 - \mu_1 \mu_2) \vec{k}_1 / \mu_1\end{aligned}$$

y teniendo en cuenta que

$$\nu_2 \mu_2 / \nu_1 = \mu_1 \quad , \quad \nu_2 (1 - \mu_1 \mu_2) = \mu_1$$

resulta

$$\vec{P} = \vec{k}_i - \mu_1 \vec{k}_f^1 + \vec{k}_1 \quad (6.27)$$

Para definir el estado final con tres partículas libres elegimos \vec{P} y

$$\vec{K} = \vec{k}_2 - \mu_2 \vec{P} = -\mu_2 \vec{k}_i + \vec{k}_f^1 \quad (6.28)$$

de forma tal que la matriz de transición en primer orden de la aproximación de Born queda expresada como

$$\begin{aligned}T_{if}^1 &= \langle \chi_f | V_1 | \chi_i \rangle \\ &= -z_p \int d\vec{R}_2 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_i \cdot \vec{R}_2 - \vec{k}_f^1 \cdot \vec{R}_1)} \Psi_{\vec{k}_1}^* (\vec{r}_1, \vec{R}) \times \\ &\quad \times \left[\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{R}/2|} + \frac{1}{|\vec{r}_1 + \vec{R}/2|} \right] \Psi_{1s}(r_2)\end{aligned}$$

y usando las relaciones (6.22) expresamos T_{if}^1 en términos de las coordenadas \vec{r}_1, \vec{r}_2

$$\begin{aligned}T_{if}^1 &= -z_p \int d\vec{r}_2 e^{i(\mu_2 \vec{k}_i - \vec{k}_f^1) \cdot \vec{r}_2} \Psi_{1s}(r_2) \times \\ &\quad \times \int d\vec{r}_1 e^{-i(\vec{k}_i - \mu_1 \vec{k}_f^1) \cdot \vec{r}_1} \left[\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{R}/2|} + \frac{1}{|\vec{r}_1 + \vec{R}/2|} \right] \Psi_{\vec{k}_1}^* (\vec{r}_1, \vec{R})\end{aligned} \quad (6.29)$$

La primera de las integrales en (6.29) es la transformada de Fourier del estado inicial $\Psi_{1s}(r_2)$,

$$\Psi_{1s}(\vec{k}_f^1 - \mu_2 \vec{k}_i) = \int d\vec{r}_2 e^{-i(\vec{k}_f^1 - \mu_2 \vec{k}_i) \cdot \vec{r}_2} \Psi_{1s}(r_2) \quad (6.30)$$

Reemplazando (6.30) en (6.29) y teniendo en cuenta (6.27) y (6.28) resulta

$$T_{if}^1 = -Z_p \Psi_{1s}(\vec{k}) \int d\vec{r}_1 e^{-i(\vec{P} - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_1} \left[\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{R}/2|} + \frac{1}{|\vec{r}_1 + \vec{R}/2|} \right] \Psi_{k_1}^*(\vec{r}_1, \vec{R}) \quad (6.31)$$

Vamos a escribir el elemento de matriz (6.31) en la forma más similar posible al elemento de matriz para un proyectil atómico

$$T_{if}^1 = -Z_p \Psi_{1s}(\vec{k}) \left[e^{-i(\vec{P} - \vec{k}_1) \cdot \vec{R}/2} \int d\vec{x} \frac{e^{-i(\vec{P} - \vec{k}_1) \cdot \vec{x}}}{x} \Psi_{k_1}^*(\vec{x} + \vec{R}/2, \vec{R}) + e^{i(\vec{P} - \vec{k}_1) \cdot \vec{R}/2} \int d\vec{x} \frac{e^{-i(\vec{P} - \vec{k}_1) \cdot \vec{x}}}{x} \Psi_{k_1}^*(\vec{x} - \vec{R}/2, \vec{R}) \right] \quad (6.32)$$

El problema ahora se reduce al cálculo de integrales del tipo

$$I = \int d\vec{x} \frac{e^{-i(\vec{P} - \vec{k}_1) \cdot \vec{x}}}{x} \Psi_{k_1}^*(\vec{x} \pm \vec{R}/2, \vec{R}) \quad (6.33)$$

donde $|\vec{P} - \vec{k}_1| \approx v$ es grande. Cambiamos la variable de integración llamando

$$\frac{\vec{P} - \vec{k}_1}{|\vec{P} - \vec{k}_1|} = \vec{n}, \quad |\vec{P} - \vec{k}_1| \vec{x} = \vec{y}, \quad |\vec{n}| = 1$$

de modo tal que (6.33) queda

$$I = |\vec{P} - \vec{k}_1|^{-2} \int d\vec{y} \frac{e^{-i\vec{n} \cdot \vec{y}}}{y} \Psi_{k_1}^* \left(\frac{\vec{y}}{|\vec{P} - \vec{k}_1|} \pm \frac{\vec{R}}{2}, \vec{R} \right)$$

Vemos que el valor de I queda determinado por el valor de la función de onda próximo a $\vec{r}_1 = \pm \vec{R}/2$ como mostramos desarrollando $\Psi_{k_1}^*$ alrededor de este punto.

$$\begin{aligned}
I = & |\vec{P}-\vec{k}_1|^{-2} \int d\vec{y} \frac{e^{-i\vec{P}\vec{y}}}{y} [\Psi_{\vec{k}_1}^* (\pm\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) + \vec{v}_{r_1} \Psi_{\vec{k}_1}^* (\vec{r}_1, \vec{R})] |_{\vec{r}_1=\pm\frac{\vec{R}}{2}} \frac{\vec{y}}{|\vec{P}-\vec{k}_1|} + \\
& + \sum_{i,j} \frac{\delta}{\delta r_{1i}} \frac{\delta}{\delta r_{1j}} \Psi_{\vec{k}_1}^* (\vec{r}_1, \vec{R}) |_{\vec{r}_1=\pm\frac{\vec{R}}{2}} \frac{y_i y_j}{|\vec{P}-\vec{k}_1|^2} + \dots] \quad (6.34)
\end{aligned}$$

El término más importante de la expansión (6.34) es

$$I = |\vec{P}-\vec{k}_1|^{-2} \Psi_{\vec{k}_1}^* (\pm\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) 4\pi \quad (6.35)$$

teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned}
\int d\vec{y} \frac{e^{-i\vec{P}\vec{y}}}{y} &= 2\pi \int_0^\infty dy 2\sin(y) = 4\pi \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dy \sin(y) e^{-\epsilon y} = \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} 4\pi \frac{1}{1+\epsilon^2} = 4\pi
\end{aligned}$$

Por lo tanto el término principal en el desarrollo de T_{if}^1 en potencias de v es de la forma :

$$T_{if}^1 = -\frac{4\pi z_p}{|\vec{P}-\vec{k}_1|^2} \Psi_{1s}(\vec{R}) [e^{-i(\vec{P}-\vec{k}_1)\frac{\vec{R}}{2}} \Psi_{\vec{k}_1}^* (\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) + e^{i(\vec{P}-\vec{k}_1)\frac{\vec{R}}{2}} \Psi_{\vec{k}_1}^* (-\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R})] \quad (6.36)$$

La sección eficaz doble diferencial, definida por unidad de volumen en el espacio de momentos \vec{k}_2 del electrón transferido es

$$\Sigma_1^2 = \int d\Omega_2 \Sigma_1^3 \quad (6.37)$$

donde

$$\Sigma_1^3 = (v_2/2\pi)^2 (K_f^2/K_i) |T_{if}^1|^2 \quad (6.38)$$

y $d\Omega_2$ es el diferencial de ángulo sólido correspondiente a la dirección de dispersión final del proyectil³⁵.

El Apéndice 1 muestra el desarrollo de $d\Omega_2$ en términos de la transferencia de impulso \vec{P} de modo tal que

$$d\Omega = (1/K_i^2) P_t dP_t d\psi \quad (6.39)$$

según la descomposición de \vec{P} en \vec{P}_1 , \vec{P}_t como muestra la fig.24.

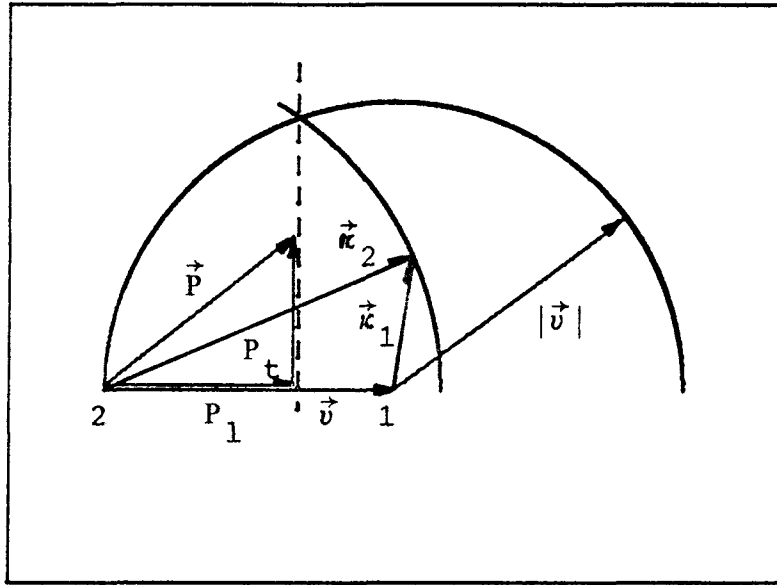


FIG.24: Relaciones cinemáticas entre las velocidades y momentos involucrados en la colisión. Para el caso de captura al continuo $\kappa_1 \sim 0$, $\kappa_2 \sim v$ y $P_1 = v/2$.

De esta forma (6.37) puede escribirse

$$\begin{aligned} \Sigma_1^2 &= (\nu_2/2\pi)^2 (\kappa_f^2/\kappa_i^3) \int dP_t P_t \int d\psi |T_{if}^1|^2 \\ &= (1/2\pi\nu)^2 \int dP_t P_t \int d\psi |T_{if}^1|^2 \end{aligned} \quad (6.40)$$

Antes de reemplazar (6.36) en (6.40) para obtener Σ_1^2 vamos a hacer una simplificación en los términos que aparecen en (6.36).

Teniendo en cuenta (6.4) vemos que para un valor de A existe un desarrollo $S(\eta)$ según (6.8). Podemos tomar cada una de estas series e identificarlas según su valor de L (recordemos que para $R \rightarrow 0$, $A = L(L+1)$). Dado que (6.8) expresa la solución angular en serie de los polinomios de Legendre tendremos que

$$S(\eta=-1) = (-1)^L S(\eta=1) \quad (6.41)$$

por lo tanto podemos expresar $\Psi_{\kappa_1}(\vec{R}, \vec{R})$ en términos de E_k y L como

$$\Psi_{E_k, L}(\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) = (-1)^L \Psi_{E_k, L}(-\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) \quad (6.42)$$

la cual surge como consecuencia de la paridad de cada estado a través de su dependencia con los polinomios de Legendre.

De esta forma a (6.36) la escribimos como

$$T_{if}^1 = - \frac{4\pi Z_p}{|\vec{P}-\vec{\kappa}_1|^2} \Psi_{1s}(\vec{K}) \Psi_{E_k, L}(\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) [e^{-i(\vec{P}-\vec{\kappa}_1)\frac{\vec{R}}{2}} + (-1)^L e^{i(\vec{P}-\vec{\kappa}_1)\frac{\vec{R}}{2}}] \quad (6.43)$$

Sólo nos resta expresar la transferencia de impulso \vec{P} según sus componentes P_1 , P_t como muestra la fig.25. El producto escalar $\vec{P} \cdot \vec{R}$ tiene la forma

$$\vec{P} \cdot \vec{R} = R \cdot P_{10} = R(P_1 \cos(\beta) + P_t \sin(\beta) \sin(\psi)) \quad (6.44)$$

$$\text{con } |\vec{P}|^2 = P_1^2 + P_t^2 \quad \text{y} \quad \vec{v} \cdot \vec{P} = v P_1 \quad .$$

Para procesos de captura al continuo la componente de la transferencia de impulso según la dirección de \vec{v} (P_1) puede tomarse³⁶

$$P_1 = v/2 \quad (6.45)$$

Reemplazando (6.43) en (6.40) obtenemos

$$\Sigma_1^2 = \frac{2^{10} \pi^2}{v^2} |\Psi_{E_k, L}(\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R})|^2 \int_0^\infty dP_t \frac{P_t (1+(-1)^L \cos(RP_1 \cos(\beta))) J_0(RP_t \sin(\beta))}{(P_1^2 + P_t^2)^2 (1+P_1^2 + P_t^2)^4} \quad (6.46)$$

donde hemos reemplazado³⁴ $\tilde{\Psi}_{1s}(K) = 8Z_2^2 (\pi Z_2)^{1/2} / (Z_2^2 + K^2)^2$.

El Apéndice 2 muestra el desarrollo del término entre paréntesis de (6.43) y su integración en el ángulo ψ .

En (6.46) hemos hecho la aproximación $\kappa_1 \ll P$ la cual es válida para captura al continuo en la zona donde $\kappa_1 \rightarrow 0$ y velocidades de colisión altas, $v \gg 1$.

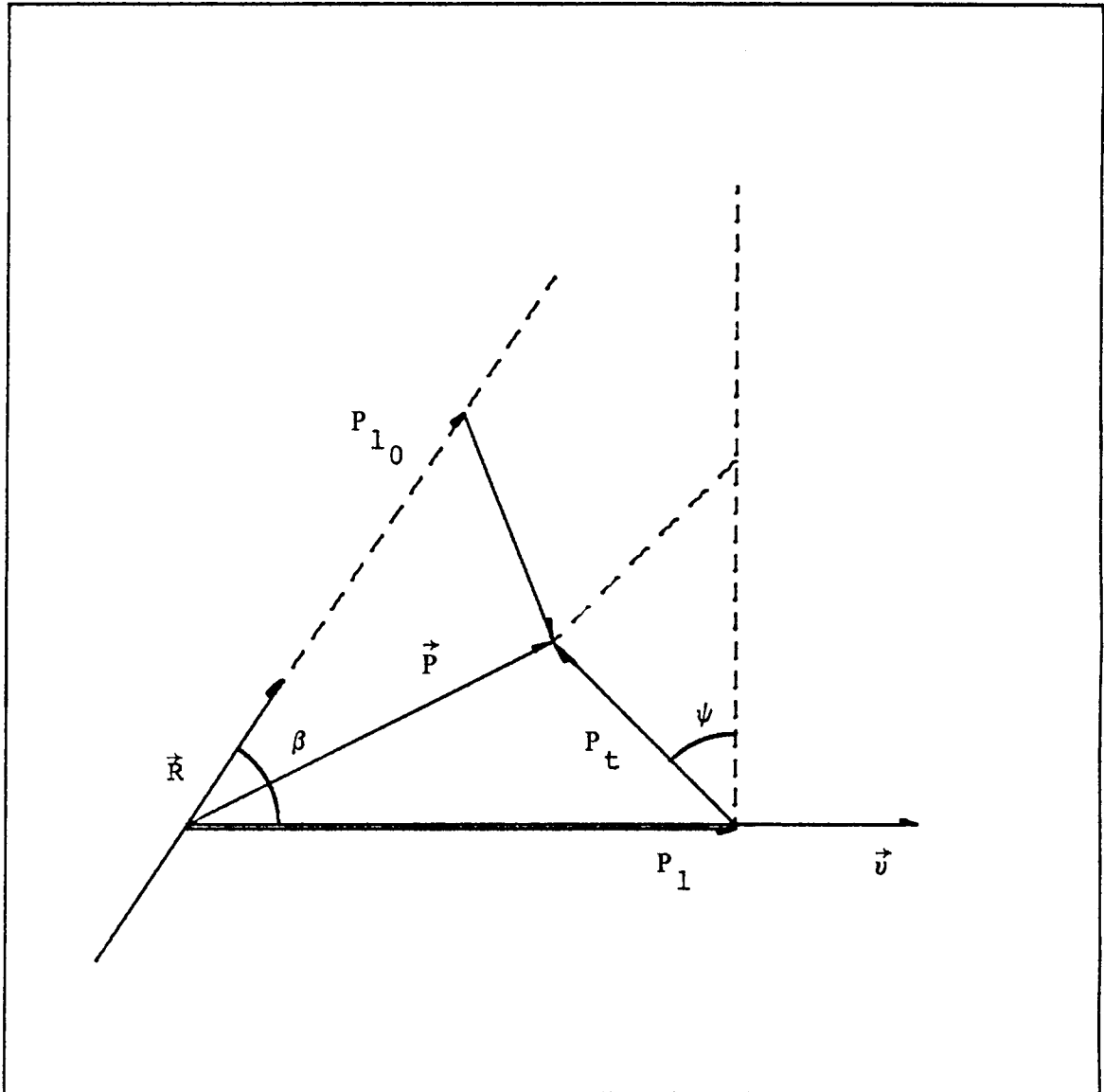


FIG.25: Relaciones entre coordenadas involucradas en la colisión. El vector separación internuclear \vec{R} define un plano junto el vector velocidad \vec{v} y entre ambos forman un ángulo β . Descomponemos la transferencia de impulso \vec{P} según P_{\perp} y P_{\parallel} . Esta última define el ángulo ψ con la normal a \vec{v} comprendida en el plano antes mencionado.

La sección eficaz así calculada depende de los parámetros R , E_k , L y β . Por lo tanto para un dado juego de valores R , β y E_k debemos sumar la contribución para cada valor de L y de esta forma obtener la Σ_1^2 de captura.

6.3 - SECCION EFICAZ DE CAPTURA EN SEGUNDA APROXIMACION DE BORN

La matriz de transición es ahora de la forma

$$T_{if}^2 = \langle \chi_f | V_2 G_0^+ V_1 | \chi_i \rangle \quad (6.47)$$

donde V_1 y V_2 se encuentran definidos en (6.23) y G_0^+ es el propagador de partículas libres del desarrollo en términos del operador de Green, es decir

$$G_0^+ = (E + i\gamma - H_0)^{-1} \quad (6.48)$$

$$\text{donde } H_0 = -\frac{1}{2\nu_p} \nabla_{R_p}^2 - \frac{1}{2\mu_p} \nabla_{r_p}^2, \quad p=1,2$$

En ambas aproximaciones (T_{if}^1 , T_{if}^2) no hemos considerado los potenciales internucleares pues ha sido demostrado que su contribución es despreciable en el primer orden de un desarrollo en v .

Para el desarrollo de T_{if}^2 vamos a pasar al espacio de momentos, definiendo la transformada de Fourier como

$$\tilde{\Psi}(\vec{k}) = \int d\vec{r} \Psi(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (6.49)$$

obteniendo así

$$T_{if}^2 = (2\pi)^{-6} \int d\vec{k} d\vec{k}' \tilde{\Psi}_{k_1}^* (\vec{k} - \vec{k}_1) \tilde{V}_2 (\vec{k} - \vec{k}') \tilde{V}_1 (\vec{P} - \vec{k}) \tilde{\Psi}_{1s} (\vec{k}') G_0^+ (\vec{k}, \vec{k}') \quad (6.50)$$

donde

$$G_0^+ = \left[-\frac{P^2}{2} + \vec{v}\vec{P} + \epsilon_{1s} + i\gamma + (\mu_2 \vec{P} - \vec{v}) \vec{k} - \vec{P}\vec{k}' - \frac{1}{2\mu_2} (\vec{k}' - \mu_2 \vec{k})^2 + O\left(\frac{v^2}{2}\right) \right]^{-1} \quad (6.51)$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_1(\vec{P}-\vec{k}) &= \int d\vec{r} e^{-i(\vec{P}-\vec{k})\vec{r}} \left[-\frac{z_p}{|\vec{r}-\vec{R}/2|} - \frac{z_p}{|\vec{r}+\vec{R}/2|} \right] \\ &= -z_p \left[e^{-i(\vec{P}-\vec{k})\vec{R}/2} + e^{i(\vec{P}-\vec{k})\vec{R}/2} \right] \frac{4\pi}{|\vec{P}-\vec{k}|^2} \end{aligned} \quad (6.52)$$

$$\tilde{V}_2(\vec{k}-\vec{k}') = -\frac{4\pi z_2}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2} \quad (6.53)$$

Las transformadas de Fourier $\tilde{\Psi}_{1s}$, $\tilde{\Psi}_{k_1}$ correspondientes a autofunciones en un potencial Coulombiano,¹ se encuentran centradas en $k=0$ y decrecen más rápidamente que los potenciales \tilde{V} ; más precisamente, su decrecimiento es de la forma k^{-4} para estados s .

La dependencia en \vec{k} de T_{if}^2 está dada por:

$$\int d\vec{k} \tilde{\Psi}_{k_1}^*(\vec{k}-\vec{k}_1) \tilde{V}_1(\vec{P}-\vec{k}) G_0^+(\vec{k}, \vec{k}') \quad (6.54)$$

Tomando el término principal de un desarrollo en v , la integral en \vec{k} (6.54) se reduce a

$$-4\pi z_p G_0^+(0, \vec{k}') \int d\vec{k} \tilde{\Psi}_{k_1}(\vec{k}-\vec{k}_1) \left[e^{-i(\vec{P}-\vec{k})\vec{R}/2} + e^{i(\vec{P}-\vec{k})\vec{R}/2} \right] \frac{1}{|\vec{P}-\vec{k}|^2} \quad (6.55)$$

Dado que la función $\tilde{\Psi}_{k_1}$ tiene valores apreciables en un rango pequeño de valores de \vec{k} , donde $|\vec{P}-\vec{k}|^{-2}$ es casi constante, reemplazamos $\tilde{\Psi}_{k_1}$ por una función delta multiplicada por un factor que representa el área sombreada de la fig.26.

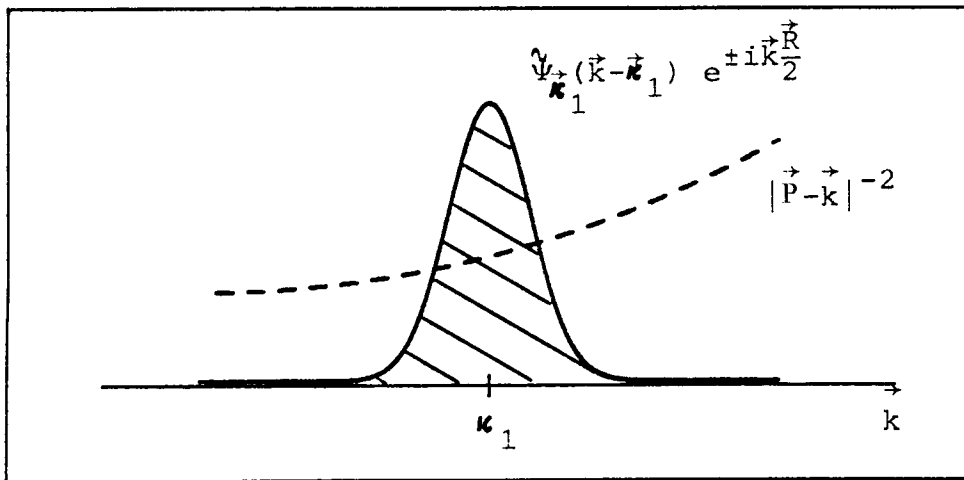


FIG.26: Representación simbólica de $\tilde{\Psi}_{k_1}(\vec{k}-\vec{k}_1)$ en función de \vec{k} , mostrada aquí como función de una variable unidimensional.

Por lo tanto tenemos

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi}_{\vec{k}_1}^* (\vec{k}-\vec{k}_1) e^{\pm i\vec{k}\frac{\vec{R}}{2}} &\approx \delta(\vec{k}-\vec{k}_1) \int d\vec{k} \tilde{\Psi}_{\vec{k}_1}^* (\vec{k}-\vec{k}_1) e^{\pm i\vec{k}\frac{\vec{R}}{2}} = \\
&= \delta(\vec{k}-\vec{k}_1) \int d\vec{k} e^{\pm i\vec{k}\frac{\vec{R}}{2}} \int d\vec{r} \Psi_{\vec{k}_1}^* (\vec{r}, \vec{R}) e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}} = \\
&= \delta(\vec{k}-\vec{k}_1) \int d\vec{r} \Psi_{\vec{k}_1}^* (\vec{r}, \vec{R}) e^{i\vec{k}_1\vec{r}} \int d\vec{k} e^{-i\vec{k}(\vec{r}+\frac{\vec{R}}{2})} = \\
&= (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}_1) \Psi_{\vec{k}_1}^* (\pm\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) e^{\pm i\vec{k}\frac{\vec{R}}{2}} \quad (6.56)
\end{aligned}$$

El mismo procedimiento puede emplearse para la integral en \vec{k}' , obteniendo así la siguiente aproximación:

$$\tilde{\Psi}_{1s}(\vec{k}') \approx (2\pi)^3 \delta(\vec{k}') \Psi_{1s}(0) \quad (6.57)$$

Finalmente, reemplazando las aproximaciones desarrolladas en (6.50), podemos expresar la T_{if}^2 como

$$\begin{aligned}
T_{if}^2 &= \frac{(4\pi)^2 Z_p Z_2}{|\vec{P}-\vec{k}_1|^2 K^2} \Psi_{1s}(0) \left[\Psi_{\vec{k}_1}^* (\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) e^{-i(\vec{P}-\vec{k}_1)\frac{\vec{R}}{2}} + \Psi_{\vec{k}_1}^* (-\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R}) e^{i(\vec{P}-\vec{k}_1)\frac{\vec{R}}{2}} \right] \times \\
&\times \left[-\frac{P^2}{2} + \vec{v}\vec{P} + \epsilon_{1s} + i\gamma + (\mu_2 \vec{P}-\vec{v})\vec{k}_1 + \frac{\mu_2}{2} \kappa_1^2 \right]^{-1} \quad (6.58)
\end{aligned}$$

Para obtener la sección eficaz doble diferencial en segunda aproximación de Born (Σ_2^2), retornamos a (6.40) teniendo en cuenta la suma de ambas contribuciones, es decir

$$\Sigma_2^2 = (1/2\pi v)^2 \int dP_t P_t \int d\psi |T_{if}^1 + T_{if}^2|^2 \quad (6.59)$$

Antes de reemplazar T_{if}^1, T_{if}^2 en (6.59), reescribimos el segundo de los términos entre paréntesis de (6.58) dejando solamente los factores dependientes de v dado que suponemos $\kappa_1 \ll 1$. Por lo tanto llamando G a este término

$$G = \left[-\frac{P^2}{2} + \vec{v}\vec{P} + \epsilon_{1s} + i\gamma + (\mu_2 \vec{P}-\vec{v})\vec{k}_1 + \frac{\mu_2}{2} \kappa_1^2 \right]^{-1} \approx \left[-\frac{P^2}{2} + \vec{v}\vec{P} \right]^{-1} \quad (6.60)$$

y teniendo en cuenta (6.44) y (6.45)

$$G = \left[(3P_1^2 - P_t^2)/2 \right]^{-1} \quad (6.61)$$

Reemplazando en forma explícita $|T_{if}^1 + T_{if}^2|^2$ en (6.59) obtenemos

$$\Sigma_2^2 = \frac{2^{10} \pi^2}{v^2} |\Psi_{E,L}(\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R})|^2 \int_0^\infty dP_t \frac{P_t [1 + (-1)^L \cos(RP_1 \cos\beta)] J_0(RP_t \sin\beta)}{(P_1^2 + P_t^2)^2} \times$$

$$\times \left[\frac{1}{(1+P_1^2+P_t^2)^4} + \frac{1}{(P_1^2+P_t^2)^2 (3P_1^2-P_t^2)^2} - \frac{2}{(P_1^2+P_t^2) (1+P_1^2+P_t^2)^2 (3P_1^2-P_t^2)} \right]$$

(6.62)

o reagrupando términos

$$\Sigma_2^2 = \Sigma_1^2 + \frac{2^{10} \pi^2}{v^2} |\Psi_{E,L}(\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R})|^2 \int_0^\infty dP_t \frac{P_t [1 + (-1)^L \cos(RP_1 \cos\beta)] J_0(RP_t \sin\beta)}{(P_1^2 + P_t^2)^2} \times$$

$$\times \left[\frac{1}{(P_1^2+P_t^2)^2 (3P_1^2-P_t^2)^2} - \frac{2}{(P_1^2+P_t^2) (1+P_1^2+P_t^2)^2 (3P_1^2-P_t^2)} \right]$$

(6.63)

donde nuevamente hemos despreciado κ_1 frente a P . La integración en la variable ψ se detalla en el Apéndice 2.

Vemos así que conociendo el valor de la función de onda del continuo sobre uno de los protones correspondientes al proyectil molecular y realizando en forma numérica la integración en (6.63) podemos calcular la Σ_2^2 de captura al continuo para un proyectil molecular.

7 - DISCUSION DE RESULTADOS TEORICOS

Conocida la expresión de la función de onda molecular $\Psi(6.2)$ a partir de los desarrollos expuestos, hemos calculado la densidad electrónica ($|\Psi_E|^2$) ($0 \leq \eta \leq 1$, $1 \leq \xi \leq 2$) en la dirección del eje internuclear, para algunos valores de separación internuclear, como puede verse en la fig.27. En la misma vemos que para valores de R muy pequeños la densidad electrónica sobre uno de los protones tiende al valor que se obtiene para el límite de átomo unido ($R=0$, $Z_1=2$). A medida que R crece la densidad electrónica sobre una de las cargas tiende rápidamente al valor correspondiente a un protón aislado ($R \rightarrow \infty$, $Z_1=1$) mientras que alejándose de los núcleos ($r \neq 0$) dicha densidad disminuye pero manteniéndose por encima de los valores correspondientes al caso atómico ($Z_1=1$).

La fig.28 muestra los resultados del cálculo de la sección eficaz en primera y segunda aproximación de Born (ecuaciones (6.46) y (6.63) respectivamente) para una velocidad de colisión $v=10a.u.$.

Vemos que el incremento en la sección eficaz para ambos casos, respecto del límite de átomos separados ($Z_1=1$), se produce para valores de separación internuclear R muy pequeños (menores aún que la separación media entre los dos protones componentes de la molécula H_2^+).

El hecho más interesante se refleja en las fluctuaciones observadas cuando variamos el ángulo β (ver fig.25). Para $\beta=0$ y $\beta=\pi/4$ existe una pronunciada disminución en Σ_1^2 y Σ_2^2 para valores de $R \sim 5$ au. mientras que para $\beta=0$ dichas fluctuaciones se mantienen aún para valores de R relativamente grandes ($R \sim 8a.u.$)

Fluctuaciones de igual naturaleza se observan en la fig.29 (idem fig.28, pero con $v=20a.u.$), aunque con detalles diferentes. Este hecho se debe principalmente a la dependencia de Σ_1^2 y Σ_2^2 con $P_1=v/2$ a través del término $\cos(RP_1 \cos\beta)$ el cual incluye también el ángulo β .

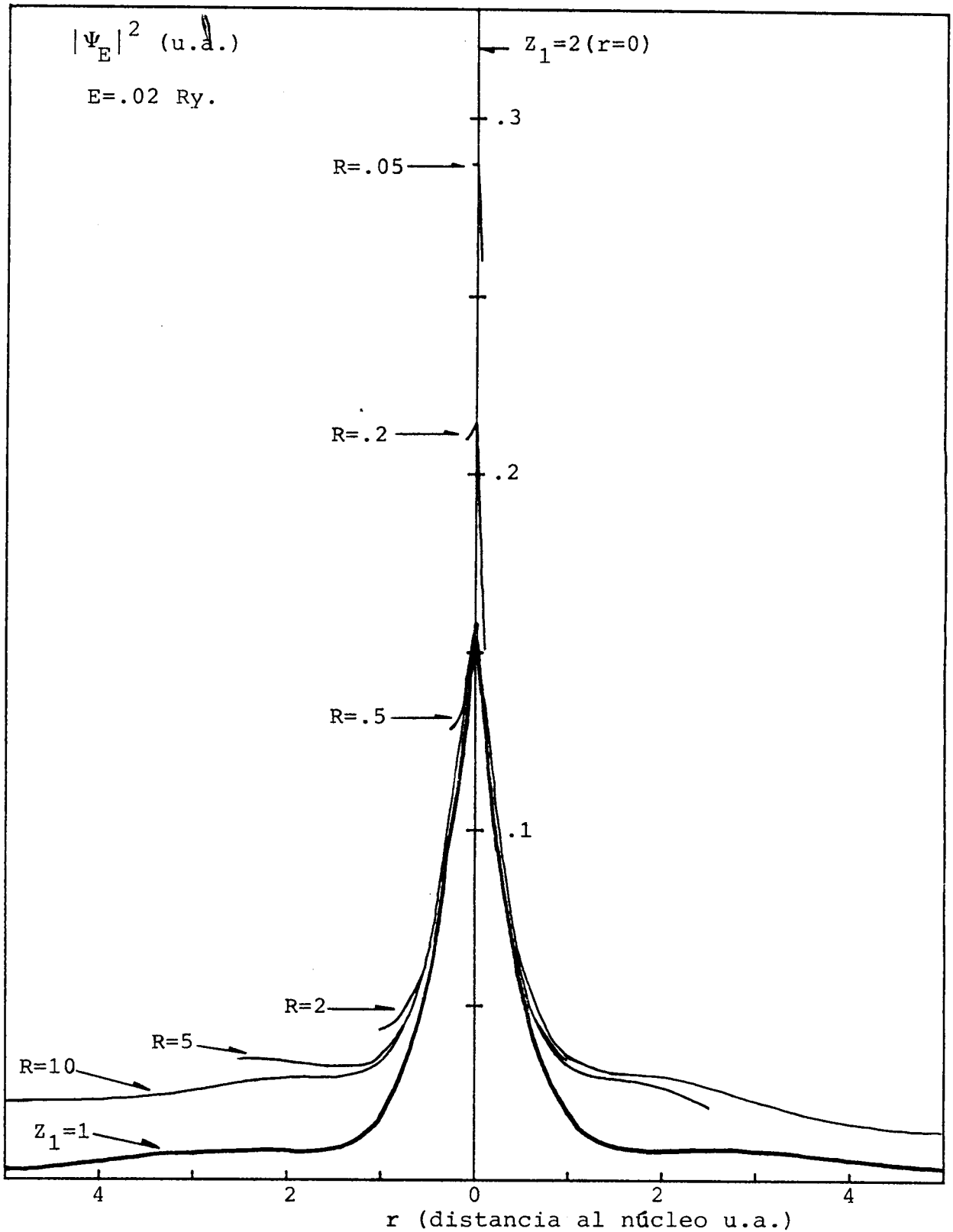


FIG.27: Densidad electrónica de dos protones, separados por una distancia R , uno de los cuales se sitúa en $r=0$ y el otro hacia la izquierda del gráfico una distancia igual al valor dado por cada uno de los R . La densidad electrónica resulta como suma de las diferentes contribuciones para cada L . La curva $Z_1=1$ muestra la densidad electrónica para un protón aislado.

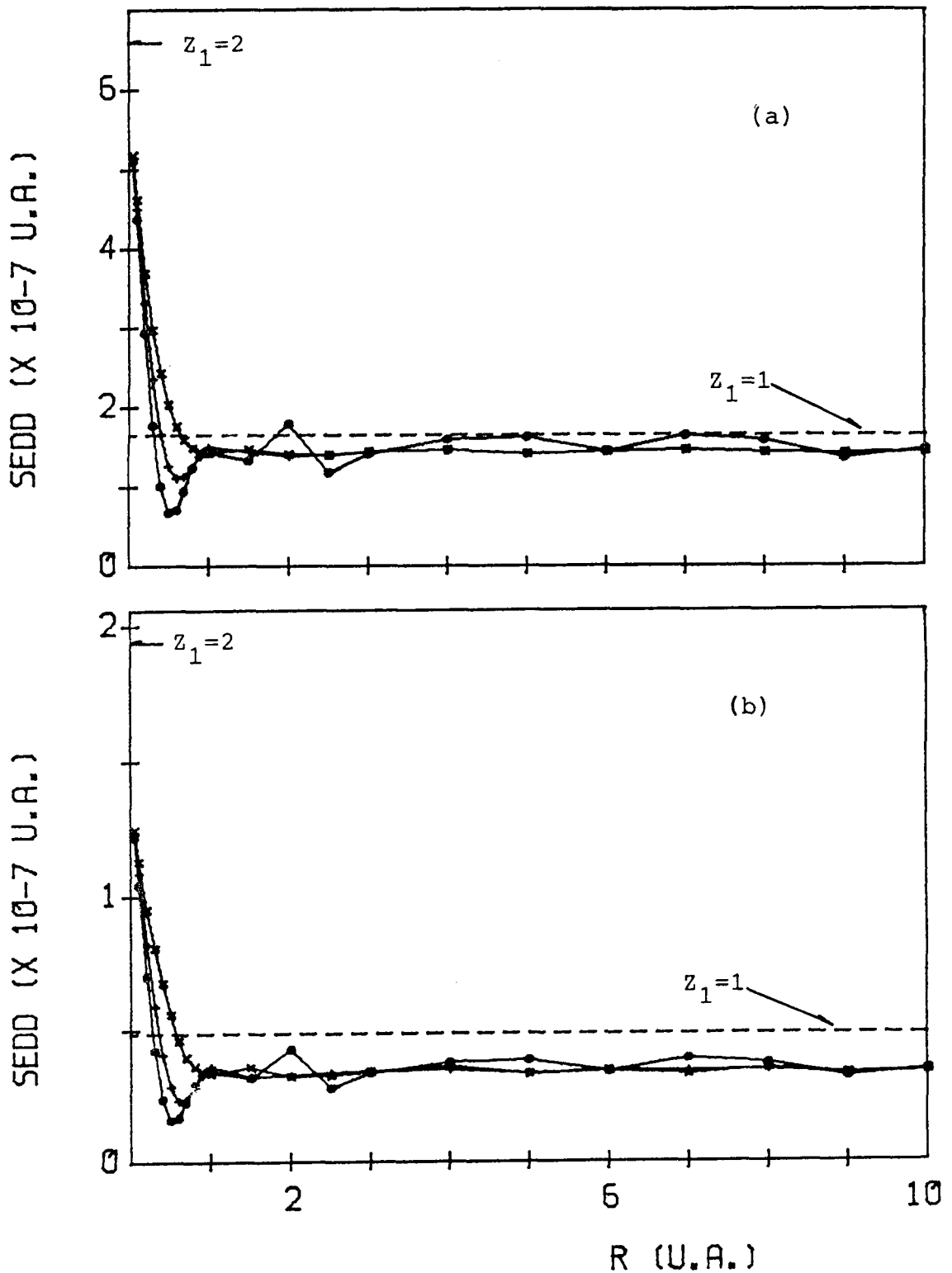


FIG.28: Sección eficaz doblemente diferencial (SEDD) en función de la separación internuclear R para una velocidad de colisión $v=10$ u.a. y una energía del electrón capturado $E=.02$ Ry. en el sistema del proyectil. (o) $-\beta=0$. (+) $-\beta=\pi/4$. (x) $-\beta=\pi/2$. (a) 1^a Aproximación de Born. (b) 2^a Aproximación de Born.

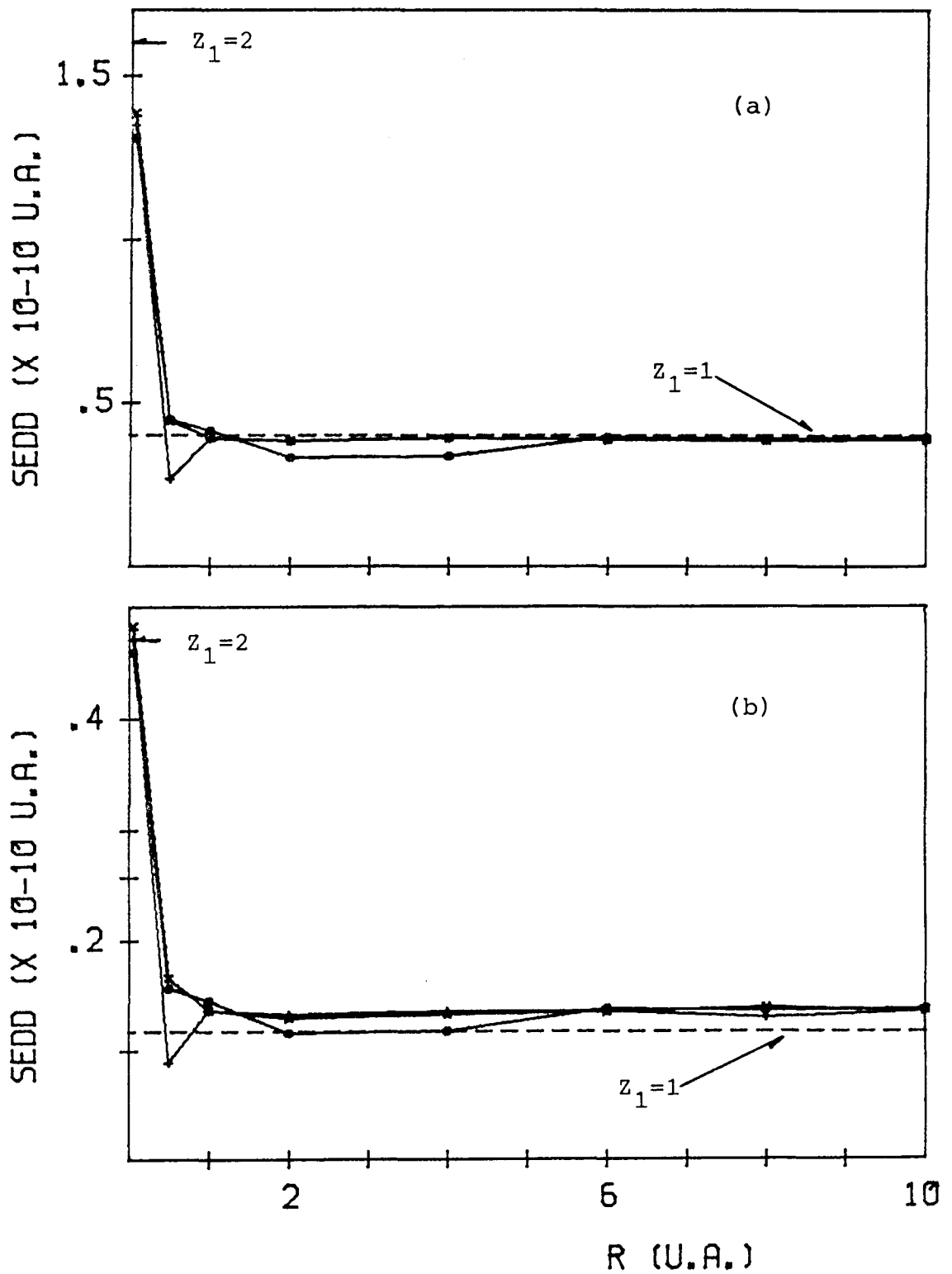


FIG.29: Sección eficaz doblemente diferencial (SEDD) en función de la separación internuclear R para una velocidad de colisión $v=20$ u.a. y una energía del electrón capturado $E=.02$ Ry. en el sistema del proyectil. (o) $-\beta=0$. (+) $-\beta=\pi/4$. (x) $-\beta=\pi/2$. (a) 1ª Aproximación de Born. (b) 2ª Aproximación de Born.

La concordancia entre la relación existente para la primera y segunda aproximación de Born, es decir³⁴

$$\Sigma_2^2 = .2946 \Sigma_1^2$$

mejora cuando pasamos de $\nu=10$ a $\nu=20$ a.u., poniendo de manifiesto el rango de validez de la aproximación empleada.

Como comprobación de la aproximación de pico realizada al haber tomado solamente el valor de la función de onda sobre uno de los protones, realizamos el cálculo para la Σ_1^2 manteniendo $\Psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}_1, \vec{R})$ en (6.31) dentro de la integral y verificamos que la sección eficaz así calculada concuerda satisfactoriamente con los valores provenientes de (6.46).

8 - CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos demuestran primero, el mayor rendimiento observado⁶ en la emisión de electrones convoy para proyectiles moleculares en comparación con proyectiles atómicos; como así también el hecho de mostrar anchos medios para altura mitad (FWHM) más estrechos⁸, lo cual surge como consecuencia natural de que el mayor rendimiento sólo se produce en la zona del pico de electrones convoy, mientras que en las colas ambos tipos de espectros coinciden.

Cabe destacar que aún para separaciones internucleares relativamente grandes ($R \approx 10-15 \text{ \AA}$) se producen efectos de correlación entre ambos protones. Como ya mencionáramos, este hecho reflejaría procesos de excitación colectiva de los electrones del sólido, los cuales pueden modificar los mecanismos de producción de electrones convoy.

El hecho que los espectros obtenidos con ambos tipos de proyectiles (atómicos y moleculares) coincidan en las zonas alejadas del pico, verifica la diferente naturaleza entre el mecanismo de emisión secundaria y la producción de electrones convoy.

La limitación en energía de los proyectiles, impuesta por el sistema experimental empleado, hace aconsejable proseguir con este tipo de mediciones con aceleradores que permitan alcanzar velocidades mayores, lográndose de esta forma separaciones internucleares menores a la salida de la lámina.

Los cálculos realizados presentan los primeros resultados obtenidos con proyectiles moleculares para este tipo de procesos. Si bien se observa un incremento en la sección eficaz para el proyectil molecular, el mismo se produce para valores de R muy pequeños.

Por otra parte el rango de validez de las aproximaciones empleadas no permite una comparación directa con los resultados experimentales. A pesar de ello es importante destacar las fluctuaciones observadas en la sección eficaz para ciertas orientaciones del proyectil molecular.

Los resultados presentados en la sección 4.2 muestran la influencia del estado, tanto cristalino como superficial, del blanco, en los espectros de electrones convoy; orientando así posibles futuras investigaciones relacionadas con los mecanismos de producción de dichos electrones.

APENDICE 1

Queremos relacionar $d\Omega$ con dP_t donde $d\Omega = \sin\theta d\theta d\psi$.
Para ello descomponemos \vec{P} según P_1, P_t (ver fig.25) y escribimos

$$\vec{P} = \vec{K}_i - \vec{K}_f^2 = (K_i - K_f^2 \cos\theta) \hat{v} - K_f^2 \sin\theta \hat{t}$$

$$P_1 = K_i - K_f^2 \cos\theta = K_i - K_f^2 + K_f^2 \frac{\theta^2}{2} + O(K_f^2 \theta^4 \sim \nu_2^{-2})$$

teniendo en cuenta que $\theta \sim \nu_2^{-1}$ y usando que

$$(K_f^2)^2 / 2\nu_2 + \kappa_2^2 / 2\mu_2 = K_i^2 / 2\nu_2 + \epsilon_{1s}$$

despejo K_f^2

$$\begin{aligned} K_f^2 &= [K_i^2 + 2\nu_2 (\epsilon_{1s} - \frac{\kappa_2^2}{2\mu_2})]^{1/2} = K_i [1 + \frac{2\nu_2}{K_i^2} (\epsilon_{1s} - \frac{\kappa_2^2}{2\mu_2})]^{1/2} = \\ &= K_i + \frac{1}{\nu} (\epsilon_{1s} - \frac{\kappa_2^2}{2\mu_2}) + O(\nu/\mu_2) \end{aligned}$$

y reemplazo en P_1 y P_t

$$P_1 = \frac{1}{\nu} (\frac{\kappa_2^2}{2\mu_2} - \epsilon_{1s}) + O(\nu/\mu_2)$$

$$P_t = -K_f^2 \sin\theta = -K_i \sin\theta + O(\nu/\nu_2)$$

pero $P_1 = \nu/2 =$ constante. Por lo tanto

$$d^2\vec{P}_t = dP_t P_t d\psi$$

$$dP_t = -K_i \cos\theta d\theta = -K_i d\theta + O(\nu/\nu_2)$$

$$d^2\vec{P}_t = K_i^2 \sin\theta d\theta d\psi = K_i^2 d\Omega$$

Finalmente

$$d\Omega = \frac{1}{K_i^2} dP_t P_t d\psi$$

APENDICE 2

Llamando U al término entre paréntesis de (6.43) y teniendo en cuenta (6.44) tenemos que

$$U = [e^{-i(\vec{P}-\vec{k}_1)\vec{R}/2} + (-1)^L e^{i(\vec{P}-\vec{k}_1)\vec{R}/2}]$$

donde

$$U_L^2 = \begin{cases} \cos^2[\frac{R}{2} (P_1 \cos\beta + P_t \sin\beta \cos\psi)] & \text{si } L: \text{ par} \\ \sin^2[\frac{R}{2} (P_1 \cos\beta + P_t \sin\beta \cos\psi)] & \text{si } L: \text{ impar} \end{cases}$$

De esta forma el paso anterior a (6.46) queda expresado como

$$\Sigma_1^2 = \frac{2^{10}\pi}{v^2} |\Psi_{E_{k,L}}(\frac{\vec{R}}{2}, \vec{R})|^2 \int_0^\infty dP_t \frac{P_t}{(P_1^2 + P_t^2)(1 + P_1^2 + P_t^2)^4} 2 \int_0^\pi d\psi U_L^2$$

La integración en $d\psi$ se puede resolver en forma analítica de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \int_0^\pi 2\cos^2(a+b\cos\psi) d\psi &= \int_0^\pi [1 + \cos[2(a+b\cos\psi)]] d\psi = \\ &= \pi + \cos 2a \int_0^\pi \cos(2b\cos\psi) d\psi - \sin 2a \int_0^\pi \sin(2b\cos\psi) d\psi = \\ &= \pi(1 + \cos 2a J_0(2b)) \end{aligned}$$

donde $\int_0^\pi \sin(2b\cos\psi) d\psi = 0$
En forma análoga

$$\int_0^\pi 2\sin^2(a+b\cos\psi) d\psi = \pi(1 - \cos 2a J_0(2b))$$

donde hemos reemplazado

$$a = \frac{R}{2} P_1 \cos\beta$$

$$b = \frac{R}{2} P_t \sin\beta$$

Finalmente, reemplazando la forma explícita de la integral en $d\psi$ obtenemos (6.46).

REFERENCIAS

- ¹ M.E.Rudd, C.A.Sauter and C.L.Bailey, *Phys.Rev.A*, 3, 1635 (1966)
- ² G.B.Crooks and M.E.Rudd, *Phys.Rev.Letters*, 25, 1599 (1970)
- ³ K.G.Harrison and M.W.Lucas, *Phys.Letters*, 33A, 142 (1970)
- ⁴ A.Salin, *J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.*, 2, 631 (1969), 2, 1255 (1969)
- ⁵ J.Macek, *Phys.Rev.A*, 1, 235 (1970)
- ⁶ K.Dettmann, K.G.Harrison and M.W.Lucas, *J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.*, 7, 269 (1974)
- ⁷ M.M.Duncan and M.G.Menéndez, *Phys.Rev.A*, 13, 566 (1976)
- ⁸ W.Meckbach, K.C.R.Chiu, H.H.Brongersma and J.Wm McGowan, *J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.*, 10, 3255 (1977)
- ⁹ V.N.Neelavathi, R.H.Ritchie and W.Brandt, *Phys.Rev.Lett.*, 33, 302 (1974)
- ¹⁰ W.Brandt, A.Ratkowski and R.H.Ritchie, *Phys.Rev.Letters*, 33, 1325 (1974)
- ¹¹ J.C.Poizat and J.Remillieux, *Phys.Lett.*, 34A, 53 (1971)
- ¹² M.J.Gaillard, J.C.Poizat and J.Remillieux, in *Proc.5thInt.Conf. on Atomic Collisions in solids, Gatlinburg, Tenn., U.S.A., 1973* (Plenum Press, New York, 1975) p.681
M.J.Gaillard, J.C.Poizat, A.Ratkowski and J.Remillieux, *Nucl.Inst. and Meth.*, 132, 69 (1976)
M.J.Gaillard, J.C.Poizat, A.Ratkowski, J.Remillieux and M.Auzas, *Phys.Rev.A*, 16, 2323 (1977)
- ¹³ V.H.Ponce, E.González Lepera, W.Meckbach and I.B.Nemirovsky, *Phys.Rev.Letters*, 47, 572 (1981)
- ¹⁴ L.del Rosario, *Phys.Rev.*, 74, 304 (1948)
- ¹⁵ H.Z.Sar-el, *The Rev.of Scient.Inst.*, 38, 1210 (1967)
V.V.Zashkvara, M.I.Korsunskii and O.S.Kosmachev, *Sov.Phys.-Tech.Phys.*, 11, 96 (1967)
V.V.Zashkvara and V.S.Red'kin, *Sov.Phys.-Tech.Phys.*, 14, 1089 (1970)
- ¹⁶ J.S.Risley, *The Rev.of Scient.Inst.*, 43, 95 (1972)
- ¹⁷ S.K.Allison, S.P.Frankel, T.A.Hall, J.H.Montagne, A.H.Morrish and S.D.Warshaw, *The Rev.of Scient.Inst.*, 20, 735 (1949)
- ¹⁸ W.Meckbach, I.B.Nemirovsky and C.R.Garibotti, *Phys.Rev.A*, 24, 1793 (1981)
- ¹⁹ J.Marrin, *Rev.Mod.Phys.*, 33, 139 (1961)
- ²⁰ C.E.González Lepera, *Trabajo Especial, Instituto Balseiro* (1979)
- ²¹ P.D.Dumont, A.E.Livingston, Y.Baudinet-Robinet, G.Weber and L.Quaglia, *Physica Scripta*, 13, 122 (1976)

REFERENCIAS (continuación)

- ²²U. Sander, H.H. Bukow, H.v. Buttlar, Nucl. Inst. and Meth., 167, 35 (1979)
- ²³U. Sander and H.H. Bukow, Rad. Effects, 40, 143 (1979)
- ²⁴H.H. Andersen and J.F. Ziegler, Hydrogen-Stopping Powers and Ranges in All Elements-Vol.3 of The Stopping and Ranges of Ions in Matter-Pergamon Press (1977)
- ²⁵B.T. Meggitt, K.G. Harrison, M.W. Lucas, J. Phys. B, 6, L362 (1973)
- ²⁶D.R. Bates and G. Poots, Proc. Phys. Soc., London, 66, 784 (1953)
D.R. Bates, U. Öpik and G. Poots, Proc. Phys. Soc., London, 66, 1113 (1953)
- ²⁷M. Shimizu, J. Phys. Soc. Japan, 18, 811 (1963)
- ²⁸L.I. Ponomarev and L.N. Somov, J. Comp. Phys., 20, 183 (1976)
- ²⁹J. Rankin and W.R. Thorson, J. Comp. Phys., 32, 437 (1979)
- ³⁰M. Abramowitz and I.A. Stegun, "Handbook of Mathematical Functions", Dover Publicat., INC., New York (1965)
- ³¹A. Messiah, "Quantum Mechanics", Vol. I, 484-492, Wiley, New York, (1961)
- ³²H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum Mechanics of one-and two-electron atoms", 23, Springer-Verlag, 1957
- ³³G. Dahlquist and A.B. Jörck, "Numerical Methods", 347, Prentice-Hall, INC, New Jersey, (1974)
- ³⁴V.H. Ponce, J. Phys. B, 14, 3463 (1981)
- ³⁵M.R.C. McDowell and J.P. Coleman, "Introduction to the theory of Ion-Atom Collisions", 307, Amsterdam, North-Holland, (1970)
- ³⁶J.E. Miraglia and V.H. Ponce, J. Phys. B, 13, 1195 (1980)