

## Cálculo de la distribución de probabilidades de ionización en la colisión de antiprotones con átomos de Hidrógeno

J. M. Rodríguez Aguirre(1)\*, M. R. Valenzuela(2)\*, E. Custidiano(3)\*, M.M. Jakas(4)\*\*

\*Dpto. de Física, Fac. de Ciencias Exactas, UNNE, Av. Libertad 5600, 3400 Corrientes

\*\* Departamento de Física fundamental y Experimental, Universidad de La Laguna – Tenerife – España

(1)e-mail: jmra@exa.unne.edu.ar

(2)e-mail: mercedes@exa.unne.edu.ar

(3)e-mail: cernesto@exa.unne.edu.ar

(4)e-mail: mmateo@ull.es

### Abstract

The ionization process, in the antiproton H(1s) collision, for several energies was studied utilizing the Classical trajectories Monte Carlo Method (CTMC), in the impact parameter approximation. The classical initial distributions of the system were determined with the microcanonical distribution and with the distribution proposed by Cohen. The results are compared with quanta calculations and experimental data.

**Keywords:** fragmentation, nanodosimetry, ionization

### Resumen

Se estudió el proceso de ionización, en la colisión de Antiprotones con átomos de H(1s), para varias energías; utilizando el método de Trayectorias Clásicas Monte Carlo (CTMC), en la aproximación del parámetro de impacto. En el cual se determinaron las condiciones iniciales del sistema, mediante las distribuciones clásicas microcanónica y la distribución propuesta por Cohen. Se compararon los resultados obtenidos con cálculos teóricos (cuánticos) y experimentales.

**Palabras clave:** fragmentación, nanodosimetría, ionización

### Introducción

Existen muchos estudios teóricos, tanto clásicos [2,3,4,11] como cuánticos [5,8,12,13] de la colisión de iones con átomos, por ejemplo, la colisión de protones con átomos de H, que constituye unos de los sistemas mas simples; en el cual se producen colisiones elásticas e inelásticas, dando lugar estas últimas a los procesos de ionización, excitación y captura. Pero el estudio de la colisión de antiprotones con átomos de H resulta muy atractivo, por que a diferencia de la colisión de protones con átomos de H, en este no se produce el proceso de captura electrónica.

En este trabajo se estudia la ionización de átomos de H como consecuencia de la colisión con antiprotones. Se utilizó el método de Trayectorias Clásicas Monte Carlo, en la aproximación del parámetro de impacto y trayectorias rectilíneas; este método a sido utilizado previamente para el estudio de la colisión de iones con átomo y moléculas [14]; siendo los resultados aceptables para velocidades de impacto del ión del orden de la velocidad orbital del electrón.

### Métodos

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

En el caso del proceso de colisión  $p^- - H(1s)$ , y obedeciendo a nuestra convención de utilizar siempre unidades atómicas, elegimos  $Z_t = Z_p = 1$ , las cargas del protón incidente y del núcleo de hidrógeno.  $m_p = m_2 = 1836$ , las masas del antiprotón y del núcleo.

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

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

Donde  $m$  es la masa del electrón y  $e$  la carga elemental y  $Z_1$  y  $Z_2$  son la carga del ión y del núcleo, respectivamente. Y  $R = p + t v_0$  siendo  $v_0$  la velocidad inicial del ión y  $p$  el parámetro de impacto.

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

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

Donde  $j$  se refiere al canal de interés y  $N$  se elige de manera de asegurarnos que la incerteza estadística de  $P(p)$  sea menor que cierto valor predeterminado  $\epsilon$ .

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

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

La generación de los estados iniciales electrónicos es una de las partes más delicadas del cálculo: Abrines y Percival [1] propusieron extraer los estados iniciales de un conjunto estadístico microcanónico con energía fijada en el primer autovalor de la solución del átomo de hidrógeno. Esta distribución tiene la ventaja de representar exactamente la distribución electrónica inicial del átomo de H en el espacio de los momentos, pero presenta el inconveniente de truncar la distribución radial demasiado, siendo nula la distribución para radios mayores a  $r = 2$ . Esta elección esta basada en que la elección del estado energético y la relación de velocidades entre el electrón y proyectil son mucho mas importantes para la determinación del resultado de la colisión que la distribución espacial.

Cohen [3] propuso que la función de distribución en el espacio de fases se podría expresar por medio de una función de distribución en energías de enlace. Y la energía de enlace estaría relacionada con la distribución en el espacio de fases por medio de:

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

Luego, imponiendo la condición de que la distribución radial que se obtenga de ella debe coincidir con la distribución radial cuántica obtuvo la siguiente solución:

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

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

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

La última etapa del método es la clasificación de la interacción que permita encontrar las cantidades estadísticas que conformen los valores de sección eficaz, además de servir de test de finalización del cálculo en la etapa de integración. Para esto se evalúan los criterios que definen cada caso posible, y se finaliza el cálculo en el momento que alguna de ellas es satisfecha. En el método CTMC se distinguen tres canales principales: en el caso de que el electrón permanezca en interacción con el Ion incidente, y su energía total sea negativa, se lo considera en estado enlazado al ion, y la historia se clasifica como “captura electrónica”, en los casos en que el electrón permanezca con energía negativa en las inmediaciones del núcleo original, se considera que el electrón permanece en estado ligado y, en general, en un estado distinto al inicial. Este canal se conoce como “Excitación” y cuando el electrón tenga energía positiva con respecto a ambos núcleos, se lo considera como “ionización”.

## Resultados y Discusión

Se ha resuelto la ec. (1) para el sistema antiprotón-H, en la aproximación del parámetro de impacto y trayectorias del ión rectilíneas, la distancia del ión al centro masa del sistema está dada por  $R = b+vt$ , donde  $b$  es el parámetro de impacto y  $v$  es la velocidad de impacto del ión.

A pesar de las notables diferencias entre las dos distribuciones iniciales utilizadas no se distinguen grandes diferencias en las secciones eficaces totales de stopping para todo el rango de energías considerado (Fig.1). Siendo la diferencia mas notable un aumento en los valores para energías de colisión bajas. Los cálculos por medio del método de canales acoplados de centro simple, basado en expansión de funciones de onda atómicas, realizados por Schiwietz [7] son mostrados en forma comparativa. Así como los resultados experimentales de la ref [10]. Se aprecia un notable acuerdo con los valores de referencia en el rango de media y altas energías. Mientras que hay un buen acuerdo general con los cálculos cuánticos.

En las Fig. 2 a y b se muestran la comparación de las distribuciones de probabilidad de ionización por el parámetro de impacto, en función del parámetro de impacto, con los resultados teóricos obtenidos por Tong. Et.al [6]; en las mismas se observa un buen acuerdo para la energía de 100 KeV, no así para una energía de 10 KeV. Estos resultados están en concordancias con los resultados reportados en literatura, en los cuales los resultados obtenidos con el método clásico CTMC; para la colisión de iones con átomos se aproximan bien a los resultados cuánticos [7] y experimentales [10] en la región de energías intermedias.

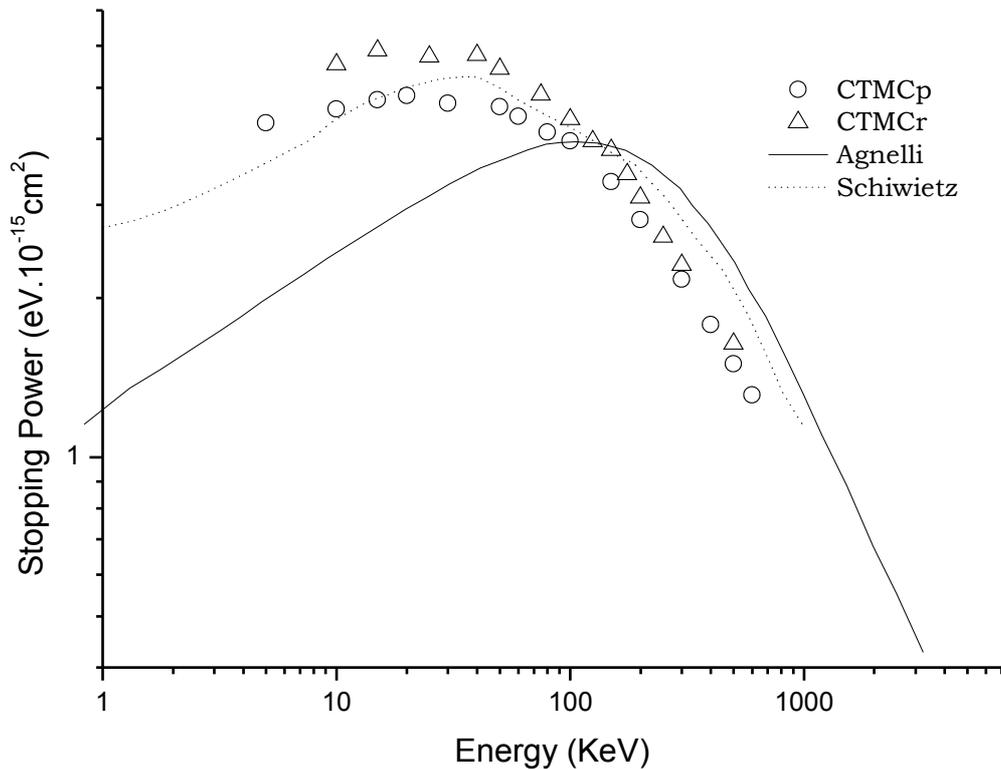


Fig.1 Sección eficaz de poder de frenado electrónico en colisión  $p^- - H(1s)$ . Cálculos por CTMCp (cuadrados), y por CTMCr (círculos). Los resultados experimentales (línea llena) son de la ref [10]. Y los cálculos cuánticos de la ref [7] (línea de puntos)

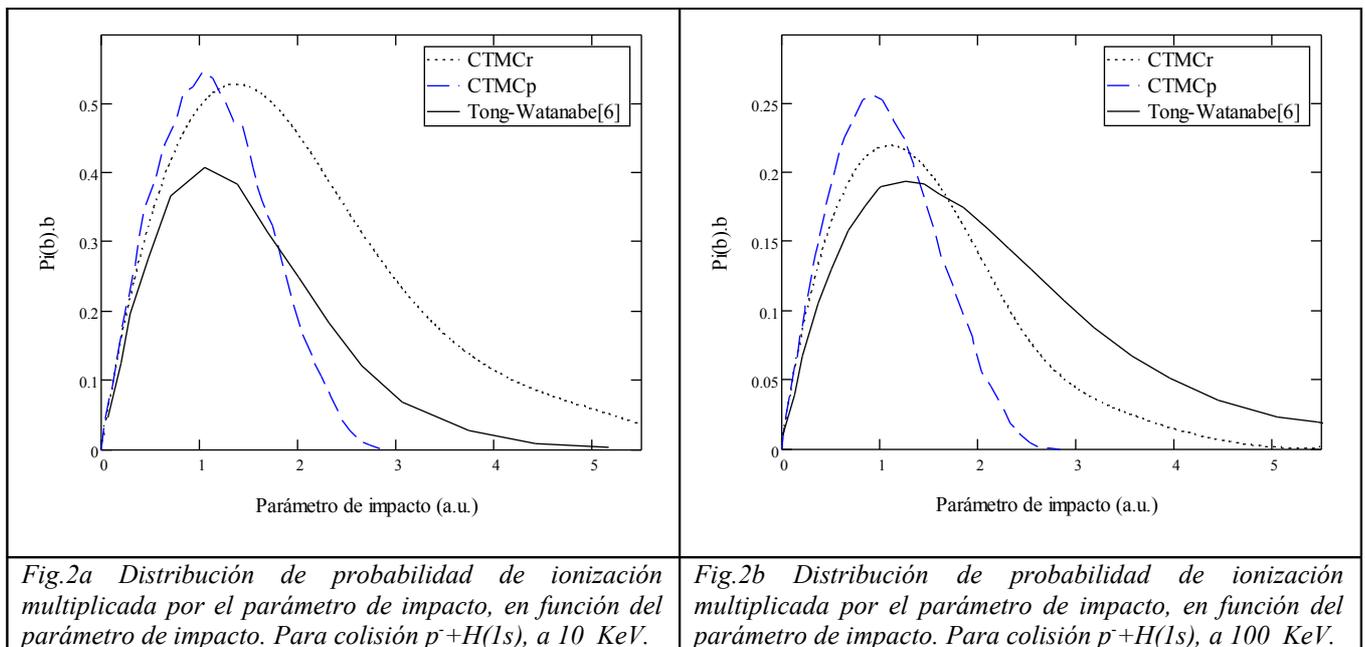


Fig.2a Distribución de probabilidad de ionización multiplicada por el parámetro de impacto, en función del parámetro de impacto. Para colisión  $p^+H(1s)$ , a 10 KeV.

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

## Conclusión

Los resultados obtenidos en este trabajo, en el estudio de la colisión de antiprotones con átomos de H, nos permiten concluir que se observa un buen acuerdo entre los resultados obtenidos por el método clásico CTMCr; con las condiciones iniciales determinadas mediante la distribución propuesta por Cohen y los resultados teóricos obtenidos mediante métodos cuánticos sofisticados [5,6], para energías de impacto del orden de 100 KeV.

## Referencias

- [1] R. Abrines and I. C. Percival. Proc. Phys. Soc., 88, 861, 1966.
- [2] R. E. Olson and A. Salop. Phys. Rev. A, 16, 531-541, 1977.
- [3] J. S. Cohen. Phys. Rev. A, 26, 3008-3010, 1982.
- [4] E.R. Custidiano, M.M. Jakas. Phys. Rev. A **72** 022708 (2005)
- [5] S. Sahoo, S.C. Mukherjee and H. R. J. Walters. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **37** (2004) 3227-3237
- [6] X. Tong, T. Watanabe, D. Kato and S. Ohtani, Phys. Rev. A **64** 022711 (2001)
- [7] G. Schiwietz and P. Grande, Radiat. Eff. Defects Solids **130-131**, 137 (1992)
- [8] Schiwietz, G. 1990, Phys.Rev. A, **42**, 296
- [9] Knudsen H, Mikkelsen U, Paludan K, Kirsebom K, Møller S P, Uggerhøj E, Slevin J, Charlton M and Morenzoni E 1995 Phys. Rev. Lett. **74** 4627
- [10] M. Agnello *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 371 (1995)
- [11] E. R. Custidiano, F. J. Perez de la Rosa, and M. M. Jakas, Phys. Rev. A **66**, 052902 (2002)
- [12] Igarashi A., Nakasaki S. and Ohsaki A. 2000, Phys.Rev. A, **61**, 062712.
- [13] Toshima N., 2001, Phys.Rev. A, **64**, 024701.
- [14] R. Cabrera-Trujillo, Y. Öhrn, E. Deumens and J. R. Sabin, J. Chem. Phys. **116**, 2783 (2001)