



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

2A
2ej

UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

**CAPTURA DE CARGA ENTRE IONES
MULTIPLEMENTE CARGADOS CON
ESPECIES NEUTRAS.**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
F I S I C O
P R E S E N T A:
ERIC RAUL MARQUINA CRUZ

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

MEXICO D.F.



MARZO, 1994



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

DEDICATORIAS

A Silvia y Emiliano Marquina, mis padres,
quienes me introdujeron
en los placeres de la comprensión del mundo,
con gratitud, admiración y amor.

Para Gary e Iracema,
que alcanzarán la mayoría
de edad con el milenio.
Que podamos dejarles a su generación
un mundo mejor que el que nos dejaron.

A Ivan, José Luis y Alfredo,
por mas de un lustro de amistad
y de trabajo duro y bien hecho,
con respeto y admiración.

A Rubí, Azucena, Hancel y Dulce,
por la fortaleza de nuestra hermandad.

Con cariño a Aurora Miranda,
mi abuelita, preocupada constantemente por
mi bienestar, y por ser muestra de
responsabilidad moral.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Laboratorio de Cuernavaca del Instituto de Física de la UNAM por todas las facilidades que me ha brindado para la realización de esta Tesis y para la presentación de éste trabajo. Este trabajo ha sido apoyado parcialmente por CONACyT REF. No. 0693-E9111 y DGAPA IN-100392.

Deseo expresar mi especial agradecimiento al Dr. Horacio Martínez Valencia, de quien siempre he obtenido confianza, estímulo y apoyo a lo largo de la realización de mis estudios y durante la realización de esta tesis.

INDICE

Páginas

INDICE	3
INTRODUCCION	4
CAPITULO I.- CONSIDERACIONES GENERALES.	
I.1.- Modelo de Landau- Zener.	12
I.2.- Elemento de Matriz de Acoplamiento Reducido.	29
I.3.- Modelo de Esfera Absorbente.	41
I.4.- Modelo de Borh-Lindhard.	42
CAPITULO II.- MODELO DE CAPTURA DE CARGA ENTRE IONES MULTIPLEMENTE CARGADOS CON ESPECIES NEUTRAS.	
II.1.- Modelo de Esfera Absorbente de Olson-Salop para la Captura Electrónica simple entre Iones Múltiplemente Cargados y Especies Neutras.	47
II.2.- Automatización del Modelo de Esfera Absorbente de Olson-Salop (Programa en Lenguaje Q-Basic versión 4.5).	54
CAPITULO III.- CALCULO DE SECCIONES TRANSVERSALES. APLICACIONES DEL MODELO DE ESFERA ABSORBENTE DE OLSON-SALOP.	
III.1.- Iones Múltiplemente Cargados de Gases Raros en Especies Neutras de Gases Raros.	55
III.2.- Tablas.	62
III.3.- Gráficas.	82
CAPITULO IV.- RESULTADOS Y DISCUSION.	
IV.1.- Discusión de Sistemas en Colisión Individuales. Comparación entre Modelo de Esfera Absorbente de Olson-Salop y Datos Experimentales.	118
CAPITULO V.- CONCLUSIONES.	131
REFERENCIAS.	136

INTRODUCCION.

Durante la última década se han realizado intensas investigaciones tanto teóricas como experimentales de iones múltiplemente cargados a energías de KeV colisionando con especies neutras. La razón se encuentra en que tales colisiones son fundamentales en física básica, en la química, física atmosférica, astrofísica y en la física de plasmas. Dentro de esta última, un plasma consiste de materia ionizada (parcialmente), en la cual electrones y iones se mueven libremente. Cantidades pequeñas de iones múltiplemente cargados pueden violentamente cambiar las propiedades del plasma. La reacción dominante de los iones múltiplemente cargados en un plasma de fusión son con electrones y átomos de hidrógeno. Donde colisiones de captura electrónica simple de iones múltiplemente cargados con hidrógeno produce fotones. Estos fotones escapan fácilmente del plasma confinado magnéticamente, lo cual implica que el plasma pierda energía, esto es, se enfrié. Aunque pequeñas cantidades de iones múltiplemente cargados originan enfriamiento porque la sección transversal para dispersión elástica e intercambio de carga, así como la energía de los fotones emitidos después de la captura electrónica, rápidamente se incrementan con el incremento de carga de los iones. En todas estas disciplinas de la ciencia se requiere en algún momento conocer las secciones transversales de captura electrónica, con o sin la excitación del blanco. Existen dificultades teóricas que impiden el cálculo de muchas reacciones. En colisiones con átomos

las interacciones fundamentales que involucran excitación y la ionización del blanco, compiten con el proceso de captura simple, siendo importante aislar e identificar estos procesos de captura electrónica para hacer detalladas comparaciones entre la teoría y el experimento.

La interacción de iones múltiplemente cargados con átomos, es de particular interés para este trabajo, el cual consiste en presentar y aplicar un modelo de transferencia de carga para evaluar la sección transversal total de iones múltiplemente cargados colisionando con átomos en función de la energía incidente, así como del estado de carga del proyectil y finalmente del radio de cruce. Por este método es posible la determinación de los estados electrónicos, así como los potenciales de interacción involucrados en el proceso de colisión.

Los reactantes y productos pueden existir en muchos estados electrónicos, por lo que los sistemas pueden interactuar con potenciales diferentes, siendo posible el paso de un potencial a otro, comportamiento que puede producir confusiones al hacer suposiciones sobre el proceso, que no son los mismos cuando se cambia de potencial. Como consecuencia de la influencia de varios potenciales, resulta importante la estructura electrónica del sistema en colisión por la colisión misma, cuando, involucra procesos como por ejemplo transiciones electrónicas entre superficies de energía potencial. Por otra parte también es importante la estructura electrónica en colisiones a energías térmicas cuando las superficies no se tocan, ya que los procesos

son no-adiabáticos y el movimiento nuclear involucra un salto entre las curvas de energía potencial.

Esta Tesis ha sido desarrollada con la finalidad de dar un panorama general dentro del cual se ubican los estudios teóricos realizados de captura electrónica simple de colisiones de iones múltiplemente cargados y especies neutras. La razón para ello es que la información respectiva se encuentra distribuida en una gran cantidad de artículos y en algunos libros especializados. Es necesario elaborar un resumen que permita tener un acceso rápido y directo hacia algunos de los trabajos de investigación realizados actualmente en física atómica y molecular. Por consiguiente parte de la presente Tesis es una revisión bibliográfica y otra parte es un reporte crítico de comparación entre un modelo teórico de captura electrónica (modelo de esfera absorbente de Olson y Salop para iones múltiplemente cargados a bajas energías colisionando con especies neutras) y resultados experimentales. El objetivo central de este trabajo tiene dos propósitos, el primero consiste en estimar un valor preciso de la sección de captura de carga de iones múltiplemente cargados que pueda ser usado en el modelaje de comportamientos de plasmas producidos en laboratorios y plasmas astrofísicos, así como contribuir al entendimiento de los mecanismos básicos involucrados en colisiones a energías del orden de KeV de iones múltiplemente cargados colisionando con blancos atómicos. El segundo objetivo es proporcionar al medio científico experimental un modelo simple para comparación de sus resultados experimentales, de tal manera que aclare a primera aproximación el

proceso de colisión. La disposición de un modelo así, ayudara a la explicación e interpretación de una serie de modelos mas complicados.

El capítulo uno comprende las consideraciones generales; el modelo de Landau-Zener, el elemento de matriz de acoplamiento reducido, el modelo de esfera absorbente y el de Bohr-Lindhard. Como se sabe, se han realizado grandes esfuerzos teóricos y experimentales para estudiar colisiones entre iones y átomos, que involucran un proceso de captura de carga entre las partículas que colisionan. Específicamente en el tratamiento de colisiones inelásticas que involucran un cambio de estado electrónico en una o en ambas partículas colisionantes, el procedimiento mas útil para obtener estimaciones burdas, pero muy útiles sobre un amplio intervalo de condiciones está dado por el modelo de Landau-Zener [8]. Este modelo está basado en un tratamiento de la teoría de perturbaciones a primer orden de un modelo de dos estados, donde hay una única interacción cerca del punto de cruce. A pesar de esta aproximación a primer orden y del conocimiento limitado que incluye un comportamiento incorrecto a altas energías, esta aproximación ha probado ser extremadamente útil para hacer estimaciones de las probabilidades de transición, las cuales son confiables dentro de un factor de 2 o 3. Para aplicar este método de estimación y análisis de los procesos electrónicos inelásticos es crucial conocer los potenciales de los estados y particularmente la localización de su cruzamiento R_c , además de conocer la interacción de acoplamiento. Frecuentemente los potenciales son razonablemente

bien conocidos en la región de interés, siendo dominados por fuerzas de largo alcance entre las partículas colisionantes y donde también, el cruzamiento u otra interacción ocurren a grandes valores de R . Para esos casos, con frecuencia se pueden obtener fácilmente estimaciones del acoplamiento de la interacción. En otros casos, en donde los potenciales han sido obtenidos por cálculos de estructura electrónica adiabática, el acoplamiento de la interacción se obtiene automáticamente, puesto que es exactamente un medio de la separación entre las dos curvas adiabáticas en su punto de mas cercana aproximación. Sin embargo, más generalmente, la magnitud de la interacción del acoplamiento y los parámetros sobre los cuales ésta depende, varían con los procesos físicos involucrados en las transiciones electrónicas en consideración. Por tanto hay una considerable necesidad de métodos formales simples para la estimación de la interacción de acoplamiento a partir de parámetros atómicos y moleculares simples.

Un método semi-empírico basado en una correlación de 99 cálculos para estimar los elementos de matriz de acoplamiento necesarios para los cálculos Landau-Zener ha sido desarrollada por R. E. Olson y colaboradores [5]. El procedimiento es aplicable a problemas de transferencia de un electrón tales como los cálculos de transferencia de carga y de recombinación ion-ion y requiere sólo del conocimiento de la distancia de cruce y propiedades atómicas fácilmente disponibles tales como el potencial de ionización, afinidad electrónica y los niveles de energía atómicos.

El modelo de esfera absorbente es una extensión del modelo de

Landau-Zener aplicado al caso en donde hay un gran número de curvas de cruce y el de Bohr-Lindhard describe la captura de un electrón de un blanco de electrones por un proyectil altamente cargado que se comporta clásicamente. Se discuten cada uno de estos modelos más en detalle.

El capítulo dos comprende el modelo de captura de carga entre iones múltiplemente cargados con especies neutras [24]; un formalismo relativamente simple de combinación del elemento de matriz de acoplamiento reducido con un modelo de esfera absorbente basado en el método de Landau-Zener para obtener secciones transversales totales de transferencia de carga. El método supone un gran número de canales disponibles para la reacción y es aplicable a velocidades relativas $V_{rel} \leq 1 \times 10^8$ cm/s. Para tales reacciones de transferencia de carga, las secciones transversales a una velocidad dada son primordialmente dependientes del estado de carga del ion incidente y del potencial de ionización del átomo blanco; además para un sistema en colisión, la sección transversal es casi independiente de la velocidad relativa. La fórmula para el elemento de matriz de acoplamiento reducido desarrollado en este modelo es aplicable a reacciones tipo $A^{q+} + B \rightarrow A^{(q-1)+} + B^+$, donde $4 \leq q \leq 54$. Se automatiza este modelo mediante un programa de computadora en lenguaje Q-Basic, versión 4.5.

Los capítulos tres y cuatro contienen el cálculo de secciones transversales con el modelo anterior automatizado y se aplica a varios sistemas en colisión, tales como iones múltiplemente cargados de gases raros y especies neutras de gases raros. Los

resultados se discuten y se comparan con los datos reportados en la literatura, lo que permite confirmar que el modelo está brindando resultados confiables.

En el capítulo cinco se especifican las conclusiones obtenidas y se hace notar qué tan aplicable es el modelo a sistemas en donde hay una densidad alta de curvas de cruzamiento en la región internuclear alrededor de la distancia crítica R_c , la cual es fácil de calcular y que a causa de este requerimiento el modelo es más aplicable a iones altamente cargados, $q \geq 10$, aunque se pueden hacer estimaciones útiles de las secciones transversales para q 's pequeñas. Se estiman los porcentajes de dispersión con respecto a los datos disponibles en la literatura.

Finalmente se presenta la bibliografía utilizada en el trabajo.

I.- CONSIDERACIONES GENERALES.

El estudio de la transferencia de un electrón entre iones múltiplemente cargados colisionando con especies neutras es un tópico de la actividad que se realiza actualmente en investigación. Algunas de las primeras motivaciones surgieron de la posibilidad de usar la reacción



como base para un láser de rayos X [1]. Otros intereses han sido estimulados por los programas de investigación del Tokamac, en donde colisiones de intercambio de carga entre iones múltiplemente cargados y átomos de deuterio en fusión de plasmas llevan a una significativa pérdida de radiación [2].

Recientemente se ha aplicado la teoría de Landau-Zener modificada a sistemas de multicruce y al cálculo de secciones transversales de captura de un electrón para un buen número de sistemas en colisión de iones múltiplemente cargados-hidrógeno atómico, molecular y helio [3,4]. Asimismo se ha desarrollado un método semi-empírico para estimar los elementos de matriz de acoplamiento H_{mn} como una función de la distancia de cruce R_c [5]. Usando estos elementos de matriz y una extensión del método de Landau-Zener aplicado al caso en donde hay un gran número de cruce de curvas (modelo de esfera absorbente) se ha encontrado que es posible evaluar las secciones transversales más rápidamente para un

gran número de sistemas en colisión.

El modelo de Bohr-Lindhard describe la captura de un electrón de un blanco de electrones por un proyectil altamente cargado que se comporta clásicamente [6]. Basados en este modelo se han elaborado métodos clásicos simples para la captura de un electrón. Se discutirá cada uno de estos modelos en detalle para una mejor comprensión.

I.1.- MODELO DE LANDAU-ZENER.

Específicamente en el tratamiento de colisiones inelásticas que involucran un cambio de estado electrónico en una o ambas partículas colisionantes, el procedimiento más sencillo para obtener estimaciones burdas, pero muy útiles sobre un intervalo muy amplio de condiciones está dado por el método de Landau-Zener [7-9]. Este método está basado en un tratamiento de la teoría de perturbaciones a primer orden de un modelo de dos estados, donde hay una única interacción cerca del punto de cruce. A pesar de esta aproximación a primer orden y el conocimiento limitado que incluye un comportamiento incorrecto a altas energías [9,10], esta aproximación ha probado ser extremadamente útil para hacer estimaciones de las probabilidades de transición, las cuales son frecuentemente confiables dentro de un factor de 2 o 3 [11]. La primera aproximación tiene la virtud de que automáticamente incluye varios parámetros físicos, tales como la probabilidad de transición a través de un máximo en una función de la energía que decrece

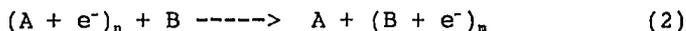
lentamente conforme ésta aumenta. Sus propiedades son expresadas en una forma analítica simple y las condiciones que se utilizaron para obtenerla introducen información que incluye una distancia de cruce R_c , que representa la localización de máxima interacción entre los dos estados electrónicos involucrados; algunas características de los potenciales de aquéllos dos estados en la vecindad de R_c , tales como sus pendientes y el elemento de matriz de acoplamiento H_{nn} evaluado en R_c .

Algunas de las principales limitaciones de la aproximación de Landau-Zener surgen del hecho de que ésta usa solamente los valores de H_{nn} y de las pendientes de los potenciales en R_c y desprecia los fuertes cambios que puedan ocurrir en esas cantidades conforme se aleja de la región de cruce [9]. Como bien se sabe, esto lleva a la falla de la fórmula de Landau-Zener dando una dependencia incorrecta a altas energías [9]. En conclusión, despreciar el efecto de tunelaje cuántico significa que la fórmula de Landau-Zener sobresimplifica el comportamiento del proceso. En la forma dada por Landau-Zener, la teoría no toma en cuenta los detalles de estructura que frecuentemente aparecen. Sin embargo, se puede extender fácilmente, como en la forma dada simultáneamente por Stueckelberg [12], que toma en cuenta el fenómeno de interferencia que causa un tipo de oscilación y que se observa frecuentemente en dispersiones inelásticas [13,14].

La teoría de Landau-Zener es por sí misma estrictamente aplicable sólo cuando el cruzamiento está bien localizado, es decir, cuando H_{nn} es más grande que la diferencia $\Delta V(R)$ entre los

potenciales no perturbados (diabáticos) sobre un intervalo de ancho $2\delta R$ cerca de R_c . Existe una situación en la cual H_{nm} es de magnitud similar a $\Delta V(R)$ sobre un intervalo considerable en R y para esa situación Stueckelberg [15], ha desarrollado un análisis alternativo, el cual ha sido extendido por Demkov [16], y ha sido aplicado en una forma particular por Rapp y Francis [17]. En todos estos casos, se necesita conocer la función H_{nm} tan bien como el comportamiento de los potenciales.

Una descripción del procedimiento de la aproximación Landau-Zener consiste en considerar la transferencia de un electrón desde un estado n de un sistema atómico A a un estado m de un sistema atómico B ,



Sea R el vector de posición relativa de los núcleos (los cuales serán tratados como partículas clásicas) y r el vector de posición del electrón activo respecto al punto medio de la línea internuclear (fijo). Sean $\Psi_n(r|R)$ y $E_n(R)$ la eigenfunción electrónica y el eigenvalor de la energía de la quasi-molécula formada cuando los sistemas de la izquierda de (2) se aproximan adiabáticamente de infinito y sean $\Psi_m(r|R)$ y $E_m(R)$ la eigenfunción y el eigenvalor de la energía correspondientes a los sistemas de la derecha. Se supone que en alguna distancia internuclear R_c hay un pseudocruzamiento de las curvas $E_n(R)$ y $E_m(R)$, con un cambio en las formas de las eigenfunciones. El cruzamiento de los niveles de energía es un fenómeno de considerable discusión [18-20]. Las

características esenciales se pueden ilustrar en el cruzamiento de un estado polar y un homopolar de una molécula.

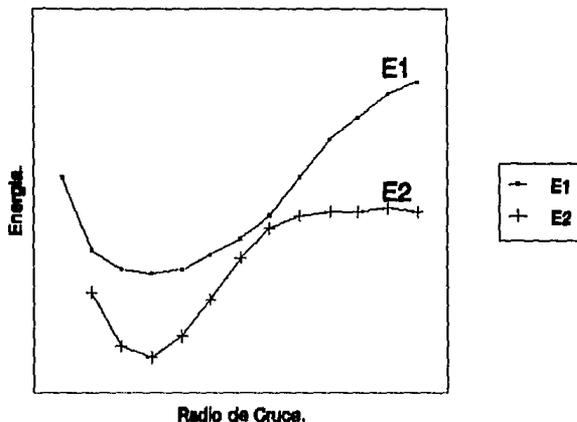


Fig. 1.- Cruzamiento de un estado polar y un homopolar.

Si $\Psi_n(r|R)$ y $\Psi_n(r|R)$ son las dos eigenfunciones electrónicas de la molécula con núcleo estacionario, entonces si se supone que las eigenfunciones tienen la propiedad de que para $R \gg R_c$, Ψ_n tiene características polares y Ψ_n homopolares; mientras que para $R \ll R_c$, Ψ_n tiene características polares y Ψ_n homopolares. En una vecindad de $R=R_c$ se puede decir que esas dos eigenfunciones intercambian sus características.

El teorema adiabático dice que si la molécula está inicialmente en el estado Ψ_n y R cambia lentamente de $R \gg R_c$ a $R \ll R_c$, entonces la molécula permanecerá en el estado Ψ_n . Sin embargo, si R cambia con una velocidad finita, el estado final $\Psi(r|R)$ será una combinación lineal de Ψ_n y Ψ_n :

$$\Psi(r|R) = A_n(R)\Psi_n(r|R) + A_m(R)\Psi_m(r|R) \quad (3)$$

Neumann y Wigner [19], han encontrado condiciones para las cuáles:

$$A_n \approx 0, \quad |A_m| \approx 1 \quad (4a)$$

$$y \quad |A_n| \approx 1, \quad A_m \approx 0 \quad (4b)$$

respectivamente, sin obtener una dependencia explícita de las A's con los parámetros del sistema.

Para que el problema de obtener esta dependencia explícita se pueda reducir a un problema matemático soluble, es preciso especificar las condiciones de la transición tan simples como sea posible, al mismo tiempo que mantener las características esenciales.

Supongamos que Φ_n y Φ_m son tales combinaciones lineales de Ψ_n y Ψ_m , tal que para todos los valores de R, Φ_n tiene las características que Ψ_n tiene en $R \gg R_c$, mientras que Φ_m tiene las características de Ψ_m en $R \gg R_c$. En el ejemplo molecular, Φ_n será un estado polar puro y Φ_m un estado homopolar puro para todas las distancias internucleares. Mientras Φ_n y Φ_m se puedan hacer ortogonales, ellas no van a satisfacer la ecuación de onda estacionaria, es decir

$$H\Phi_n = H_{nn}(R)\Phi_n + H_{nm}(R)\Phi_m \quad (5a)$$

$$H\Phi_m = H_{nm}(R)\Phi_n + H_{mm}(R)\Phi_m$$

(5b)

Las simplificaciones que se hacen para obtener funciones explícitas de A_n y A_m , son las siguientes:

a) $H_{nm}(R_c) \ll$ la energía cinética relativa de los dos sistemas. Bajo esta condición el movimiento de los centros de masa de los dos átomos ó en general de los dos sistemas, se puede tratar con parámetros externos, esto es, que la variable R viene a ser una función conocida del tiempo.

b) La región de transición es tan pequeña, que se puede considerar $H_{nn} - H_{mm}$ como una función lineal del tiempo y $H_{nm}(R)$, $\Phi_n(r|R)$, y $\Phi_m(r|R)$ como independientes del tiempo. Esta condición se satisface con tal de que $H_{nm}(R_c)$ sea suficientemente pequeña. Puesto que sólo las características en la región de transición son de importancia, esta condición facilita cambiar el problema físico por un problema ideal, en el cuál

$$\frac{2\pi}{h} (H_{nn} - H_{mm}) = \alpha t$$

(6a)

$$\dot{H}_{nm} = \dot{\Phi}_n = \dot{\Phi}_m = 0$$

(6b)

para todo tiempo.

Si la velocidad relativa de los dos átomos es constante, la suposición b) tiende a la relación mostrada en la Fig. 2 entre

$H_{nn}(R)$, $H_{nn}(R)$ y los eigenvalores de Ψ_n y Ψ_n , llamados E_n y E_n , respectivamente.

$E_n(R)$, $E_n(R)$ son hiperbólicos y tienen a $H_{nn}(R)$ y $H_{nn}(R)$ como asíntotas. La distancia más próxima entre E_n y E_n , es decir, $E_n(R_c) - E_n(R_c)$, está dada por $2H_{nn}(R_c)$.

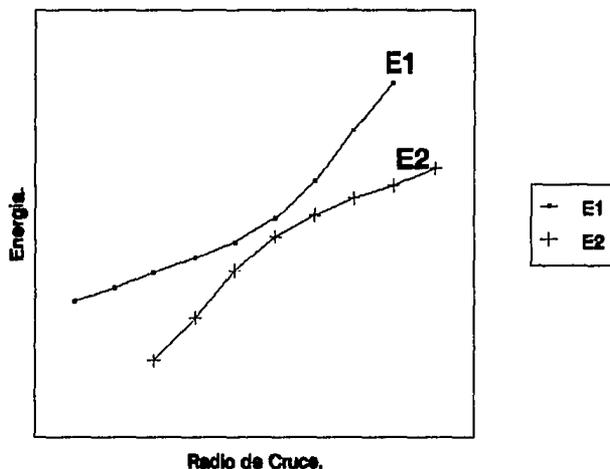


Fig. 2.- Cruzamiento de niveles de energía en el problema ideal. Las líneas llenas son eigenvalores adiabáticos.

En el análisis se ha encontrado usar convenientemente como soluciones a las combinaciones lineales ϕ_n y ϕ_n en lugar de las soluciones adiabáticas exactas Ψ_n y Ψ_n . Además se han encontrado

ventajas de comenzar con la ecuación de onda en la forma [8]:

$$\left(H - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}\right) \left(C_n(t) \text{EXP}\left(\frac{i}{\hbar} \int H_{nn} dt\right) \Phi_n(X) + C_m(t) \text{EXP}\left(\frac{i}{\hbar} \int H_{mm} dt\right) \Phi_m(X) \right) = 0 \quad (7)$$

Las relaciones (5) reducen esta ecuación de onda en dos ecuaciones diferenciales de primer orden, simultáneas en las C's

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial C_n}{\partial t} = H_{nm} C_m \text{EXP}\left(\frac{-i}{\hbar} \int (H_{nn} - H_{mm}) dt\right) \quad (8a)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial C_m}{\partial t} = H_{mn} C_n \text{EXP}\left(\frac{i}{\hbar} \int (H_{nn} - H_{mm}) dt\right) \quad (8b)$$

Las condiciones de frontera bajo las cuales las ecuaciones se resuelven deben corresponder al conocimiento de que inicialmente el sistema está en el estado Ψ_n ó Φ_n , las cuales son equivalentes cuando $R \gg R_c$. Las condiciones son:

$$C_n(-\infty) = 0 \quad (9a)$$

$$|C_n(-\infty)| = 1 \quad (9b)$$

Si se llama $|A_n(R \ll R_c)|^2$ de (3) la probabilidad P de una transición no-adiabática, entonces:

$$P = |C_n(\infty)|^2 = 1 - |C_n(-\infty)|^2 \quad (10)$$

Así, sólo se necesita conocer los valores asintóticos de las soluciones de (8).

La eliminación de C_n de (8) lleva a la ecuación

$$\frac{\partial^2 C_n}{\partial t^2} + \left[\frac{2\pi i}{h} (H_{nn} - H_{nn}) - \frac{H'_{nn}}{H_{nn}} \right] \frac{\partial C_n}{\partial t} + \left(\frac{2\pi H_{nn}}{h} \right)^2 C_n = 0$$

(11)

Sustituyendo las suposiciones (6), junto con la definición

$$f = \frac{2\pi H_{nn}}{h}$$

(12)

y además la sustitución

$$C_n = U_n \text{EXP} \left(\frac{-i\pi}{h} \int (H_{nn} - H_{nn}) dt \right)$$

(13)

la ecuación (11) se reduce a la ecuación de Weber, [21]:

$$\frac{d^2 U_n}{dt^2} + \left(f^2 - \frac{i\alpha}{2} + \frac{\alpha^2 t^2}{4} \right) U_n = 0$$

$$Z = \alpha^{\frac{1}{2}} \text{EXP} \left[\left(\frac{-i\pi}{4} \right) t \right]$$

(14)

que si se sustituye:

$$K = \frac{if^2}{\alpha} \quad (15)$$

se llega a la forma estándar de la ecuación de Weber:

$$\frac{d^2 U_n}{dZ^2} + \left(k + \frac{1}{2} - \frac{Z^2}{4}\right) U_n = 0 \quad (16)$$

La función de Weber $D_{-k-1}(iz)$ es una solución particular de esta ecuación, la cual se anula para z grandes a lo largo de las direcciones $\infty \text{EXP}(-i3\pi/4)$ y $\infty \text{EXP}(-i\pi/4)$. De aquí que la solución

$$U_n(Z) = A_{\pm} D_{-k-1}(\pm iZ) \quad (17)$$

para $\alpha < 0$ satisface la primera condición de frontera (9a).

Las constantes A_{\pm} se determinan de los valores asintóticos (cuando $R \rightarrow \infty$):

$$D_{-n-1}\left[iR \text{EXP}\left(\frac{-i3\pi}{4}\right)\right] = \text{EXP}\left[\frac{i\pi(n+1)}{4}\right] \text{EXP}\left[\frac{iR^2}{4}\right] R^{-n-1}$$

$$D_{-n-1}\left[iR \text{EXP}\left(\frac{-i\pi}{4}\right)\right] = \text{EXP}\left[\frac{-i\pi(n+1)}{4}\right] \text{EXP}\left[\frac{-iR^2}{4}\right] R^{-n-1} \quad (18)$$

por medio de la segunda condición de frontera (9b). Se encuentra

que:

$$|A_+| = |A_-| = \gamma^{\frac{1}{2}} \text{EXP}\left(\frac{-\pi\gamma}{4}\right)$$

$$\gamma = \frac{f^2}{|\alpha|}$$

(19)

Resumiendo:

$$\text{EXP}\left(\frac{i\pi\alpha t}{h}\right) LC_n(t) = L$$

(20)

cuando $t \rightarrow \infty$ y $Z \rightarrow \alpha^{1/2\infty} \text{EXP}(-i3\pi/4)$.

$$U_n(Z) = \gamma^{\frac{1}{2}} \text{EXP}\left(\frac{-\pi\gamma}{4}\right) LD_{-k-1}\left[iREXP\left(\frac{3i\pi}{4}\right)\right]$$

(21)

cuando $R \rightarrow \infty$ y $\alpha > 0$.

$$U_n(Z) = \gamma^{\frac{1}{2}} \text{EXP}\left(\frac{-\pi\gamma}{4}\right) LD_{-k-1}\left[iREXP\left(\frac{i\pi}{4}\right)\right]$$

(22)

cuando $R \rightarrow \infty$ y $\alpha < 0$;

y usando los valores asintoticos:

$$LD_{-k-1} iREXP \frac{i3\pi}{4} = \text{EXP}\left(\frac{i3\pi(k+1)}{4} - \frac{iR^2}{4}\right) R^{-k-1} + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(k+1)} \text{EXP}\left(\frac{ik\pi}{4} + \frac{iR^2}{4}\right) R^k,$$

(23a)

$$LD_{-k-1} iR \text{EXP} \frac{i\pi}{4} = \text{EXP} \left(\frac{-i3\pi(k+1)}{4} + \frac{iR^2}{4} \right) R^{-k-1} + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(k+1)} \text{EXP} \left(\frac{ik\pi}{4} - \frac{iR^2}{4} \right) R^k, \quad (23b)$$

se obtiene:

$$|C_n(\alpha)|^2 = \frac{2\pi\gamma \text{EXP}(-\pi\gamma)}{\Gamma(i\gamma+1)\Gamma(-i\gamma+1)} = 2 \text{EXP}(-\pi\gamma) \sinh(\pi\gamma) = 1 - \text{EXP}(-2\pi\gamma) \quad (24a)$$

$$P = \text{EXP}(-2\pi\gamma) \quad (24b)$$

$$\gamma = \frac{2\pi}{h} \frac{H_{nn}^2}{(d(H_{nn} - H_{mm})/dt)} \quad (24c)$$

A partir de la cual se obtiene la fórmula de Landau:

$$P = \text{EXP} \left(\frac{-2\pi H_{nn}^2}{\hbar v_r (F_n - F_m)} \right) \quad (25)$$

donde v_r es la velocidad relativa y F_n , F_m son las "fuerzas" que actúan sobre los dos estados. Identificando:

$$\frac{d(H_{nn} - H_{mm})}{dt} = (F_n - F_m) \quad (26)$$

el exponente de la fórmula de Landau es también pequeño por un factor de 2 y la fórmula queda:

$$P = \text{EXP} \left(\frac{-2\pi H_{22}^2}{\hbar V_r (d(H_{22} - H_{11})/dt)} \right) \quad (27)$$

Esto significa que de acuerdo al modelo de Landau-Zener, la probabilidad de transición entre dos términos en un pseudocruzamiento correspondiente a una separación R_c ó equivalentemente, la probabilidad de permanecer sobre la curva diabática, esto es, que las partículas colisionantes permanezcan sobre la curva de potencial $A^{q+} + B$ en una curva de cruce

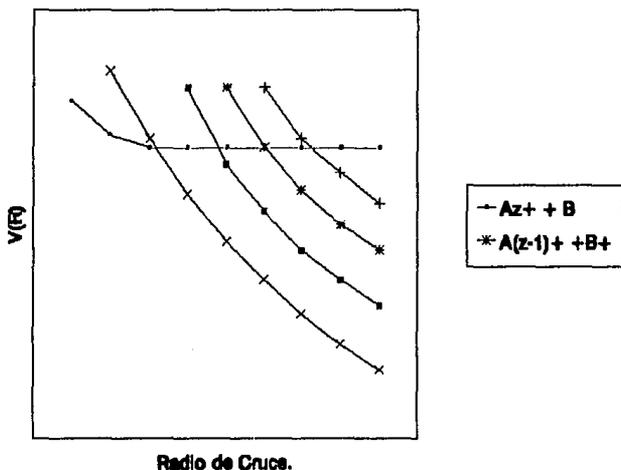


Fig.3.- Curvas de potencial de la reacción de transferencia de un electrón: $A^{q+} + B \rightarrow A^{(q-1)+} + B^+$.

está dada por

$$P = \text{EXP} \left(\frac{-2\pi H_{nn}^2}{\hbar V_r dF} \right) \quad (28)$$

donde

$$dF = \left. \frac{d(H_{nn} - H_{mm})}{dR} \right|_{R_c} \quad (29)$$

es la diferencia en pendientes de las curvas de energía potencial diabáticas en R_c , y V_r la velocidad radial en el punto de cruce y además dada por:

$$V_r = V_0 \left[1 - \frac{H_{nn}(R_c)}{E} - \left(\frac{b}{R_c} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (30)$$

Aquí $H_{nn}(R_c)$ es el elemento relevante de la matriz de acoplamiento; V_0 y E son la velocidad relativa inicial y la energía cinética, respectivamente; $H_{nn}(R_c)$ y $H_{mm}(R_c)$ son los potenciales diabáticos y b es el parámetro de impacto [3,7,8].

Para una colisión real, el sistema pasa dos veces a través del punto de cruce (Fig. 4), antes y después de que el punto de retorno R_0 ha sido alcanzado [3,22].

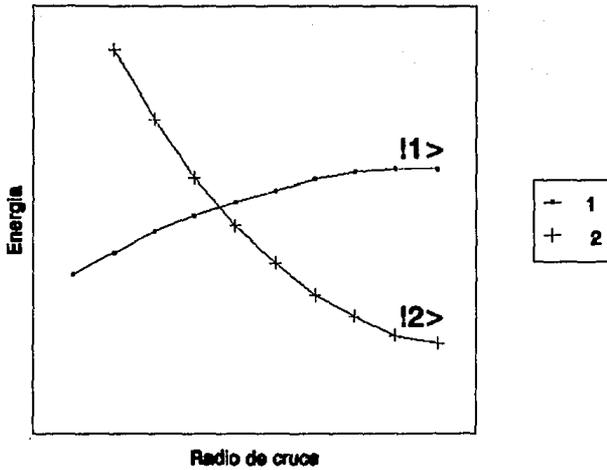


Fig. 4.- Curvas de energía potencial. Dos estados y un cruzamiento.

La probabilidad total corresponde al módulo al cuadrado de la suma de las amplitudes desarrolladas a lo largo de las trayectorias n y m :

$$\begin{aligned}
 P &= |a_n(1-a_n)_1 + a_n(1-a_n)_2|^2 = |2a_n(1-a_n)\text{sen}(d\theta)|^2 \\
 &= 4|a_n(1-a_n)|^2 \text{sen}^2(d\theta) = 4P_n(1-P_n)\text{sen}^2(d\theta) \quad (31)
 \end{aligned}$$

con $d\theta$ la diferencia de fases desarrollada a lo largo de las trayectorias n y m ; y P_n , P_m las probabilidades de transición $n \rightarrow n$ y $m \rightarrow m$, respectivamente.

Promediando la fase se encuentra que

$$P_{n \rightarrow n} = P_{nn} = 2P_n(1-P_n) \quad (32)$$

Esta expresión puede ser generalizada al caso de N estados y

$N-1$ cruzamientos simplemente sumando sobre todas las posibles trayectorias necesarias para hacer la transición del estado 1 al estado j , en donde $2 < j < N$ [3], (Fig. 5).

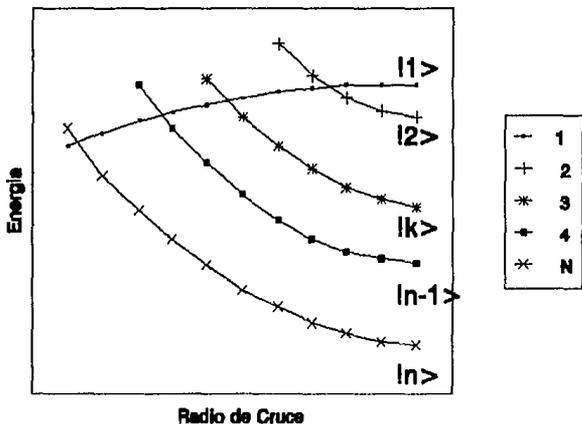


Fig. 5.- N Estados y N-1 Cruzamientos.

Fig. 5.- N estados y N-1 cruzamientos.

Antes debe notarse que empleando la técnica de sumar probabilidades mas bien que amplitudes, los efectos de interferencia son despreciados. El procedimiento puede ser a través de ó como un promedio sobre las probabilidades oscilatorias, las cuales surgen conforme se varían los parámetros de oscilación. Denotando la probabilidad de permanecer sobre la curva diabática en cada cruzamiento, comenzando del cruzamiento más externo, como $P_2, P_3, \dots, P_j, \dots, P_n$ (ver Fig. 5), se encuentra que la probabilidad de que ocurra una transición del estado 1 al estado j correspondiendo a una separación de cruzamiento R_{c_j} durante una

colisión, está dada por:

$$\begin{aligned}
 P_{1j} &= (P_2 P_3, \dots, P_j) \{ 1 + (P_{j+1} P_{j+2}, \dots, P_N)^2 + (1 - P_{j+1})^2 + \\
 &\quad + [P_{j+1}(1 - P_{j+2})]^2 + [P_{j+1} P_{j+2}(1 - P_{j+3})]^2 + \dots + \\
 &\quad + [P_{j+1} P_{j+2}, \dots, P_{N-1}(1 - P_N)]^2 \}, \quad j < N-1 \\
 &= (P_2 P_3, \dots, P_{N-1})(1 - P_{N-1}) [1 + (P_N)^2 + (1 - P_N)^2], \quad j = N-1 \\
 &= 2P_2 P_3, \dots, P_N (1 - P_N), \quad j = N.
 \end{aligned} \tag{33}$$

Regresando al caso de dos estados, ec. (32), después de cálculos algebraicos, la sección transversal total para la transición del estado n al estado m , es ([23-26]):

$$Q = 4\pi R_c^2 \left(1 - \frac{H_{nn}}{E}\right) G(\lambda)$$

con

(34)

$$G(\lambda) = \int_0^\infty \text{EXP}(-\lambda x) [1 - \text{EXP}(-\lambda x)] x^{-3} dx$$

(35)

la exponencial tabulada y λ relacionada con la velocidad V_x y los parámetros de cruzamiento está dada por

$$\lambda = \frac{2\pi I_{nm}^2}{V_0 dF \left(1 - \frac{H_{nm}}{E}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

(36)

I.2.- ELEMENTO DE MATRIZ DE ACOPLAMIENTO REDUCIDO.

Como se ha hecho notar, para aplicar algunos de los métodos de predicción y análisis de los procesos electrónicos inelásticos es crucial conocer los potenciales de los dos estados y particularmente la localización de su cruzamiento R_c (si ahí se localiza la interacción), además de conocer la interacción de acoplamiento $H_{nn}(R)$. Frecuentemente los potenciales están razonablemente bien conocidos en la región de interés, siendo dominados por fuerzas de largo alcance entre las partículas colisionantes y donde también, el cruzamiento u otra interacción ocurre a grandes valores de R . Para esos casos, con frecuencia se pueden obtener fácilmente estimaciones del acoplamiento de la interacción $H_{nn}(R)$. En otros casos en donde los potenciales han sido obtenidos por cálculos de estructura electrónica adiabática, $H_{nn}(R)$ se obtiene automáticamente, puesto que es exactamente un medio de la separación entre las dos curvas adiabáticas en su punto de más cercana aproximación, es decir, en donde se elude el cruzamiento (en ese caso, como bien se sabe, las pendientes necesarias para el uso de la fórmula de Landau-Zener, no son aquellas de los potenciales adiabáticos, sino aquellas de los potenciales aproximados que cruzan y se mueven más lentamente a través de la región de cruzamiento).

Hay muchas clases de procesos inelásticos importantes, tales como el de transferencia de carga y recombinación ion-ion, los cuales ocurren a distancias grandes, donde los potenciales con

frecuencia se pueden estimar razonablemente. En pocos casos, de todos ellos hay que realizar cálculos cuidadosos de orbitales moleculares; igualmente cuando ellos han sido dados, en muchos casos la propiedad de evaluar $H_{nn}(R_c)$ requiere un valor más exacto en los puntos en R que los cálculos que se pueden proporcionar. Por tanto hay una considerable necesidad de métodos formales simples para la estimación de H_{nn} a partir de parámetros atómicos y moleculares simples.

Naturalmente, la magnitud de H_{nn} y los parámetros sobre los cuales ésta depende, varían con los procesos físicos involucrados en las transiciones electrónicas en consideración. Sin embargo, las transiciones pueden ser divididas en dos clases: aquéllas en las cuales hay una transferencia de electrón en el curso del proceso de excitación y aquéllas en las cuales no hay. Puesto que el proceso de transferencia de un electrón es de gran importancia física y particularmente son fáciles de medir, hay mucha información sobre ellos. Además también existe mucha información sobre la excitación sin transferencia de electrón y la disposición de información experimental está creciendo rápidamente. Puesto que los principios involucrados en los dos casos son algo diferentes, se consideran separadamente. El caso que nos interesa es donde existe transferencia de electrón [5].

El elemento de matriz de acoplamiento involucrado en la transferencia de un electrón ha sido evaluado muchas veces en conexión con procesos de transferencia específicos y sistemas de colisión particulares. Hace años Hasted y Chong [27], compilaron

los datos disponibles y sugirieron una correlación empírica del logaritmo de H_{nn} vs. R_c que se utilizó varias veces para estimar el acoplamiento de otros casos [28]. Sin embargo, información teórica y experimental acumulada en años siguientes llevaron a la formulación de la estimación de los elementos de la matriz de acoplamiento para sistemas de transferencia de un electrón.

Un problema que surge al obtener H_{nn} vs. R_c es que la probabilidad de transferencia de un electrón es extremadamente sensible a las energías de los estados específicos involucrados. Esto es de gran importancia para extraer información del acoplamiento a partir de datos experimentales y es útil para la identificación tanto del estado inicial como del final que participan en el proceso. Sin embargo, haciendo uso de los cálculos teóricos, esto no presenta problema. Experimentalmente, mucha de la información disponible puede ser atribuida a situaciones que involucran cruzamientos localizados y ello no ayuda a emprender una re-examinación exhaustiva y crítica de los valores de H_{nn} que han sido estimados de resultados experimentales. Una de las ventajas señaladas es que, a través de consideraciones dimensionales, la fórmula de Landau-Zener permite separar, claramente, las mediciones de la localización del cruzamiento R_c de aquéllas de la interacción $H_{nn}(R_c)$.

De acuerdo a la fórmula de Landau-Zener en su forma simple, las secciones transversales totales para procesos inelásticos y de transferencia de carga, vía curvas de cruzamiento, se espera que sean dominados por un único máximo. Cálculos detallados usando

modelos más realistas demuestran un doble máximo [8-10], además de observarse varios tipos de oscilaciones debido a fenómenos de interferencia. No obstante, para procesos semicuantitativos, la estructura fundamental sobre la cual las oscilaciones se pueden superponer, es con frecuencia descrita razonablemente bien por una forma del tipo Landau-Zener.

Lo que generalmente se mide es la sección transversal como una función de la energía y esta dependencia de la energía para la excitación de un estado específico generalmente demuestra un único y bien definido máximo; la magnitud de la sección transversal en este máximo nos da información acerca de R_c y la velocidad en este máximo V_{max} nos proporciona información acerca de H_{mn} . En función de la velocidad V , la sección transversal se puede escribir generalmente como

$$Q = \pi R_c^2 P(V) \tag{37}$$

donde la forma de $P(V)$ es esencialmente una probabilidad promediada del parámetro de impacto, dependiendo sobre la velocidad y los parámetros específicos de la interacción. De acuerdo a la fórmula de Landau-Zener, el valor de $P(V)$ en este máximo es cercano a 1/2 para el caso de dos estados y es independiente de todos los demás parámetros del problema (modelos más sofisticados al de Landau-Zener cambiarían esta característica de simplificación, pero darían resultados probablemente con pocas variaciones en el valor de $P(V)$ en el máximo). Así, del valor máximo de Q se puede estimar R_c . Con frecuencia esta estimación puede ser comparada con aproximaciones

teóricas simples basadas en un conocimiento del comportamiento esperado de los potenciales de los dos estados en interacción.

La dependencia funcional de la velocidad de $P(V)$ depende esencialmente sobre la razón entre V y una velocidad característica $V^* = [2\pi H_{nn}^2(R_c)]/h |d(H_{nn} - H_{nn})/dR|$, donde $d(H_{nn} - H_{nn})/dR$ es la diferencia en las primeras derivadas de los potenciales de cruzamiento con respecto a R , evaluada en R_c . Del conocimiento de V_{max} , V^* se puede estimar inmediatamente. Ordinariamente los potenciales son bastante conocidos como para estimar la diferencia en sus pendientes y así poder también estimar la incógnita importante $H_{nn}(R_c)$.

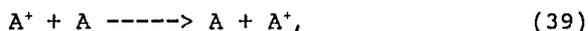
En las tablas I y II de la referencia [5], se compila una presentación de datos que demuestran valores de H_{nn} como una función de R_c determinados de un gran número de cálculos específicos y experimentos. Además, se presentan en la Fig. 1 de la misma referencia en forma de un diagrama reducido en el cual el escalamiento de ambos H_{nn} y R_c está basado sobre una suposición específica acerca de la interacción. Esta suposición es esencialmente que la transferencia del electrón ocurre a distancias grandes mediante tunelaje a través de una barrera de potencial. Consecuentemente, se puede decir, que la transferencia de un electrón es debido a la cola de la exponencial en la función de onda de los estados base del electrón participante en la transición. Esta cola de la exponencial se puede describir aproximadamente por una forma hidrogenoide con una carga efectiva apropiada. En la forma usual ésta involucra una relación simple

entre el potencial de ionización efectivo del electrón en cuestión y la distancia característica para la caída de la función exponencial. Específicamente se puede escribir:

$$H_{nm} = A \text{EXP}(-R_c^*) = A \text{EXP}\left(-\frac{R_c}{C}\right) \quad (38)$$

donde A es una función del potencial de ionización efectivo y puede ser una función que varíe lentamente con R_c .

Se pueden hacer estimaciones para las formas funcionales de A y C. Si se revisan primeramente los trabajos de Rapp y Francis [17], y posteriormente el de Smirnov [29]. Para el sistema de transferencia de carga resonante



Rapp y Francis [17], usando funciones de onda de un electrón emplearon una parametrización del acoplamiento:

$$H_{nm} = \frac{RI}{a_0} \text{EXP}\left[\frac{-R\left(\frac{I}{I_H}\right)^{\frac{1}{2}}}{a_0}\right] \quad (40)$$

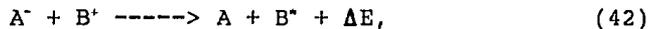
donde $I_H = e^2/2a_0 = 13.6 \text{ eV}$ es el potencial de ionización del

hidrógeno, I es el potencial de ionización de A y R es la separación internuclear. Ellos han ido más adelante y aplicado la ecuación (40) a sistemas de transferencia de carga cuasi-resonante



donde ahora I es cambiado por el potencial de ionización promedio de A y B.

Smirnov [29], por su parte ha estudiado reacciones de recombinación ion-ion del tipo



en el cual el átomo B puede estar en su estado base ó excitado. Usando funciones de onda asintóticas, este autor parametrizó el acoplamiento por:

$$H_{nm} = \left(\frac{\gamma \alpha^2 A^2}{2R_c^2} \right) \left(\frac{4}{e} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \frac{(\alpha R_c)^{\frac{2}{\alpha}} (2l+1)}{\Gamma\left[\left(\frac{1}{\alpha}\right) + l + 1\right] \Gamma\left[\left(\frac{1}{\alpha}\right) - l\right]} \right)^{\frac{1}{2}} \text{EXP}\left[\frac{-(\alpha + \gamma) R_c}{2} \right] \quad (43)$$

donde el ion negativo A^- se supone que está en el estado s (para H^- , la constante $A^2 = 2.65$); $\gamma^2/2$ es igual a la afinidad del electrón de A y $\alpha^2/2$ es el potencial de ionización efectivo del estado excitado B^* ó si B no está excitado, el potencial de ionización de

B. Todas las cantidades están en unidades atómicas.

La característica común de ambas ecuaciones, ec. (40) y (43), está en que la matriz de acoplamiento decrece como una función exponencial de la distancia de cruzamiento R_c multiplicada por un factor que está relacionado con el comportamiento asintótico de la función de onda inicial y final. Tomando las aproximaciones anteriores y realizando una revisión de los trabajos de Iovitsu y Pallas [30], se parametrizó A y C de la ecuación (38) por:

$$C = \frac{2}{(\alpha + \gamma)} \quad (44)$$

y

$$A = \frac{(I_1 I_2)^{\frac{1}{2}} R_c}{C} \quad (45)$$

donde $\alpha^2/2$ es igual al potencial de ionización efectivo I_1 del electrón, el cual es transferido de los reactantes, y $\gamma^2/2$ es igual al potencial de ionización efectivo I_2 , de este electrón en su estado producto. Entonces, para una gráfica semi-logarítmica se pueden usar los parámetros reducidos:

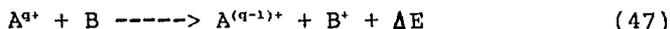
$$R_c^* = \frac{[(\alpha + \gamma) R_c]}{2} \quad (46a)$$

$$H_{nm}^* = \frac{H_{nm}}{(I_1 I_2)^{\frac{1}{2}}}$$

(46b)

en las cuales todas las cantidades están en unidades atómicas y α y γ son propiedades atómicas obtenibles fácilmente.

En la Fig.1 de la referencia mencionada [5], se pueden ver los resultados en una gráfica, donde hay combinación tanto de valores teóricos como experimentales para el elemento de matriz de acoplamiento. Los autores de los datos son referenciados en las Tablas I y II de dicha referencia [5]. La gráfica involucra no sólo datos de reacciones de transferencia de carga del tipo



sino que además involucra datos de reacciones de recombinación ion-ion. La línea recta a través de todos los puntos, ajustada por mínimos cuadrados es:

$$H_{nm}^* = 1.044 R_c^* \text{EXP}(-0.857 R_c^*) \quad (48)$$

en la cual el 83% de los datos se encuentran dentro de un factor de 3 a esta línea. Se probaron otras formas funcionales, pero la ecuación (48) mantuvo la suma más baja de los cuadrados de los errores (95% de credibilidad al factor pre-exponencial), el cuál se mantuvo entre 0.5 y 2.3, mientras que el mismo porcentaje de

credibilidad para el factor exponencial, el cual estuvo en 0.857 ± 0.080 .

Dentro de las bases de esta aproximación está la suposición de que las funciones de onda son muy cercanas a hidrogenoides y que las partículas están lo bastante separadas, así que la transferencia del electrón se determina en forma simple por el tunelaje subsecuente. Si la distancia internuclear es también pequeña, el electrón puede escapar por la cúspide de la barrera de potencial sin haber tunelaje, ó bien la barrera puede ser reducida a un cierto grado debido a la cercana proximidad de la segunda partícula y por lo tanto el tunelaje no será descrito por la simple exponencial adiabática. Bajo tales condiciones de cercana proximidad, la distribución supuesta, la cual está esencialmente basada sobre un modelo de átomos separados ó de moléculas perturbándose una a otra ligeramente, no es completamente válida y la verdadera situación está mejor descrita por una descripción molecular en la cuál el electrón no está muy bien localizado en uno ó en otro centro, pero éste viaja libremente en una órbita molecular del sistema combinado. A groso modo, la distribución atómica no es válida y se debe adoptar un sistema molecular al menos para el único electrón en consideración a distancias críticas menores que $a_0(13.6/I_0)^{1/2}$, donde I_0 es el potencial de ionización del electrón (en eV) en su estado base.

Aplicando la teoría anterior de estimación de los elementos de matriz de acoplamiento para sistemas de transferencia de un electrón a un sistema de cruzamiento de curvas de potencial para

dos estados, el procedimiento para obtener el elemento de matriz de acoplamiento y la distancia de cruce a partir de datos experimentales de secciones transversales, está basado en el método de Landau-Zener.

La sección transversal de Landau-Zener en forma cerrada está dada por (34), donde $G(\lambda)$ es la integral tabulada y λ está relacionada con la velocidad incidente V y los parámetros de cruzamiento por (36). Puesto que $G(\lambda)$ tiene un máximo de 0.113 cuando $\lambda=0.424$, la magnitud y posición de las secciones transversales dadas experimentalmente pueden dar información acerca de R_c y H_{nn} .

Para algunos sistemas, $H_{nn}(R_c) \ll E$ ó bien se puede estimar $H_{nn}(R_c)$, así que de la magnitud de la sección transversal en éste máximo, Q_{\max} , se puede determinar R_c de

$$Q_{\max} = 0.452\pi R_c^2 \tag{49}$$

El elemento de matriz de acoplamiento se determina a partir de la velocidad de colisión en el máximo, V_{\max} , y de las derivadas de los potenciales, si estas últimas se conocen,

$$H_{nn} = \frac{0.424}{2\pi} V_{\max} \frac{d|H_{nn}(R_c) - H_{nn}(R_c)|}{dR} \tag{50}$$

Para transferencia de carga cuasi-resonante, las derivadas de los potenciales son conocidas, puesto que la transferencia ocurre a valores grandes de R , en donde los potenciales son

predominantemente de la forma

$$U(R) = -a_p / 2R^4 \quad (51)$$

en la cual a_p es la polarizabilidad dipolar.

Para el análisis de las reacciones de transferencia de iones múltiplemente cargados del tipo dado por la ecuación (47), se pueden usar las ecuaciones (49) y (50), estableciendo que únicamente dos estados dominan la reacción. A distancias internucleares grandes, el potencial inducido por la polarización de dipolo de los reactantes se puede despreciar en comparación con el campo Coulombiano de los productos y entonces se encuentra que las derivadas necesarias en la ecuación (50) están dadas por:

$$|H'_{mn}(R_c) - H'_{nm}(R_c)| = (n-1)e^2 / (R_c)^2 \quad (52)$$

y además que $R_c = (n-1)e^2 / \Delta E \quad (53)$

Una suposición similar se puede hacer para el caso de reacciones de recombinación ion-ion.

I.3.- MODELO DE ESFERA ABSORBENTE.

Como se ha hecho notar, el método de Landau-Zener se ha usado para calcular secciones transversales de reacciones de recombinación ion-ion y transferencia de carga como función de la energía para varios sistemas sencillos y se ha encontrado que éste funciona sorpresivamente muy bien. Los cálculos de multiestados Landau-Zener incluyen muchos estados y como ejemplo en la reacción $N^+ + O^-$, existen aproximadamente 25 canales (niveles electrónicos excitados) disponibles para la reacción. Si pasamos a sistemas moleculares, se encuentra que el número de canales disponibles aumenta dramáticamente a causa de un gran número de estados electrónicos, vibracionales y rotacionales disponibles. Esto lleva a la suposición de que para sistemas más complicados la situación física se puede aproximar usando una densidad alta de estados de cruce. Entonces usando el método de Landau-Zener y los elementos de la matriz de acoplamiento semi-empíricos, podemos obtener la distancia de cruce crítica R_c , dentro de la cual existe la reacción. De R_c , las secciones transversales totales se pueden calcular asumiendo un modelo de esfera absorbente [23,24], es decir, probabilidad unitaria para la reacción dentro de R_c . Visto de otra manera, el modelo de esfera absorbente es una extensión del método de Landau-Zener aplicado al caso en donde hay un gran número de curvas de cruce.

I.4.- MODELO DE BOHR-LINDHARD.

El modelo de Bohr-Lindhard describe clásicamente el proceso de captura de un electrón de un blanco por un proyectil altamente cargado en dos pasos [6,31]. Un criterio para la validez de esta aproximación es que la cantidad

$$X = \frac{2q}{V_{pr}} \quad (54)$$

sea más grande que la unidad [32], en contraposición a la mecánica cuántica, en donde $X \ll 1$ [33]. Aquí q es la carga del proyectil y V_{pr} la velocidad del proyectil (en unidades atómicas). Además se supone que el proyectil está altamente cargado, que hay un cuasi-continuo de estados disponibles para la captura. En el modelo de Bohr-Lindhard, el blanco se mueve en una órbita clásica con velocidad $V = (2E_b)^{1/2}$ y radio $a = \mu/V$ con E_b la energía de enlace y μ un número cuántico efectivo, el cual es 1 para los electrones en la capa k . Si la distancia entre los componentes ion del proyectil y el núcleo blanco es más pequeña que la distancia libre R_R , definida por

$$\frac{V^2}{a} = \frac{q}{R_R^2} \quad (55)$$

entonces la fuerza de enlace atómica es vencida por la fuerza atractiva entre el electrón y el proyectil y por lo tanto el electrón es liberado del átomo. Nótese que $R_R = (\mu q)^{1/2} (2E_b)^{-3/4}$ no depende de la velocidad del proyectil.

Este proceso de liberación no es instantáneo, sino que le toma un tiempo

$$\tau = \frac{a}{V} = \frac{\mu}{2E_B} \quad (56)$$

Además, se supone que el electrón es alojado aproximadamente en la vecindad del blanco (núcleo) y que su velocidad es pequeña comparada con V_{pr} .

Subsecuentemente un electrón alojado puede ser capturado si su distancia desde el proyectil en el tiempo de liberación es más pequeña que la distancia de captura R_c , definida por:

$$\frac{a}{R_c} = \frac{V_{pr}^2}{2} \quad (57)$$

Es decir, la energía cinética del electrón alojado en el sistema del proyectil tiene que ser más pequeña que su energía potencial en el campo del proyectil.

Si el proceso de despojo es completado mientras el proyectil se mantiene dentro de la distancia de captura, entonces la sección transversal para la captura es:

$$Q_c = \pi R_R^2 \quad (58)$$

y conforme se incrementa la velocidad del proyectil la distancia de

captura $R_c=2q/V_{pr}^2$ decrece y sólo la fracción $f=R_c/\tau V_{pr}$ se libera durante este tiempo cuando la captura es posible. Por tanto se supone un cambio de despojo constante $dP/dt=1/\tau$ y se sigue que la sección transversal de captura de un electrón en la región de altas velocidades es:

$$Q_c = \pi f R_c^2 = \frac{16\pi E_B q^3}{\mu V_{pr}^7} \quad (59)$$

Un método clásico simple para la captura de un electrón derivado de este modelo de Bohr-Lindhard es el de la dependencia del parámetro de impacto b . La dependencia de la captura del parámetro de impacto b se deriva de las suposiciones de éste. Un proyectil con estado de carga q y velocidad V_{pr} se mueve sobre una trayectoria recta con parámetro de impacto b (ver Fig. 6).

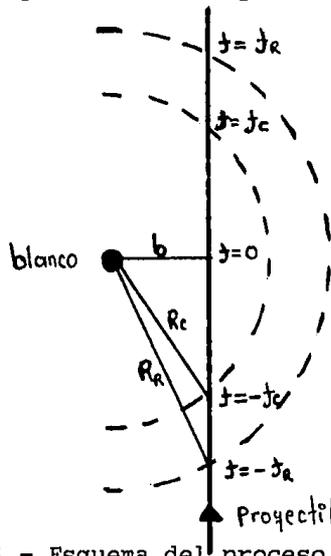


Fig. 6.- Esquema del proceso de captura.

Se introduce una escala de tiempo, así en $t=0$ es la aproximación más cercana entre proyectil y blanco. El liberamiento comienza en $t=-t_r$ cuando la distancia entre proyectil y blanco es más pequeña que R_r . La liberación es completada en el tiempo $t=-t_r+\tau$, si el proyectil se mantiene dentro de la distancia de liberación R_r del blanco o de otra forma, si éste se detiene en el tiempo $t=t_r=(R_r^2-b^2)^{1/2}/V_{pr}$. Para el cambio de liberación se sigue que $dP/dt=1/\tau$ para $-t_r < t < \min(-t_r+\tau, t_r)$ y $dP/dt=0$ de otra manera.

La captura de un electrón liberado es posible cuando la distancia entre el proyectil y el blanco es más pequeña que R_c , es decir,

$$-t_c < t < t_c = (R_c^2 - b^2)^{1/2} / V_{pr} \quad (60)$$

Así, la probabilidad de captura es:

$$P(b) = \int^{t_c} \left(\frac{dP}{dt} \right) dt \quad (61)$$

Para cálculos relevantes de transferencia no-resonante y procesos de excitación (NTE) permanecen las condiciones $R_c < R_r$ y $-t_r + \tau > t_c$. En este caso el liberamiento se lleva a cabo en el tiempo cuando es posible la captura y se encuentra que $dP/dt=1/\tau$ y por tanto

$$P(b) = \int^{t_c} \left(\frac{1}{\tau} \right) dt = \frac{2}{\tau} \frac{(R_c^2 - b^2)^{\frac{1}{2}}}{V_{pr}} \quad (62)$$

Para la probabilidad de captura de un electrón en la región de

altas velocidades.

La sección transversal resultante para un blanco de un electrón es:

$$Q_c = \frac{64\pi E_b Q^3}{3v V_{pr}^7}$$

(63)

que difiere de la obtenida por Bohr-Lindhard, ya que ellos suponen implícitamente el hecho $P(b) = P(0) = t_c(0)/\tau = \text{cte.}$

La probabilidad de captura de un electrón de un blanco de muchos electrones $P_{cap}(b)$ se puede escribir como

$$P(b) = 1 - \prod [1 - P_i(b)]$$

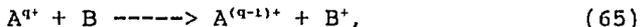
(64)

donde $P_i(b)$ es la probabilidad de captura de un electrón específico del blanco. En la región de altas velocidades, la probabilidad de captura $P_i(b) = 2(R_c^2 - b^2)^{1/2} / \tau_i V_{pr}$ para los diferentes electrones del blanco difiere sólo en el valor $\tau_i = \mu / 2E_{bi}$, la cual depende del número cuántico efectivo μ y la energía de enlace E_{bi} .

II.- MODELO DE CAPTURA DE CARGA ENTRE IONES MULTIPLEMENTE CARGADOS CON ESPECIES NEUTRAS, [24].

II.1.- MODELO DE ESFERA ABSORBENTE DE OLSON-SALOP PARA LA CAPTURA ELECTRONICA SIMPLE ENTRE IONES MULTIPLEMENTE CARGADOS Y ESPECIES NEUTRAS.

Recientemente, el método de Landau-Zener modificado se ha aplicado a sistemas de multicruce para calcular secciones transversales de captura de un electrón de un gran número de sistemas en colisión de iones múltiplemente cargados-hidrógeno atómico, molecular y helio [3,4]. Para estos sistemas de un electrón se pueden obtener fácil y rápidamente valores aproximadamente razonables del elemento radial de la matriz de acoplamiento. Aproximando al sistema en colisión más en general, representado por la reacción



como un sistema de un electrón en el cual el electrón activo se mueve entre centros de carga $1+$ y $q+$, respectivamente, se ha tomado ventaja para desarrollar una teoría de aproximación que puede ser usada para calcular secciones transversales de la reacción (65). Entonces usando estos elementos de matriz y una extensión del método de Landau-Zener aplicado al caso en donde hay un gran número de curvas de cruce (modelo de esfera absorbente) [23,24], se encuentra que es posible evaluar las secciones transversales más rápidamente para un gran número de sistemas en colisión. A causa de la aproximación, el modelo es más aplicable a reacciones de

intercambio de un electrón con q grandes ($q \geq 10$) ó casos de q pequeñas en donde hay un gran número de niveles excitados disponibles para la reacción [24].

Para explicar mejor el mecanismo de colisión para la reacción (65), veamos el esquema de las curvas de potencial que se muestra en la Fig. 3. El canal inicial, $A^{q+} + B$, es ligeramente atractivo a distancias internucleares grandes debido a una interacción de las polarizaciones entre el ion y el átomo y tiene forma de un pozo de potencial repulsivo a distancias internucleares pequeñas. Los canales producto $A^{(q-1)+} + B^+$, en turno, tienen una forma de Coulomb repulsivo $(z-1)/R$, y cruzan el estado inicial. El fuerte acoplamiento ocurre en esas curvas de cruzamiento las cuales conducen a la transferencia del electrón. Además, para q 's suficientemente grandes, el número de curvas de cruzamiento es más grande a causa de un gran número de estados de $A^{(q-1)+} + B^+$ que cruzan a la curva de potencial $A^{q+} + B$.

El gran número de curvas de cruce permite hacer ciertas suposiciones de simplificación sobre cómo calcular las secciones transversales. Como un punto de partida, se sabe la probabilidad de transición de que las partículas colisionantes permanezcan sobre la curva de potencial $A^{q+} + B$ en una curva de cruzamiento. La fórmula está dada por [8],

$$P = \text{EXP} \left(\frac{-2\pi H_{120}^2}{\hbar V_1 dF} \right)$$

(66)

De trabajos teóricos sobre transferencia de un electrón para

neutralización mutua ion-ion (un proceso análogo en el que el estado inicial es un potencial de Coulomb atractivo que es cruzado por las curvas de potencial relativamente planas de los productos neutros), se ha encontrado que para un sistema donde hay un gran número de estados de cruce, un modelo de esfera absorbente se puede emplear correctamente [23], es decir, se asume probabilidad unitaria para la reacción dentro de alguna distancia crítica R_c determinada por los parámetros de cruce. Por tanto, la sección transversal de intercambio de carga está dada simplemente por

$$Q = \pi R_c^2 \quad (67)$$

De [23], se sabe que las condiciones para obtener R_c están dadas por

$$0.15 = \frac{2\pi H_{im}^2(R_c)}{V_0 dF(R_c)} \quad (68)$$

donde V_0 es la velocidad incidente. Puesto que la región de fuerte interacción ocurre a distancias internucleares grandes, es razonable representar dF de la ec. (68) por

$$dF = \frac{(z-1)}{R^2} \quad (69)$$

donde se supone que la forma del potencial dominante es constante para el estado inicial y Coulombiano repulsivo para los estados producto.

Como siempre, el problema más difícil está en desarrollar una formulación para los elementos de la matriz de acoplamiento que se pueda aplicar fácilmente de caso a caso. El primer paso de Olson y Salop fue obtener los H_{nm} 's para un gran número de sistemas iones múltiplemente cargados-hidrógeno atómico. Estos fueron determinados, en una extensión de cálculos previos [3,4], de un análisis del pseudocruzamiento observado en las curvas de potencial adiabáticas derivadas de cada sistema usando el programa OEDM(moléculas diatómicas de un electrón) de Power [34]. El intervalo de q en esos cálculos fue de 4-54. El siguiente paso fue encontrar una forma funcional para esos parámetros. Sabiendo que los elementos de matriz deben decrecer exponencialmente, llegaron, después de intenso ensayo y error, a los parámetros reducidos

$$H_{nm}^* = Z^{\frac{1}{2}} H_{nm} \quad (70)$$

$$R_c^* = \frac{R_c}{Z^{\frac{1}{2}}} \quad (71)$$

donde todas las cantidades están en u.a.. El error promedio de la forma funcional obtenida

$$H_{nm}^* = 9.13 \text{EXP}(-1.324 R_c^*) \quad (72)$$

es de sólo el 17%. Para sistemas donde el blanco no es hidrógeno atómico, el exponente de la exponencial se multiplica por

$$\alpha = \left[\frac{I_t (\text{eV})}{13.6} \right]^{\frac{1}{2}}$$

(73)

donde I_t es el potencial de ionización del átomo blanco [5,17]. Para blancos moleculares, una de las modificaciones es multiplicar a la ec. (72) por la raíz cuadrada de Y , el factor de Franck-Condon para la transición específica entre los niveles de vibración [35]. Así, la forma funcional generalizada para el elemento de matriz de acoplamiento es

$$H_{nm}^* = 9.13 Y^{\frac{1}{2}} \text{EXP}(-1.324 \alpha R_c^*)$$

(74)

y combinando las ecs. (68), (69) y (74) se encuentra la relación de la cual se puede determinar R_c

$$R_c^2 \text{EXP}\left(\frac{-2.648 \alpha R_c}{Z^{\frac{1}{2}}}\right) = \frac{2.864 \times 10^{-4} Z (Z-1) V_0}{g}$$

(75)

La sección transversal se puede obtener fácilmente de la ec. (67) teniendo en cuenta que hay un gran número de curvas de cruce a la separación internuclear, alrededor de R_c . Si ésta condición no se mantiene en el valor calculado de R_c , entonces se pueden fácilmente obtener estimaciones prácticas de las secciones transversales por una modificación ligera del procedimiento. En este caso, se sustituye un valor más pequeño para R_c en la

evaluación de Q , generalmente correspondiendo a un radio de cruce más interno que localiza a un conjunto mayor de cruces. El error probable en el cálculo de secciones transversales debe incrementarse significativamente en tales casos.

Igualmente para sistemas que involucran iones múltiplemente cargados de q pequeñas colisionando con hidrógeno atómico, donde la simetría adicional para el problema de Coulomb de dos centros reduce considerablemente el número de cruzamientos, la aplicación del modelo presente lleva a resultados útiles. En este caso, se sustituye para el valor de R_c calculado de la ec. (75), el radio de cruce más pequeño. En principio se espera que las secciones transversales obtenidas con el modelo de esfera absorbente sean considerablemente más grandes que las obtenidas previamente por Landau-Zener [3]. Sin embargo, la aproximación es razonable cuando se considera que el método de Landau-Zener, que desprecia el efecto túnel y transiciones debido al acoplamiento rotacional, da actualmente límites por abajo a las secciones transversales experimentales.

En conexión con lo anterior, se nota que aunque el modelo presente está basado esencialmente sobre un mecanismo de acoplamiento radial, implícitamente hay contribuciones debido al acoplamiento rotacional que están incluidos en los cálculos de secciones transversales. De hecho, se espera que una porción significativa de la probabilidad unitaria para la reacción dentro de R_c , es debido a productos estado que son formados vía un mecanismo de acoplamiento rotacional. Sin embargo, puesto que el elemento de

matriz de acoplamiento rotacional L_y , está directamente relacionado a la integral de trayectoria entre estados moleculares de la misma simetría, parece improbable que un acoplamiento rotacional significativo ocurra a distancias internucleares más grandes que R_c , donde la trayectoria llega a ser despreciable.

Para iones múltiplemente cargados colisionando con blancos de hidrógeno atómico o de deuterio, se puede evaluar fácilmente la distancia de cruzamiento para un nivel excitado dado n de un ion formado únicamente por un electrón, usando

$$R_c = \frac{2(z-1)}{\left[\left(\frac{z}{n}\right)^2 - 1\right]} \quad (76)$$

En la ecuación (76), las mismas suposiciones que se hicieron para obtener la ec. (69) se utilizaron para obtenerla. Para casos donde el ion reactante es múltiplemente cargado de manera parcial, es necesario recurrir al uso de tabulaciones de los niveles de energía [36].

**II.2.- AUTOMATIZACION DEL MODELO DE ESFERA ABSORBENTE
DE OLSON-SALOP (PROGRAMA EN LENGUAJE Q-BASIC, VERSION 4.5).**

```

1  DIM SEP(200), ENER(200), CAR(200), FILA(200), XCP(200)
5  PRINT "CALCULA LA SECCION TRANSVERSAL TOTAL POR EL MODELO
    OLSON-SALOP."
7  PRINT : PRINT : PRINT : PRINT
10 INPUT "DAME EL NOMBRE DE LA REACCION"; R$
    LPRINT R$
11 INPUT "DAME LA MASA DEL PROYECTIL Y BLANCO (uma)"; M1, M2
12 INPUT "DAME EL POTENCIAL DE IONIZACION DEL BLANCO (eV)"; P
95 PRINT "SI QUIERES VARIAR LA ENERGIA PON 1"
96 PRINT "SI QUIERES VARIAR EL ESTADO DE CARGA PON 2"
97 INPUT "QUIERO VARIAR LA ENERGIA O EL ESTADO DE CARGA"; PA
98 IF PA = 1 THEN 101
99 IF PA = 2 THEN 112
100 GOTO 97
101 INPUT "DAME LA ENERGIA INCIDENTE, FINAL E INCREMENTO(KeV)"; E1,
    E2, DE
    LPRINT E1, E2, DE
102 INPUT "DAME EL ESTADO DE CARGA"; Z
    LPRINT Z
103 IO = E1
104 FI = E2
105 DI = DE
106 GOTO 120
112 INPUT "DAME EL ESTADO DE CARGA INICIAL, FINAL E INCREMENTO";
    Z1, Z2, DZ
    LPRINT Z1, Z2, DZ
113 INPUT "DAME LA ENERGIA INCIDENTE"; E1
    LPRINT E1
114 ZO = Z1
115 ZF = Z2
116 DZ = DZ
117 Z = Z1
118 GOTO 120
120 PI = 3.14159
121 MR = M1 * M2 * 1.66054021D-27 / (M1 + M2)
122 NM1 = M1 * 1.66054021D-27
123 EK = 1000 * 1.6021773349D-19
124 TV = SQR(2 * EK / NM1)
125 V1 = TV * SQR(E1)
126 V2 = TV * SQR(E2)
127 DV = TV * SQR(DE)
128 NV1 = V1 / 2187700#
129 NZ = SQR(Z)
130 NI = P / 27.21
131 W = 13.6 / 27.21
    N9 = .696
132 A = SQR(NI / W)
133 B = Z * (Z - 1) * NV1 * .0002864#
134 K = A * 2.648 / NZ
135 IF PA = 2 THEN 300 ELSE 150
150 CLS
    PRINT
    'PRINT "CALCULA LA RAIZ POR EL METODO DE NEWTON"
    PRINT : PRINT

```

```

'PRINT "Z"; Z
PRINT : PRINT
'PRINT "DAME EL VALOR INICIAL DE LA APROXIMACION": X1
X1 = 2 * NZ
"DAME LA EPSILON DE APROXIMACION"
DX = .01
"CALCULA LA SECCION POR EL MODELO OLSON-SALOP,VARIANDO LA
ENERGIA"
DEF FNHA (X) = (X * X * EXP(-K * X)) - B1
DEF FNGE (X) = (2 * X * EXP(-K * X)) - (K * X * X * EXP(-K *
X))
K7 = 0
I = IO - DI
170 IF I = FI THEN 800
I = I + DI
K7 = K7 + 1
ENER(K7) = I
X7 = TV * SQR(I)
NX7 = X7 / 2187700#
B1 = Z * (Z - 1) * NX7 * .0002864#
200 Y = FNHA(X1)
S = FNGE(X1)
DX = .01
'PRINT "FUNCIONES", Y, S
IF S <> 0 THEN 215 ELSE S1 = S + DX
S = S1
215 XC = X1 - (Y / S)
'PRINT "RAICES (a0)", X1, XC
IF ABS(XC - X1) <= DX THEN 250
X1 = XC
XCP(K7) = XC
GOTO 200
250 SEC = PI * XC * XC * .53 * .53
SEP(K7) = SEC * N9
PRINT
PRINT "ESTADO DE CARGA: "; Z, "ENERGIA INCIDENTE :"; I; "KeV"
LPRINT Z, I
PRINT "RADIO DE CRUCE: "; XC; " a0", "SECCION = "; SEC * N9;
"(D-16)CM2"
LPRINT XC, SEC * N9
GOTO 170
300 CLS
PRINT
'PRINT "CALCULA LA RAIZ POR EL METODO DE NEWTON"
PRINT : PRINT : PRINT : PRINT
DEF FNNA (X) = (X * X * EXP(-K1 * X)) - B2
DEF FNDJ (X) = (2 * X * EXP(-K1 * X)) - (K1 * X * X * EXP(-K1
* X))
K7 = 0
Z = Z0 - DZ
320 IF Z = ZF THEN 400
Z = Z + DZ
K7 = K7 + 1
CAR(K7) = Z

```

```

'PRINT "Z"; Z
X8 = SQR(Z)
B2 = Z * (Z - 1) * NV1 * .0002864#
K1 = A * 2.648 / X8
'PRINT "DAME EL VALOR INICIAL DE LA APROXIMACION":X1
X1 = 2 * X8
'"DAME LA EPSILON DE APROXIMACION"
DX = .01
'$$ CALCULA LA SECCION POR EL MODELO OLSON-SALOP, VARIANDO Z $$
350 Q = FNNA(X1)
L = FNDJ(X1)
DX = .01
'PRINT "FUNCIONES", Q, L
IF L <> 0 THEN 355 ELSE L1 = L + DX
L = L1
355 XC = X1 - (Q / L)
'PRINT "RAICES (a0)", X1, XC
IF ABS(XC - X1) <= DX THEN 360
X1 = XC
XCP(K7) = XC
GOTO 350
360 SEC = PI * XC * XC * .53 * .53
SEP(K7) = SEC * N9
PRINT
PRINT "ENERGIA INCIDENTE: "; E1; " KeV", "ESTADO DE CARGA: "; Z
LPRINT E1, Z
PRINT "RADIO DE CRUCE: "; XC; " a0", "SECCION = "; SEC * N9;
"(D - 16)cm2 "
LPRINT XC, SEC * N9
GOTO 320
400 REM $$ GRAFICA DE SECCION TRANSVERSAL (D-16 cm2) VS. ESTADO DE
CARGA
410 ' DEL ION INCIDENTE POR EL METODO OLSON-SALOP $$
420 SCREEN 2
430 REM $$ ESTABLECIMIENTO $$
440 CLS
445 WINDOW (0, 199)-(639, 0)
450 REM $$ RECUADRO $$
MAX = 0
FOR K = 1 TO 10
IF MAX >= SEP(K) THEN 455 ELSE MAX = SEP(K)
455 NEXT K
SUP = (INT(MAX / 10) + 2) * 10
DW = SUP / 10
460 REM $$ DIBUJAR ETIQUETAS Y TITULOS $$
470 LOCATE 20, 18
FOR K = Z0 TO Z0 + 2 STEP DZ
PRINT " "; K;
NEXT K
FOR I = Z0 + 3 TO Z0 + 5 STEP DZ
PRINT " "; I;
NEXT I
FOR N = Z0 + 6 TO Z0 + 6 STEP DZ
PRINT " "; N;

```

```

NEXT N
FOR M = Z0 + 7 TO ZF STEP DZ
PRINT " "; M;
NEXT M
490 LOCATE 23, 29: PRINT " ESTADO DE CARGA DEL ION INCIDENTE "
500 LOCATE 8, 1: PRINT " SEC. "
501 LOCATE 10, 1: PRINT " TRANSV. "
502 LOCATE 12, 1: PRINT "(D-16)cm2"
LOCATE 10, 13: PRINT SUP
LOCATE 19, 14: PRINT "0"
503 ' $$ DIBUJAR LIMITES DE GRAFICOS $$
505 LINE (118, 50)-(118, 50 + SUP)
506 LINE (118, 50)-(618, 50)
507 LINE (118, 50 + SUP)-(618, 50 + SUP)
508 LINE (618, 50)-(618, 50 + SUP)
509 ' $$ DIBUJAR ESCALAS HORIZONTALES $$
510 FOR PASO = 0 TO 180 STEP 20
511 LINE (118 + 2.5 * PASO, 50)-(118 + 2.5 * PASO, 60)
512 LINE (118 + 2.5 * PASO, 50 + SUP)-(118 + 2.5 * PASO, 40 + SUP)
513 NEXT PASO
514 ' $$ DIBUJAR ESCALAS VERTICALES $$
515 FOR NUM = 0 TO SUP STEP DW
516 COLUNO = 118: FILAUNO = 50 + NUM
517 COLDOS = 118 + 10: FILADOS = 50 + NUM
518 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
520 LINE (618, 50 + NUM)-(608, 50 + NUM)
521 NEXT NUM
522 LOCATE 1, 1
525 INPUT E$
530 'KEY ON
535 REM $$ OBTENER DATOS PARA PUNTOS $$
540 NUM = 10: GOTO 760
580 REM $$ DIBUJAR LINEAS $$
590 PNT = 1: COL = 218
600 COLUNO = 168: FILAUNO = FILA(PNT)
610 COLDOS = 218: FILADOS = FILA(PNT + 1): GOTO 670
620 FOR PNT = 3 TO (ZF - Z0) / DZ
630 FILA = FILA(PNT)
640 COL = COL + 50: GOSUB 700
650 NEXT PNT
655 GOTO 720
660 REM $$ SUBROUTINA: DIBUJAR UNA LINEA $$
670 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
680 GOTO 620
690 REM $$ SUBROUTINA: CONECTAR UNA LINEA $$
700 LINE -(COL, FILA)
710 RETURN
720 REM $$ ESPERAR, ENTONCES TERMINAR $$
730 TECLA$ = INPUT$(1)
740 GOTO 1040
750 REM $$ SUBROUTINA: LEER PUNTOS DE DATOS $$
760 FOR NUM = 1 TO 10
770 FILA(NUM) = SEP(NUM) + 50
780 NEXT NUM

```

```

GOTO 580
800 REM $$ GRAFICA DE SECCION TRANSVERSAL (D-16)cm2 VS. ENERGIA DEL
ION
810 ' INCIDENTE POR EL METODO OLSON-SALOP $$
820 SCREEN 2
830 REM $$ ESTABLECIMIENTO $$
835 CLS
840 WINDOW (0, 199)-(639, 0)
845 REM $$ RECUADRO $$
MAX = 0
FOR K = 1 TO 10
IF MAX >= SEP(K) THEN 850 ELSE MAX = SEP(K)
850 NEXT K
SUP = (INT(MAX / 10) + 4) * 10
DW = SUP / 10
855 REM $$ DIBUJAR ETIQUETAS Y TITULOS $$
856 LOCATE 21, 13
FOR K = IO TO IO + 2 * DI STEP 2 * DI
PRINT " "; K;
NEXT K
FOR I = IO + 4 * DI TO IO + 6 * DI STEP 2 * DI
PRINT " "; I;
NEXT I
FOR N = IO + 8 * DI TO IO + 8 * DI STEP 2 * DI
PRINT " "; N;
NEXT N
860 LOCATE 24, 30: PRINT " ENERGIA DEL ION INCIDENTE (KeV/uma) "
865 LOCATE 8, 3: PRINT " SEC. "
866 LOCATE 10, 1: PRINT " TRANSV. "
867 LOCATE 12, 1: PRINT "(D-16)cm2"
LOCATE 10, 13: PRINT SUP
LOCATE 19, 14: PRINT "0"
871 ' $$ DIBUJAR LIMITES DE GRAFICOS $$
872 LINE (118, 50)-(118, 50 + SUP)
873 LINE (118, 50)-(618, 50)
874 LINE (118, 50 + SUP)-(618, 50 + SUP)
875 LINE (618, 50)-(618, 50 + SUP)
880 ' $$ DIBUJAR ESCALAS HORIZONTALES $$
881 FOR PASO = 0 TO 180 STEP 20
882 LINE (118 + 2.5 * PASO, 50)-(118 + 2.5 * PASO, 60)
883 LINE (118 + 2.5 * PASO, 50 + SUP)-(118 + 2.5 * PASO, 40 + SUP)
884 NEXT PASO
885 ' $$ DIBUJAR ESCALAS VERTICALES $$
886 FOR NUM = 0 TO SUP STEP DW
887 COLUNO = 118: FILAUNO = 50 + NUM
888 COLDOS = 118 + 10: FILADOS = 50 + NUM
889 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
890 LINE (618, 50 + NUM)-(608, 50 + NUM)
891 NEXT NUM
892 LOCATE 1, 1
893 INPUT E$
894 'KEY ON
895 REM $$ OBTENER DATOS PARA PUNTOS $$
898 NUM = 10: GOTO 971

```

```

900 REM $$ DIBUJAR LINEAS $$
901 PNT = 1: COL = 218
905 COLUNO = 168: FILAUNO = FILA(PNT)
906 COLDOS = 218: FILADOS = FILA(PNT + 1): GOTO 941
909 FOR PNT = 3 TO (FI - IO) / DI
920 FILA = FILA(PNT)
925 COL = COL + 50: GOSUB 950
930 NEXT PNT
935 GOTO 960
940 REM $$ SUBROUTINA: DIBUJAR UNA LINEA $$
941 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
942 GOTO 909
945 REM $$ SUBROUTINA: CONECTAR UNA LINEA $$
950 LINE -(COL, FILA)
955 RETURN
960 REM $$ ESPERAR, ENTONCES TERMINAR $$
961 TECLA$ = INPUT$(1)
962 GOTO 1040
970 REM $$ SUBROUTINA: LEER PUNTOS DE DATOS $$
971 FOR NUM = 1 TO 10
972 FILA(NUM) = SEP(NUM) + 50
975 NEXT NUM
    GOTO 900
1000 IF PA = 1 THEN 1500
    REM $$ GRAFICA DE RADIO DE CRUCE(a0) VS. ESTADO DE CARGA DEL
ION
1010 'INCIDENTE POR EL METODO OLSON-SALOP $$
1020 'SCREEN 2
1030 REM $$ ESTABLECIMIENTO $$
1040 IF PA = 1 THEN 1500
    CLS
1050 WINDOW (0, 199)-(639, 0)
1060 REM $$ RECUADRO $$
    MAXI = 0
    FOR K = 1 TO 10
    IF MAXI >= XCP(K7) THEN 1070 ELSE MAXI = XCP(K7)
1070 NEXT K
    SUPI = (INT(MAXI) + 2) * 10
    DW1 = SUPI / 10
1080 REM $$ DIBUJAR ETIQUETAS Y TITULOS $$
1090 LOCATE 20, 17
    FOR Y = Z0 TO Z0 + 2 STEP DZ
    PRINT " "; Y;
    NEXT Y
    FOR I = Z0 + 3 TO Z0 + 4 STEP DZ
    PRINT " "; I;
    NEXT I
    FOR J = Z0 + 5 TO Z0 + 5
    PRINT ""; J;
    NEXT J
    FOR N = Z0 + 6 TO Z0 + 6 STEP DZ
    PRINT " "; N;
    NEXT N
    FOR M = Z0 + 7 TO ZF STEP DZ

```

```

PRINT " "; M;
NEXT M
1110 LOCATE 23, 29: PRINT " ESTADO DE CARGA DEL ION INCIDENTE "
1120 LOCATE 9, 1: PRINT " RAD. "
1130 LOCATE 11, 1: PRINT " DE CRUCE "
1140 LOCATE 13, 1: PRINT " (a0) "
LOCATE 4, 12: PRINT SUPI / 10
LOCATE 19, 14: PRINT "0"
1150 ' $$ DIBUJAR LIMITES DE GRAFICOS $$
1160 LINE (118, 50)-(118, 50 + SUPI)
1170 LINE (118, 50)-(618, 50)
1180 LINE (118, 50 + SUPI)-(618, 50 + SUPI)
1190 LINE (618, 50)-(618, 50 + SUPI)
1200 ' $$ DIBUJAR ESCALAS HORIZONTALES $$
1210 FOR PASO = 0 TO 180 STEP 20
1220 LINE (118 + 2.5 * PASO, 50)-(118 + 2.5 * PASO, 60)
1225 LINE (118 + 2.5 * PASO, 50 + SUPI)-(118 + 2.5 * PASO, 40 +
SUPI)
1230 NEXT PASO
1240 ' $$ DIBUJAR ESCALAS VERTICALES $$
1250 FOR NUM = 0 TO SUPI STEP DW1
1255 COLUNO = 118: FILAUNO = 50 + NUM
1260 COLDOS = 118 + 10: FILADOS = 50 + NUM
1265 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
1270 LINE (618, 50 + NUM)-(608, 50 + NUM)
1275 NEXT NUM
1280 LOCATE 1, 1
1285 INPUT E$
1290 'KEY ON
1295 REM $$ OBTENER DATOS PARA PUNTOS $$
1300 NUM = 10: GOTO 1480
1310 REM $$ DIBUJAR LINEAS $$
1320 PNT = 1: COL = 218
1330 COLUNO = 168: FILAUNO = FILA(PNT)
1340 COLDOS = 218: FILADOS = FILA(PNT + 1): GOTO 1400
1350 FOR PNT = 3 TO (ZF - Z0) / DZ
1360 FILA = FILA(PNT)
1370 COL = COL + 50: GOSUB 1430
1380 NEXT PNT
1385 GOTO 1450
1390 REM $$ SUBROUTINA: DIBUJAR UNA LINEA $$
1400 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
1410 GOTO 1350
1420 REM $$ SUBROUTINA: CONECTAR UNA LINEA $$
1430 LINE -(COL, FILA)
1440 RETURN
1450 REM $$ ESPERAR, ENTONCES TERMINAR $$
1455 TECLA$ = INPUT$(1)
1460 GOTO 1520
1470 REM $$ SUBROUTINA: LEER PUNTOS DE DATOS $$
1480 FOR NUM = 1 TO 10
1485 FILA(NUM) = 10 * XCP(NUM) + 50
1490 NEXT NUM
GOTO 1310

```

```

1500 REM $$ GRAFICA DE SECCION TRANSVERSAL (D-16 cm2) VS. RADIO DE
CRUCE(a0)
1510 ' POR EL METODO OLSON-SALOP $$
1520 SCREEN 2
1530 REM $$ ESTABLECIMIENTO $$
1540 CLS
1545 WINDOW (0, 199)-(639, 0)
1550 REM $$ RECUADRO 1 $$
MAX2 = 0
FOR K = 1 TO 10
IF MAX2 >= SEP(K) THEN 1555 ELSE MAX2 = SEP(K)
1555 NEXT K
SUP2 = (INT(MAX2 / 10) + 2) * 20
DW2 = SUP2 / 10
1558 REM $$ DIBUJAR ETIQUETAS Y TITULOS 1 $$
1560 LOCATE 8, 1: PRINT " SEC. "
1565 LOCATE 10, 1: PRINT " TRANSV. "
1570 LOCATE 12, 1: PRINT "(D-16)cm2"
LOCATE 2, 12: PRINT SUP2 / 2
LOCATE 19, 14: PRINT "0"
1575 REM $$ RECUADRO 2 $$
1580 MAX3 = 0
FOR K = 0 TO 10
IF MAX3 >= XCP(K7) THEN 1590 ELSE MAX3 = XCP(K7)
1590 NEXT K
SUP3 = (INT(MAX3) + 2) * 30
DW3 = SUP3 / 10
1595 REM $$ DIBUJAR ETIQUETAS Y TITULOS 2 $$
1598 LOCATE 22, 30: PRINT "RADIO DE CRUCE (a0)"
1600 LOCATE 20, 59: PRINT SUP3 / 30
1605 LOCATE 20, 16: PRINT "0"
1610 REM $$ DIBUJAR LIMITES DE GRAFICOS $$
1611 LINE (118, 50)-(118, 50 + SUP2)
1612 LINE (118, 50)-(118 + SUP3, 50)
1613 LINE (118, 50 + SUP2)-(118 + SUP3, 50 + SUP2)
1614 LINE (118 + SUP3, 50)-(118 + SUP3, 50 + SUP2)
1615 REM $$ DIBUJAR ESCALAS HORIZONTALES $$
1620 FOR PASO = 0 TO SUP3 STEP DW3
1621 COLUNO = 118 + PASO: FILAUNO = 50
1622 COLDOS = 118 + PASO: FILADOS = 60
1623 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
1624 LINE (118 + PASO, 50 + SUP2)-(118 + PASO, 40 + SUP2)
1625 NEXT PASO
1630 REM $$ DIBUJAR ESCALAS VERTICALES $$
1631 FOR NUM = 0 TO SUP2 STEP DW2
1632 COLUNO = 118: FILAUNO = 50 + NUM
1633 COLDOS = 118 + 10: FILADOS = 50 + NUM
1634 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
1635 LINE (118 + SUP3, 50 + NUM)-(108 + SUP3, 50 + NUM)
1636 NEXT NUM
1637 LOCATE 1, 1
1640 INPUT E$
1650 ' KEY ON
1660 REM $$ OBTENER DATOS PARA PUNTOS $$

```

```
1670 NUM = 10: GOTO 1860
1680 REM $$ DIBUJAR LINEAS $$
1690 PNT = 1
1700 COLUNO = COL(PNT): FILAUNO = FILA(PNT)
1710 COLDOS = COL(PNT + 1): FILADOS = FILA(PNT + 1)
1715 GOTO 1777
1720 FOR PNT = 3 TO 9
1730 COL = COL(PNT): FILA = FILA(PNT): GOSUB 1790
1760 NEXT PNT
1770 GOTO 1820
1775 REM $$ SUBROUTINA: DIBUJAR UNA LINEA $$
1777 LINE (COLUNO, FILAUNO)-(COLDOS, FILADOS)
1778 GOTO 1720
1780 REM $$ SUBROUTINA: CONECTAR UNA LINEA $$
1790 LINE -(COL, FILA)
1800 RETURN
1820 REM $$ ESPERAR, ENTONCES TERMINAR $$
1830 TECLA$ = INPUT$(1)
1840 END
1850 REM $$ SUBROUTINA: LEER PUNTOS DE DATOS $$
1860 FOR NUM = 1 TO 9
1870 COL(NUM) = 30 * XCP(NUM) + 118: FILA(NUM) = 2 * SEP(NUM) + 50
1880 NEXT NUM
      GOTO 1680
1900 PRINT : PRINT
1920 PRINT " SI QUIERES PROBAR OTROS VALORES INICIALES, PON 10 "
1990 INPUT " DESEO PROBAR OTROS VALORES INICIALES "; T
1999 IF T <> 10 THEN 150
```

III.- CALCULO DE SECCIONES TRANSVERSALES. APLICACIONES DEL MODELO DE ESFERA ABSORBENTE DE OLSON-SALOP.

III.1.- IONES MULTIPLEMENTE CARGADOS DE GASES RAROS EN ESPECIES NEUTRAS DE GASES RAROS.

En años recientes se ha incrementado el interés en estudiar los procesos involucrados en las interacciones atómicas y moleculares a energías bajas de iones multiplemente cargados con átomos y moléculas (hidrógeno atómico, molecular y helio). Tales interacciones juegan un papel importante en física de plasmas, astrofísica y su aplicación en los Tokamaks, además de la necesidad de disponer de datos atómicos reales y exactos de tales interacciones para modelar dichos sistemas y poder interpretar cuantitativamente las mediciones.

La captura electrónica utilizando como blanco a hidrógeno atómico y molecular es de un especial interés por varias razones. Puesto que los efectos isotópicos son despreciables, es necesario, para comprender la fusión y los sistemas de inyección de haces neutros rápidos que involucran hidrógeno o deuterio, realizar un estudio sistemático de captura electrónica por iones altamente cargados a energías de KeV, particularmente para átomos de hidrógeno. Ultimamente se ha incrementado en varios laboratorios la investigación experimental de captura electrónica de hidrógeno atómico y molecular. Recientemente, los trabajos experimentales se

habían limitado un poco debido a la dificultad de producir haces de iones altamente cargados a bajas energías (LEHQ). Se han reportado mediciones de secciones transversales para proyectiles parcialmente ionizados, en un amplio intervalo de números atómicos, incidentes sobre hidrógeno atómico y molecular [37]. Progresos recientes en técnicas experimentales han hecho posible estudiar colisiones de captura electrónica de proyectiles altamente cargados con átomos de hidrógeno a bajas velocidades de colisión [38]. Se han medido secciones transversales absolutas de captura electrónica a bajas velocidades (10^6 - 10^7 cm/s) de proyectiles de Ne^{q+} ($2 \leq q \leq 7$) y Ar^{q+} ($2 \leq q \leq 10$) sobre hidrógeno atómico y molecular [39]. Por lo general los resultados que se han obtenido han sido discutidos y comparados con las predicciones de modelos teóricos. Otros experimentos realizados son de $\text{Ne}^{q+} + \text{H}_2$, y $\text{Ne}^{q+} + \text{H}$ por Huber [40], y Seim et al. [41]; $\text{Ar}^{q+} + \text{H}_2$ y $\text{Ar}^{q+} + \text{H}$ por Huber [40], y Crandall et al. [42]; y $\text{Ar}^{q+} + \text{H}_2$, $\text{Ar}^{q+} + \text{H}$ [43].

Con lo que respecta al He, a pesar de la disponibilidad en años recientes de avanzadas fuentes de iones de resonancia ciclotrónica de electrones (ECRYS) y haces electrónicos (EBIS), las cuales son capaces de producir iones altamente cargados a energías bajas, son muy raras las mediciones directas de secciones transversales absolutas para iones con estado de carga más grandes que 10. Se han reportado muy pocos experimentos de colisiones a bajas velocidades ($V \ll 1$ u.a.) de iones altamente cargados y átomos o moléculas simples. Algunos de ellos son Ne^{q+} ($2 \leq q \leq 8$), Ar^{q+} ($7 \leq q \leq 9$), Kr^{q+} ($2 \leq q \leq 13$) y Xe^{q+} ($2 \leq q \leq 13$) sobre He a energías entre

0.25 y 1.00q KeV, Justiniano et al. [44]; Kr^{q+} (7≤q≤25) sobre He a 1.0 q KeV, Iwai et al. [45]; I^{q+}(10≤q≤41) sobre He a 1.25 q KeV, Tawara et al. [46]; Ar^{q+}(4≤q≤15) e I^{q+}(5≤q≤27) sobre He e H₂ a 0.198 q KeV, Mann [47]; Xe^{q+}(11≤q≤31) sobre He a 4.0q KeV, Anderson et al. [48]; Xe^{q+}(11≤q≤35) sobre Xe a 4.0q KeV, Cederquist et al. [49]; y Ar^{q+}(8≤q≤16) sobre He a 2.3q KeV, J. Vancura et al. [50].

Las fórmulas presentadas en el capítulo II, junto con su automatización respectiva, se pueden aplicar a una variedad de sistemas en colisión. Desafortunadamente, sin embargo, como se ha hecho notar, no muchos datos experimentales se encuentran disponibles para aquéllos que probablemente también son sistemas interesantes, aquéllos de iones múltiplemente cargados de gases raros colisionando con blancos de gases raros. Por tanto, se aplicará el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop y su automatización respectiva [24], a proyectiles de gases raros (He, Ne, Ar, Kr y Xe) en blancos de gases raros.

Se han incluido en los cálculos blancos de gases raros porque hay algunos datos experimentales disponibles en la literatura. Por ejemplo, Salzborn et al. [51-53], han hecho un estudio sistemático de captura electrónica de proyectiles altamente cargados a bajas energías en colisiones de gases raros en gases raros. Ellos han encontrado valores grandes de las secciones transversales tanto para captura simple como para múltiple y han notado que ellas siguen ciertas reglas de escalamiento. Crandall et al. [42], ha reportado secciones transversales para iones de Xe en blancos de He y Ar. Más recientemente, Vane et al. [54], ha reportado secciones

transversales totales de captura para iones de Ne en Ne. Beyer et al. [55], y Mann et al. [56] han reportado información experimental sobre los números cuánticos principales de la captura electrónica para colisiones a bajas energías de Ne^{q+} y N^{q+} en He, Ne, Ar, H_2 , CH_4 y NH_3 . Para blancos de gases raros existe, sin embargo, una mayor complicación. Esto es, que hay una alta probabilidad para que más de un electrón sea transferido o inyectado durante la colisión. De hecho, para la colisión $\text{Ar}^{q+} + \text{Ar}$ se han observado secciones transversales de transferencia de 4 electrones con magnitudes de $Q \geq 10^{-16} \text{ cm}^2$. En nuestro modelo, no se puede diferenciar entre procesos de transferencia de uno y muchos electrones a otros que pueden dar detalles sobre la multitransferencia de electrones para sistemas en donde hay una gran densidad de curvas de cruzamiento. Esta suposición está basada en el hecho de que los elementos de matriz de acoplamiento son mucho más pequeños para procesos de intercambio de muchos electrones que para el intercambio de un sólo electrón [57]. Como se ha supuesto probabilidad unitaria para la transferencia electrónica dentro de alguna distancia crítica R_c , la conservación de la unitariedad de la matriz S requiere que las secciones transversales calculadas con este modelo de Olson y Salop puedan sólo ser comparadas con la suma de todos los procesos de pérdida de electrones. Con la anterior aclaración, se calculan secciones transversales totales de transferencia electrónica para iones altamente cargados de gases raros en gases raros. La tendencia en el comportamiento de los gases raros a tener secciones transversales más grandes que para gases raros más ligeros, está

justamente reflejado en la dependencia de los elementos de matriz de acoplamiento sobre el potencial de ionización del blanco (ec. 74), en donde se nota que a una distancia internuclear dada, el más alto potencial de ionización corresponde al más pequeño elemento de matriz de acoplamiento. De ahí que es más difícil remover al electrón del blanco. La dependencia de la energía por parte de las secciones transversales también es muy suave. Este comportamiento ha sido observado previamente por Salzborn et al. [51-53], similarmente para colisiones entre sí de gases raros a energías arriba de 100 KeV y en colisiones que involucran blancos de H_2 por Huber y Kahlert [58]. Los cálculos con el modelo de Olson y Salop confirman la persistencia de este comportamiento igualmente a bajas energías.

El caso del blanco He nos lleva a la parte intermedia entre lo simple y lo complejo. Son posibles tanto la captura electrónica doble como la transferencia de ionización, obteniendo la existencia de un blanco de dos electrones y haciendo posible tratar al sistema teóricamente usando la técnica de expansión de eigenfunciones. Mientras pocos de tales tratamientos existan en la literatura, el incremento en la disponibilidad de datos experimentales sobre este blanco puede estimular el trabajo teórico en esta dirección. Así, en un futuro cercano será posible hacer una comparación crítica entre teoría y experimento.

Los sistemas en colisión que se han revisado y que involucran los gases raros son los siguientes:



De acuerdo al modelo de esfera absorbente de Olson y Salop [24], son necesarios datos atómicos simples tanto del proyectil como del átomo blanco; estos son la masa tanto del proyectil y blanco en unidades de masa atómica, u , y el potencial de ionización del átomo blanco en eV. Para los gases raros de interés

se muestran en la tabla siguiente.

Z	ELEMENTO	SIMBOLO	POTENCIAL DE IONIZACION (eV)	MASA ATOMICA (uma)
2	HELIO	He	24.581	4.003
10	NEON	Ne	21.559	20.179
18	ARGON	Ar	15.755	39.948
36	KRIPTON	Kr	13.996	83.800
54	XENON	Xe	12.127	131.300

Se realizó una búsqueda de información, disponible en la literatura, de los estudios tanto teóricos como experimentales de tales sistemas de colisión de interés. Se calcularon secciones transversales de transferencia electrónica simple con el modelo de esfera absorbente automatizado de Olson y Salop [24], en los intervalos de estado de carga del ion incidente y energías del proyectil incidente reportados en la información encontrada. Los resultados se discuten y se comparan con los datos reportados en la literatura, lo que permite confirmar que el modelo está brindando resultados confiables. Los resultados se muestran en las tablas siguientes.

III.2.- TABLAS.

q	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}	σ_{A3}	σ_{A4}	σ_{A5}	σ_{A6}	σ_{A7}	σ_{A8}	σ_{A9}
2		0.27		0.3					4.3	
3	8.62	1.23	1.8			2.1±.3			4.8	
4	10.7	11.5	14.0			11.0±1			19.0	
5	12.6	18.5	27.0			15.0±3				
6	14.5	10.1	20.0			11.0±2				
7	16.3	27.5			30	19.0±3				
8	18.0	17.0			28	18.0±6		26		
9	19.7				19	10.0±3	10±2.5	17		
10	21.3					16.0±2	16±2.0			26

TABLA IA. Secciones transversales totales de captura electrónica simple $\sigma_{q,q-1}$ para el sistema $\text{Ne}^{q+} + \text{He} \rightarrow \text{Ne}^{(q-1)+} + \text{He}^+$. Se comparan las calculadas con el modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop con los datos experimentales reportados por otros autores en la literatura. Las secciones transversales totales están en unidades de (10^{-16} cm^2).

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop.
 $E_{\text{inc}}=1.5 \text{ KeV}$.

σ_{A1} : E. Justiniano et al., [44], $E_{\text{inc}}=0.5q \text{ KeV}$.

σ_{A2} : E. Salzborn et al., [51,59], $E_{\text{inc}}=30q \text{ KeV}$.

σ_{A3} : T. Kusakabe et al., [60], $E_{\text{inc}}=1.5q \text{ KeV}$.

σ_{A4} : T. Iwai et al., [65], $E_{\text{inc}}=1.5q \text{ KeV}$.

σ_{A5} : C. Schmeissner et al., [66], $E_{\text{inc}}=0.22q \text{ KeV}$.

σ_{A6} : R. Mann et al., [74], $E_{\text{inc}}=0.47q \text{ KeV}$.

σ_{A7} : M. Kimura et al., [64], $E_{inc}=0.6$ KeV/uma.
 σ_{A8} : H. Winter et al., [75], $E_{inc}=100$ KeV.
 σ_{A9} : S. Bliman et al., [76], $E_{inc}=4.5$ KeV/uma.

E(KeV/q)	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}	σ_{A3}	σ_{A4}	σ_{A5}	σ_{A6}
0.25	60.87	13.0	9.5	32.3			
0.5	56.92	11.0	10.7	20.5			
0.53					30±6		
0.6						28±6	
0.64					30±6		
0.73						31±6	
0.75	54.65	10.0	13.5	32.0			
0.77							18±4
0.8					32±6		
0.9							26±4
1.0	53.07						
1.25	51.85						
1.5	50.87						
1.75	50.04						
2.0	49.33						
2.25	48.71						
2.5	48.15						
2.75	47.65						
3.0	47.2						
3.25	46.78						
3.5	46.39						
3.75	46.03						
4.0	45.70						

TABLA IB. Secciones transversales totales de captura electrónica simple $\sigma_{q,q-1}$ para el sistema $Ne^{q+} + He \rightarrow Ne^{(q-1)+} + He^+$. Se comparan las calculadas con el modelo de esfera absorbente

automatizado de Olson-Salop con los datos experimentales reportados por otros autores en la literatura. Las secciones transversales totales están en unidades de (10^{-16} cm²).

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $q=8$.

σ_{A1} : E. Justiniano et al., [44], $q=4$.

σ_{A2} : *ibid*, $q=6$.

σ_{A3} : *ibid*, $q=8$.

σ_{A4} : T. Iwai et al., [65,67], $q=7$.

σ_{A5} : *ibid*, $q=8$.

σ_{A6} : *ibid*, $q=9$.

q	σ_{mod}	σ_{Al}
4	13.34	
5	15.84	
6	18.24	
7	20.56	
8	22.81	
9	25.0	25 ± 2
10	27.14	11 ± 2

TABLA IIA. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IA para el sistema $\text{Ne}^{q+} + \text{Ne} \rightarrow \text{Ne}^{(q-1)+} + \text{Ne}^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $E_{\text{inc}}=0.47$ KeV.

σ_{Al} : R. Mann et al., [74], $E_{\text{inc}}=0.47$ KeV.

E (KeV)	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}
0.44			25.0±2
0.49		11.0±2	
1.0	68.04		
2.0	63.24		
3.0	60.50		
4.0	58.59		
5.0	57.12		
6.0	55.93		
7.0	54.93		
8.0	54.07		
9.0	53.32		
10.0	52.65		

TABLA IIB. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IB para el sistema $\text{Ne}^{q+} + \text{Ne} \rightarrow \text{Ne}^{(q-1)+} + \text{Ne}^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $q=9$.

σ_{A1} : R. Mann et al., [74], $q=10$.

σ_{A2} : ibid, $q=9$.

q	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}	σ_{A3}	σ_{A4}	σ_{A5}	σ_{A6}	σ_{A7}
2			3.35		7.0	4.75		
3			1.4		8.3	4.75	5.4	
4			9.35		10.5	10.0	8.3	7.48
5	19.7	19.7±1.5	15.5		21.0	17.5	11.3	9.7
6	22.6	21.0±1.5	21.5		30.0	22.0	14.7	12.5
7	25.5	18.3±1.0	19.3		30.5	21.5	17.5	15.0
8	28.23	14.4±2.0	17.3	22.1±3.2	30.0		18.9	16.3
9	30.9	34.6±3.0	22.0	30.4±4.2				
10	33.5	32.0±2.0		33.1±4.5				
11	36.05	27.0±2.0		37.2±4.8				
12	38.53	40.5±2.0		45.1±6.1				
13	40.97	32.8±2.5		46.2±6.1				
14	43.36	34.0±3.0		46.7±6.2				
15	45.70	27.3±3.0		48.6±6.6				
16				50.4±7.3				

TABLA IIIA. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IA para el sistema $\text{Ar}^{q+} + \text{He} \rightarrow \text{Ar}^{(q-1)+} + \text{He}^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $E_{\text{inc}}=1.5 \text{ KeV}$.

σ_{A1} : R. Mann, [47], $E_{\text{inc}}=0.198q \text{ KeV}$.

σ_{A2} : E. Justiniano et al., [61], $E_{\text{inc}}=0.5q \text{ KeV}$.

σ_{A3} : J. Vancura et al., [50], $E_{\text{inc}}=2.3q \text{ KeV}$.

σ_{A4} : E. Salzborn et al., [51,52,59]; $E_{\text{inc}}=3.75q \text{ KeV}$ y 30 KeV .

σ_{A5} : T. Kusakabe et al., [60], $E_{\text{inc}}=0.286q \text{ KeV}$.

σ_{A6} : M. N. Panov et al., [77], $E_{\text{inc}}=3.5 \text{ KeV/uma}$.

σ_{A7} : ibid, $E_{\text{inc}}=4.7 \text{ KeV/uma}$.

E(KeV)	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}	σ_{A3}	σ_{A4}	σ_{A56}	σ_{A6}
0.1	70.40	17.5			24.0	10.02	20.5
0.2	66.20	20.5			23.0	10.07	19.0
0.3	63.79					9.5	18.5
0.4	62.10						
0.5	60.81			20.5	22.0	8.0	19.0
0.6	59.76						
0.7	58.88						
0.8	58.12		30.0		21.5		
0.9	57.45						
1.0	56.86				22.0		
2.0	53.01				23.5		
3.0	50.81						
4.0	49.28				24.0		
5.0	48.10						
6.0	47.14				25.5		
7.0	46.34						
8.0	45.65				27.0		
9.0	45.04						
10.0	44.50				27.5		

TABLA IIIB. Mismos datos y comparaciones de la tabla IB para el sistema $\text{Ar}^{q+} + \text{He} \rightarrow \text{Ar}^{(q-1)+} + \text{He}^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $q=8$.

σ_{A1} : E. Justiniano et al., [44], $q=8$.

σ_{A2} : E. Salzbom, [51], $q=8$.

σ_{A3} : J. Vancura et al., [50], $q=8$.

σ_{A4} : M. Kimura et al., [62], $q=8$.

σ_{A5} : E. Justiniano et al., [44], $q=4$.

σ_{A6} : ibid, $q=6$.

q	σ_{mod}	σ_{Al}
2		10.03
3		33.0
4	35.51	56.0
5	41.51	48.0
6	47.2	69.5
7	52.62	88.5
8	57.81	
9	62.80	
10	67.61	

TABLA IVA. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IA para el sistema $\text{Ar}^{20} + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^{20} + \text{Ar}$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $E_{\text{inc}}=50$ KeV.

σ_{Al} : H. Klinger et al., [53], $E_{\text{inc}}=50$ KeV.

E(KeV)	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}
3.0	50.81		
3.5		63.64	
4.0	49.28		
4.5		68.18	
5.0	48.10	75.0	
6.0	47.14	79.545	40.0
7.0	46.34	84.091	
7.5		89.542	
8.0	45.65		
8.5		87.727	
9.0	45.04	90.0	
10.0	44.50	94.545	
11.0	44.02	94.091	
11.5		97.727	
12.0	43.57	102.273	
13.0	43.17	102.273	
13.5			35.0
14.0	42.80		
14.5		79.545	
15.0	42.45		
16.0	42.13	55.0	
17.0	41.82		
17.5		61.364	
18.0	41.54		
19.0	41.27	68.182	

19.5			33.5
20.0	41.02		
21.0	40.78		
21.5		73.636	
22.0	40.55		

TABLA IVB. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IB para el sistema $Ar^{qt} + Ar \rightarrow Ar^{(q-1)t} + Ar^t$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $q=8$.

σ_{A1} : J. Vancura et al., [68], $q=8$.

σ_{A2} : J. Aubert et al., [71], $q=6$.

q	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}	σ_{A3}	σ_{A4}	σ_{A5}	σ_{A6}	σ_{A7}	σ_{A8}
2		0.44	0.75	0.3	0.7				
3		7.75	11.5	5.7	7.0				
4		4.0	5.0	2.1	1.3				
5		10.2	13.3	14	12.0				
6		22.0	13.6		19.0				
7	32.41	27.5	23.0		20.2	26.4			
8	35.80	18.0	16.0		16.5	24.7			
9	39.08	30.5	28.4		19.5	31.9			
10	42.26	40.0			21.0	37.4	40.5		
11	45.35	39.5				40.2			
12	48.37	39.0				42.4			
13	51.31	39.0				48.4			
14	54.19	39.0				49.4			
15	57.01					57.0	65.0		
16	59.77					61.6			
17	62.48					61.2			
18	65.14					57.4			
19	67.76					63.9		7.53	6.54
20	70.33					69.2	99.5		6.30
21	72.87								
22	75.36					73.3			
23	77.82					85.7			
25	82.63					88.6	135		

TABLA VA. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IA para el

sistema $Kr^{q+} + He \rightarrow Kr^{(q-1)+} + He^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop,
 $E_{inc}=15$ KeV.

- σ_{A1} : E. Justiniano et al., [44], $E_{inc}=1q$ KeV.
- σ_{A2} : T. Kusakabe et al., [60], $E_{inc}=0.286q$ KeV.
- σ_{A3} : B. A. Huber et al., [58], $E_{inc}=1q$ KeV.
- σ_{A4} : C. L. Cocke et al., [63], $E_{inc}=0.78q$ KeV.
- σ_{A5} : T. Iwai et al., [45], $E_{inc}=1q$ KeV.
- σ_{A6} : M. Kimura et al., [64], $E_{inc}=1$ KeV/uma.
- σ_{A7} : H. Tawara et al., [46], $E_{inc}=0.75$ KeV.
- σ_{A8} : ibid., $E_{inc}=1.25$ KeV.

E(KeV)	σ_{mod}
1.0	61.09
2.0	57.13
3.0	54.86
4.0	53.27
5.0	52.06
6.0	51.07
7.0	50.24
8.0	49.53
9.0	48.90
10.0	48.35

TABLA VB. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IA para el sistema $\text{Kr}^{q+} + \text{He} \rightarrow \text{Kr}^{(q-1)+} + \text{He}^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $q=8$.

q	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}	σ_{A3}	σ_{A4}	σ_{A5}
2		0.3		0.19		
3		5.9	4.03	4.2		
4		10.5	16.0	15.35		
5	18.80	7.0	9.35	8.2		
6	21.61	30.0	21.5	23.0	16.1	
7	24.32	20.5	26.5	28.4	24.6	
8	26.95	13.5	23.5	23.0	34.3	
9	29.50	20.2		38.0		
10	31.98	32.0	46.0	40.5	34.3	
11	34.41	33.0		50.5		58
12	36.78	37.0				
13	39.10	31.0				66
14	41.38	40.0				67
15						66

16						66
17						71
18						83
19						80
20						101
21						97
23						125
25						125
27						148
29						164
31						157

TABLA VIA. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IA para el sistema $Xe^{q+} + He \rightarrow Xe^{(q-1)+} + He^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $E_{inc}=5$ KeV.

σ_{A1} : E. Justiniano et al., [44], $E_{inc}=0.5q$ KeV.

σ_{A2} : E. Salzborn et al., [51,59], $E_{inc}=30$ KeV.

σ_{A3} : T. Kusakabe et al., [60], $E_{inc}=0.286q$ KeV.

σ_{A4} : D. H. Crandall et al., [42], $E_{inc}=10q$ KeV.

σ_{A5} : H. Andersson et al., [48], $E_{inc}=4.0q$ KeV.

E (KeV)	σ_{mod}
1	63.71
2	59.68
3	57.37
4	55.76
5	54.52
6	53.51
7	52.67
8	51.94
9	51.31
10	50.74

TABLA VIB. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IB para el sistema $\text{Xe}^{q+} + \text{He} \rightarrow \text{Xe}^{(q-1)+} + \text{He}^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop,
 $q=8$.

q	σ_{mod}	σ_{A1}	σ_{A2}
2		3.0	
3		56.0	
4	74.43	102.0	
5	88.53	72.0	
6	102.12	145.0	
7	115.27	150.0	
8	128.05	152.0	
9	140.45		
10	152.66		120.0
11	164.56		135.0
12	176.22		170.0
13	187.67		205.0
14	198.92		175.0
15	209.99		210.0
16	220.88		200.0
17	331.62		197.0

18	242.21		165.0
19	252.66		135.5
20	262.9		160.0

TABLA VIIA. Mismos datos y comparaciones de la tabla IA para el sistema $Xe^{q+} + Xe \rightarrow Xe^{(q-1)+} + Xe^+$.

σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $E_{inc}=4.5$ KeV.

σ_{A1} : D. H. Crandall et al., [42], $E_{inc}=0.3$ KeV/uma.

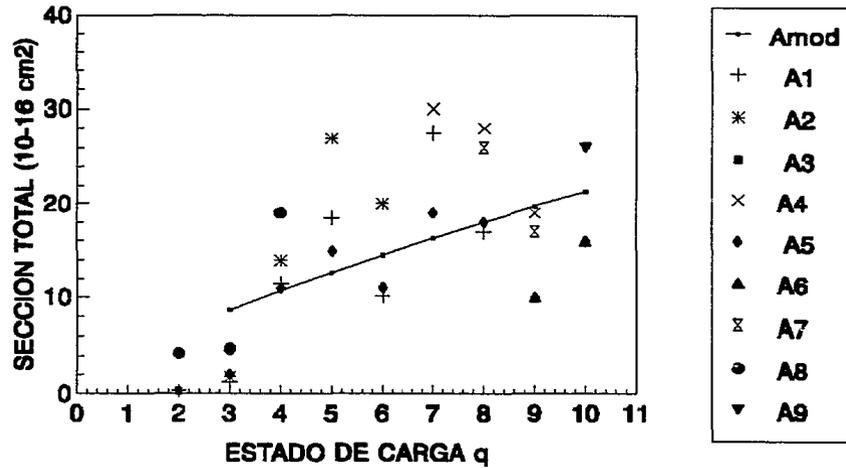
σ_{A2} : P. Hvelplund et al., [73], $E_{inc}=1.0$ KeV.

E(KeV)	σ_{mod}
3.0	218.62
3.2	217.24
3.4	215.94
3.6	214.72
3.8	213.57
4.0	212.48
4.2	211.45
4.4	210.46
4.6	209.52
4.8	208.62
5.0	207.76
5.2	206.93
5.4	206.14
5.6	205.38
5.8	204.65
6.0	203.94

TABLA VIIB. Mismos datos y comparaciones de la TABLA IB para el sistema $\text{Xe}^{q+} + \text{Xe} \rightarrow \text{Xe}^{(q-1)+} + \text{Xe}^+$.

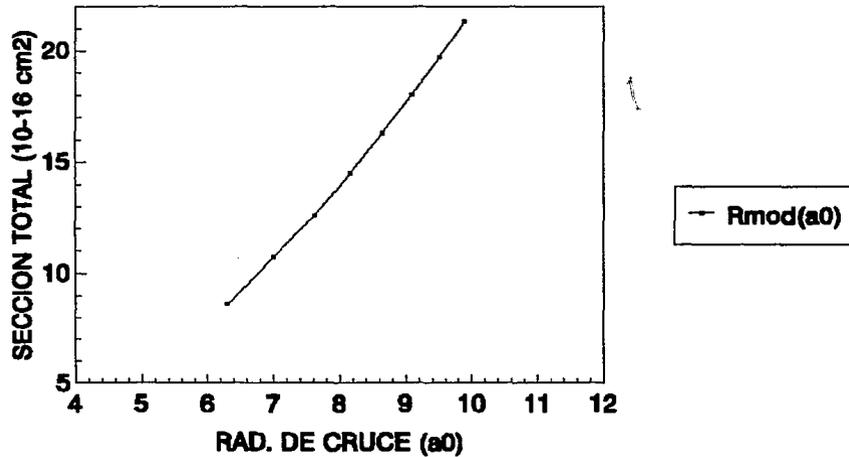
σ_{mod} : Modelo de esfera absorbente automatizado de Olson-Salop, $q=15$.

SISTEMA $\text{Ne}q+ - \text{He} \rightarrow \text{Ne}(q-1)+ - \text{He}+$.



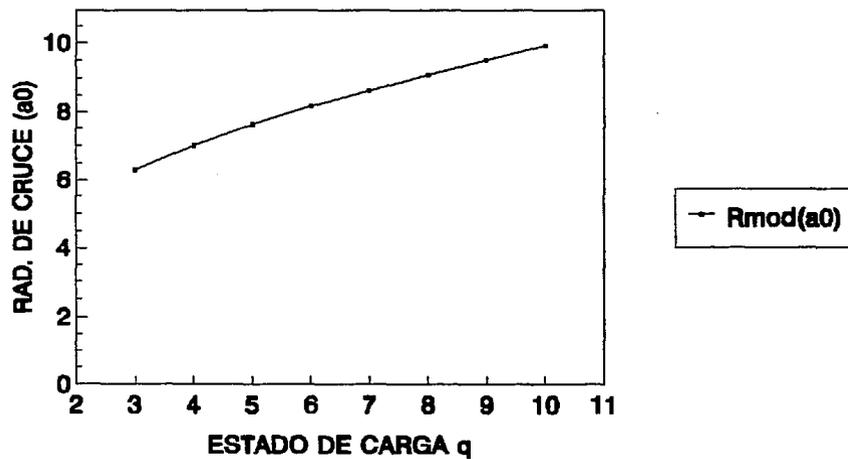
GRAFICA IA1; Datos correspondientes a la TABLA IA.

SISTEMA $\text{Ne}q+ - \text{He} \text{ ----> } \text{Ne}(q-1)+ - \text{He}+$



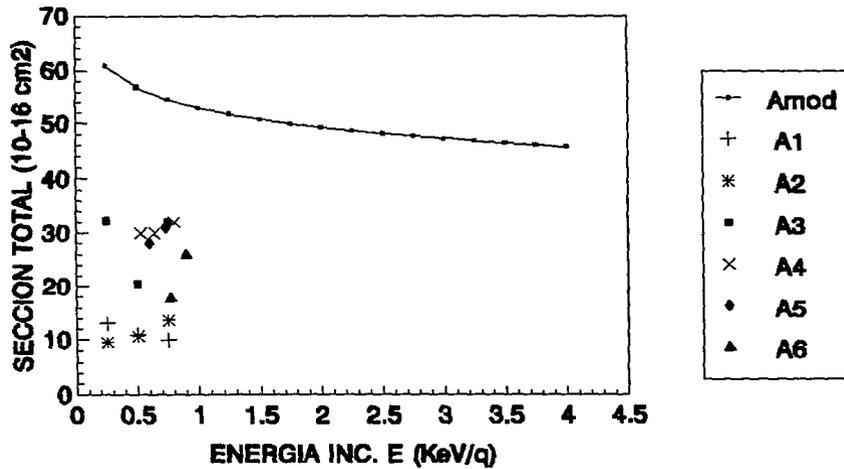
GRAFICA IA3; Datos correspondientes a la TABLA IA.

SISTEMA $Neq+ - He \rightarrow Ne(q-1)+ - He+$



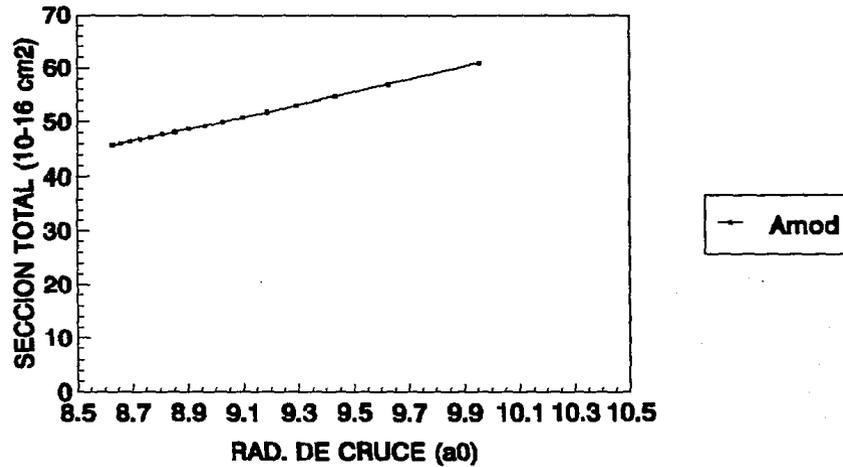
GRAFICA IA2; Datos correspondientes a la TABLA IA.

SISTEMA $Neq+ - He \rightarrow Ne(q-1)+ - He+$



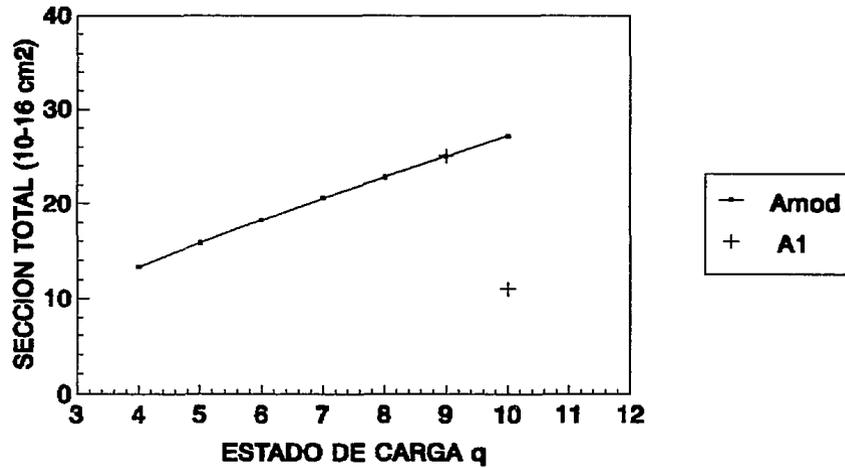
GRAFICA IB1; Datos correspondientes a la TABLA IB.

SISTEMA $\text{Ne}q+ - \text{He} \text{ ----> } \text{Ne}(q-1)+ - \text{He}+$



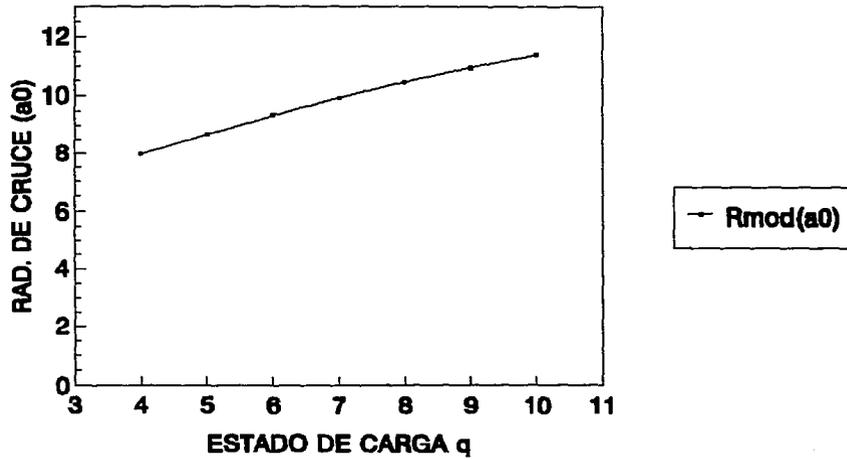
GRAFICA IB2; Datos correspondientes a la TABLA IB.

SISTEMA $Neq+ - Ne \rightleftharpoons Ne(q-1)+ - Ne+$



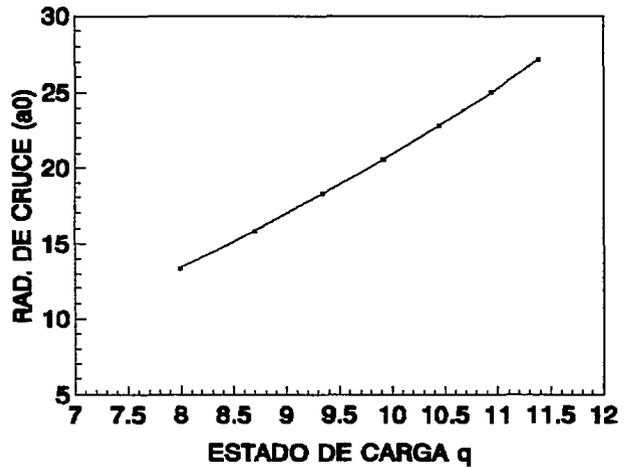
GRAFICA IIA1; Datos correspondientes a la TABLA IIA.

SISTEMA $Neq+ - Ne \text{ ----> } Ne(q-1)+ - Ne+$



GRAFICA IIA2; Datos correspondientes a la TABLA IIA.

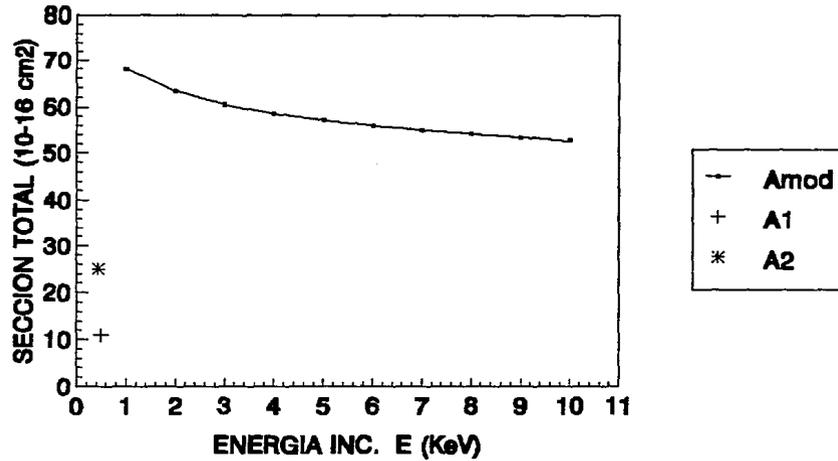
SISTEMA $Neq+ - Ne \rightleftharpoons Ne(q-1)+ - Ne+$



--- Rmod(a0)

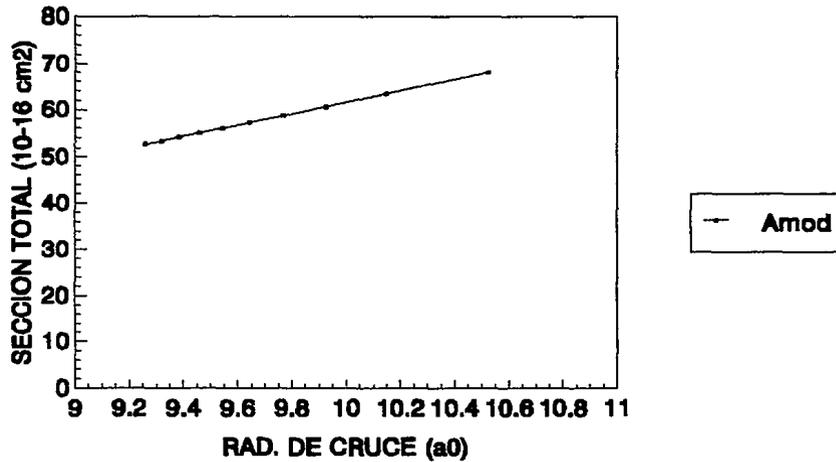
GRAFICA IIAS; Datos correspondientes a la TABLA IIA.

SISTEMA $Neq+ - Ne \rightarrow Ne(q-1)+ - Ne+$



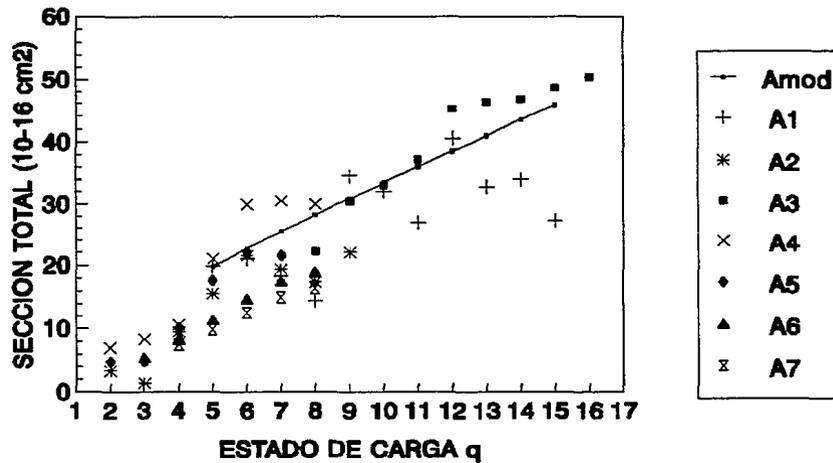
GRAFICA IIB1; Datos correspondientes a la TABLA IIB.

SISTEMA $Neq+ - Ne \rightarrow Ne(q-1)+ - Ne+$



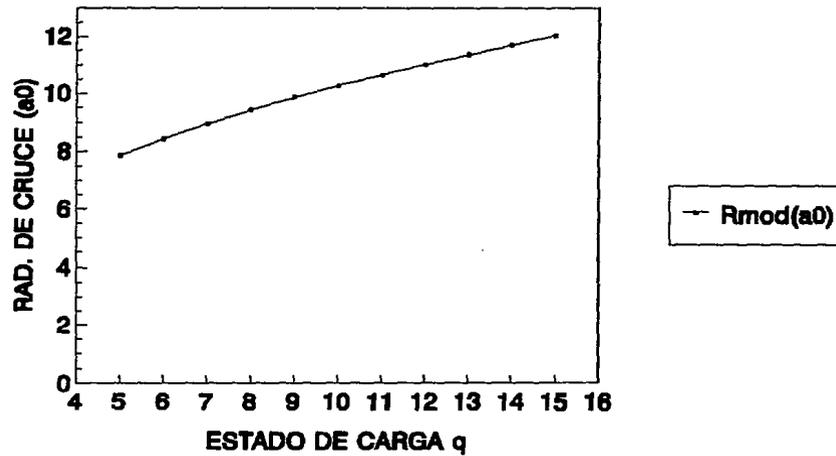
GRAFICA IIB2; Datos correspondientes a la TABLA IIB.

SISTEMA Arq+ - He -----> Ar(q-1)+ - He+



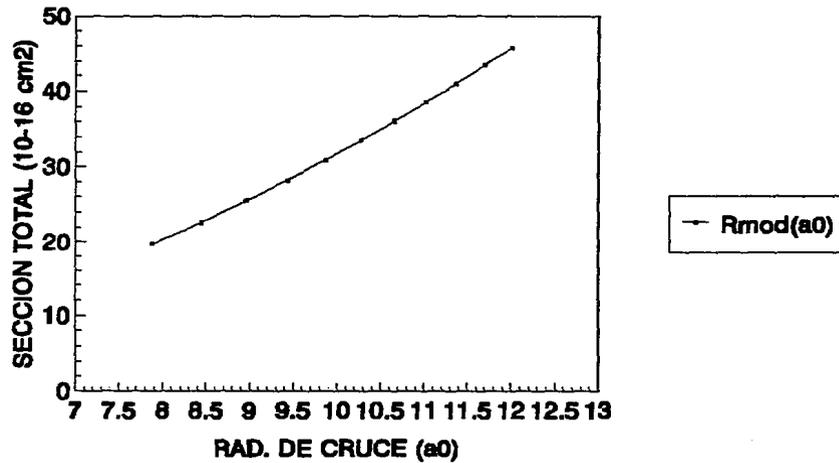
GRAFICA IIIA1; Datos correspondientes a la TABLA IIIA.

SISTEMA $\text{Ar}q^+ - \text{He} \rightarrow \text{Ar}(q-1)^+ - \text{He}^+$



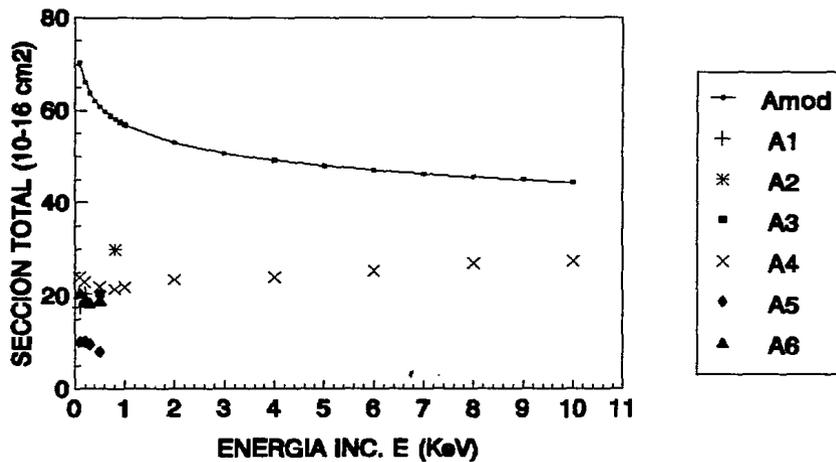
GRAFICA IIIA2; Datos correspondientes a la TABLA IIIA.

SISTEMA $\text{Ar}q^+ - \text{He} \rightarrow \text{Ar}(q-1)^+ - \text{He}^+$



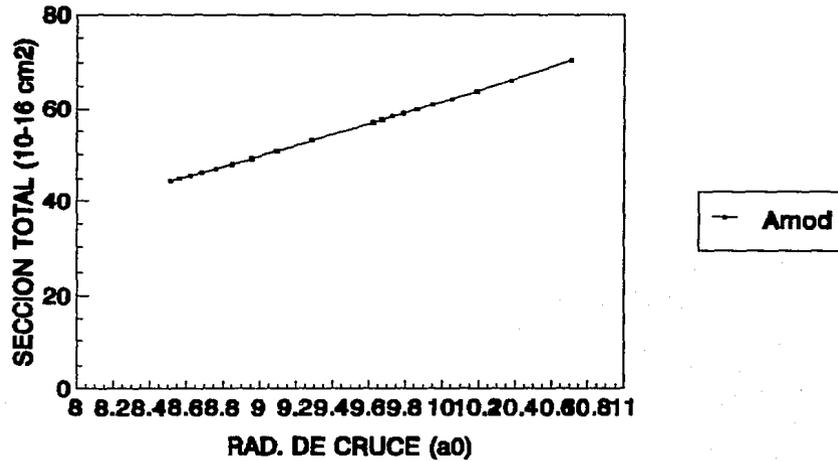
GRAFICA IIIA3; Datos correspondientes a la TABLA IIIA.

SISTEMA $\text{Ar}q^+ - \text{He} \rightarrow \text{Ar}(q-1)^+ - \text{He}^+$



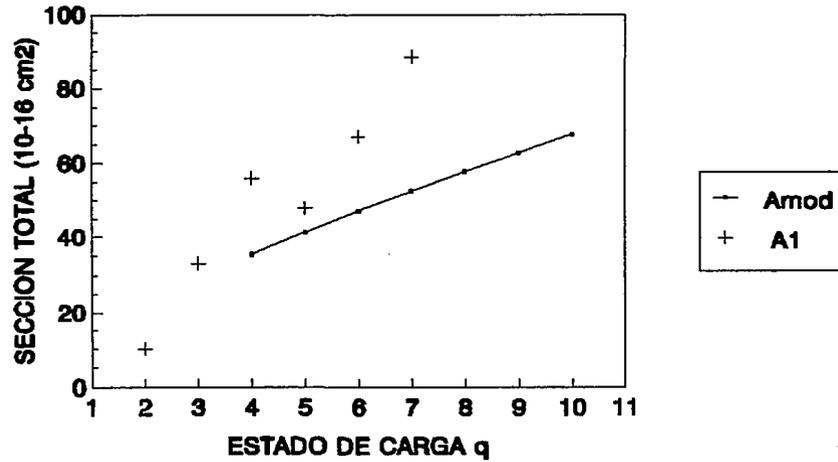
GRAFICA IIIB1; Datos correspondientes a la TABLA IIIB.

SISTEMA Arq+ - He -----> Ar(q-1)+ - He+



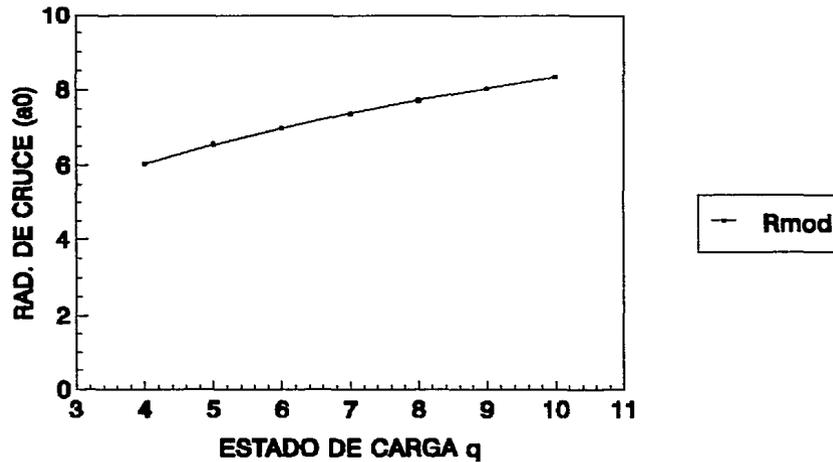
GRAFICA IIIB2; Datos correspondientes a la TABLA IIIB.

COLISION $Arq^+ - Ar \rightarrow Ar(q-1)^+ - Ar^+$



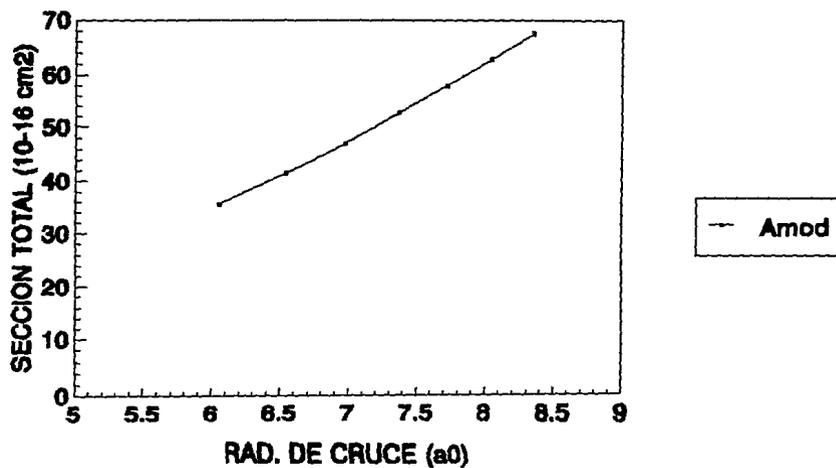
GRAFICA IVA1; Datos correspondientes a la TABLA IVA.

SISTEMA $Arq+ - Ar \rightarrow Ar(q-1)+ - Ar+$



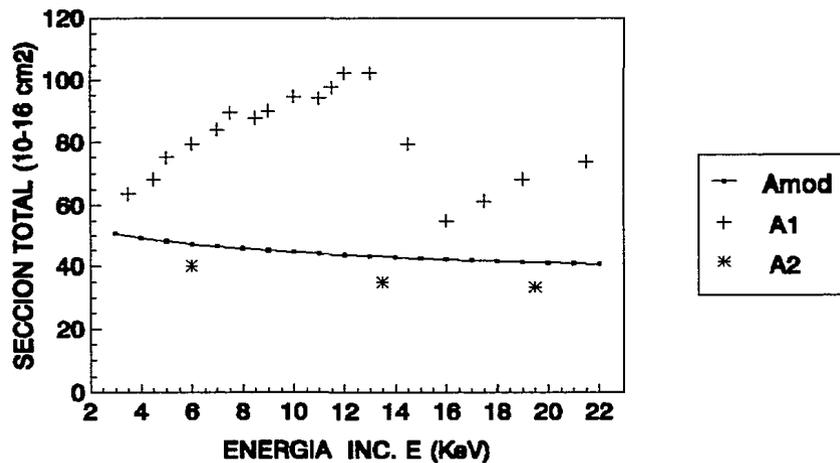
GRAFICA IVA3; Datos correspondientes a la TABLA IVA.

SISTEMA $Arq^+ - Ar \rightarrow Ar(q-1)^+ - Ar^+$



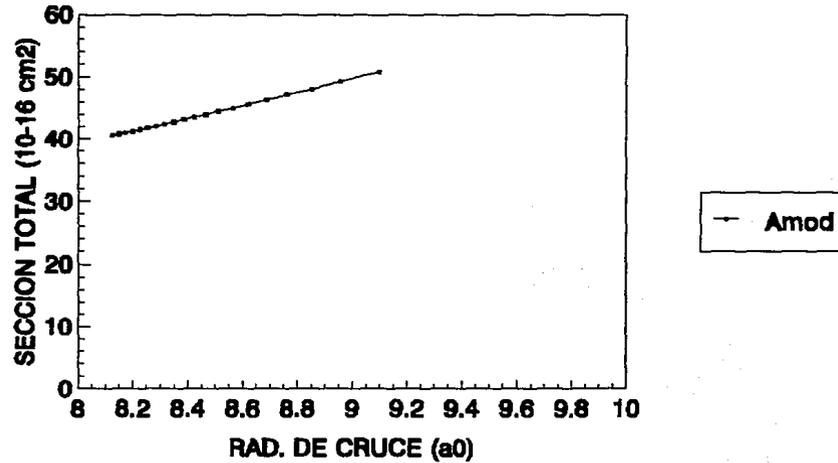
GRAFICA IVA3; Datos correspondientes a la TABLA IVA.

SISTEMA $Ar^{q+} - Ar \rightarrow Ar^{(q-1)+} - Ar^{+}$



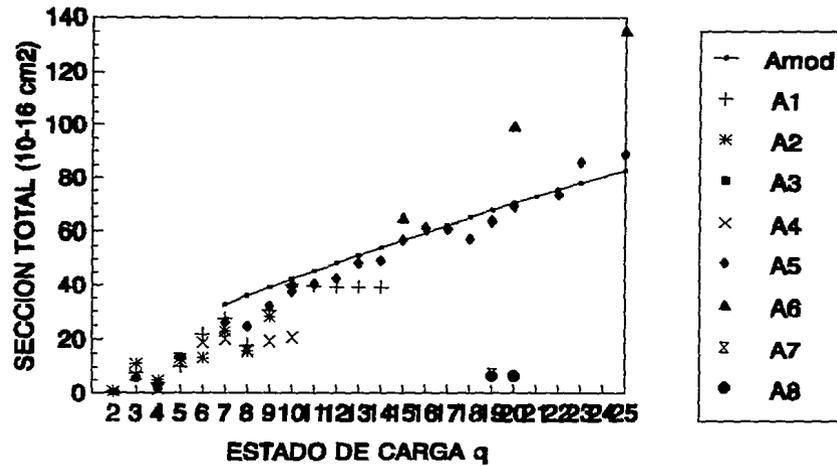
GRAFICA IVB1; Datos correspondientes a la TABLA IVB.

SISTEMA $\text{Ar}^q + - \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^{(q-1)+} - \text{Ar}^+$



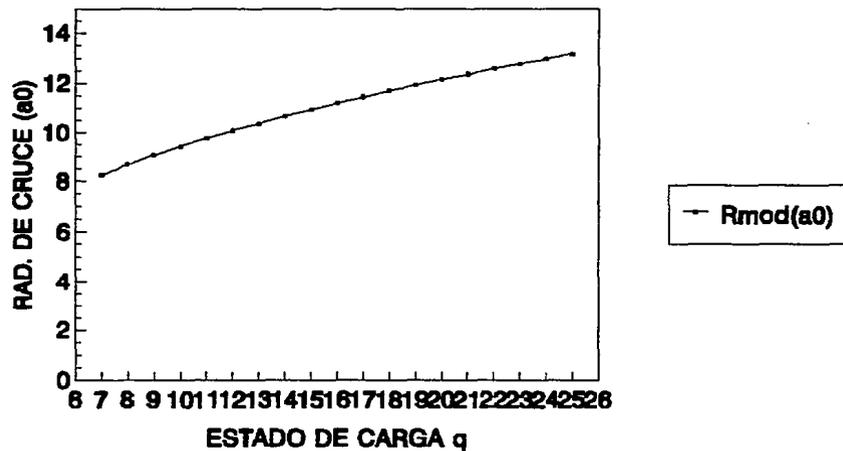
GRAFICA IVB2; Datos correspondientes a la TABLA IVB.

SISTEMA $Krq^+ - He \rightarrow Kr(q-1)^+ - He^+$



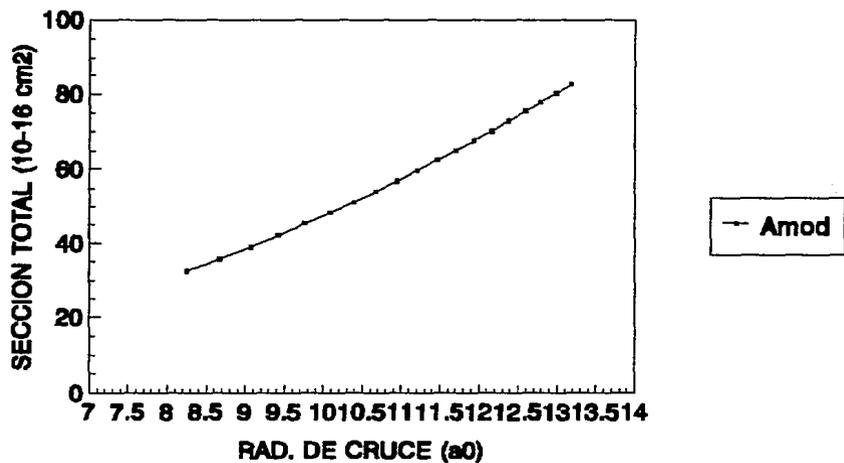
GRAFICA VA1; Datos correspondientes a la TABLA VA.

SISTEMA $Kr q^+ - He \rightarrow Kr(q-1)^+ - He^+$



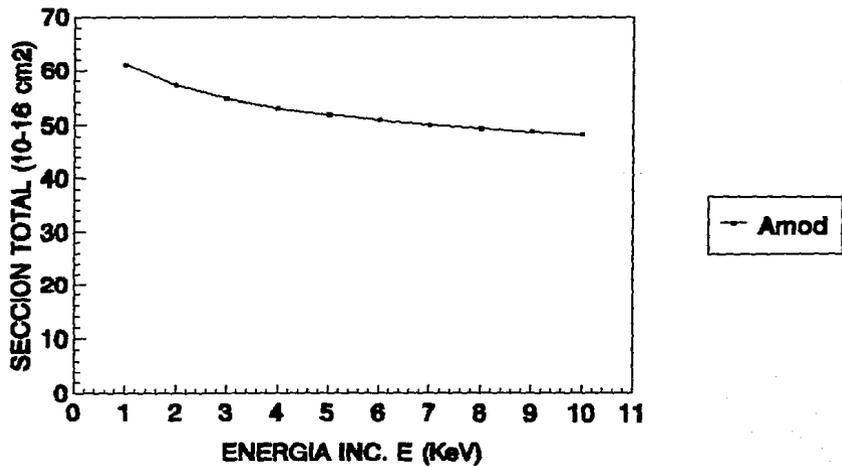
GRAFICA VA2; Datos correspondientes a la TABLA VA.

SISTEMA $Kr q^+ - He \rightarrow Kr(q-1)^+ - He^+$



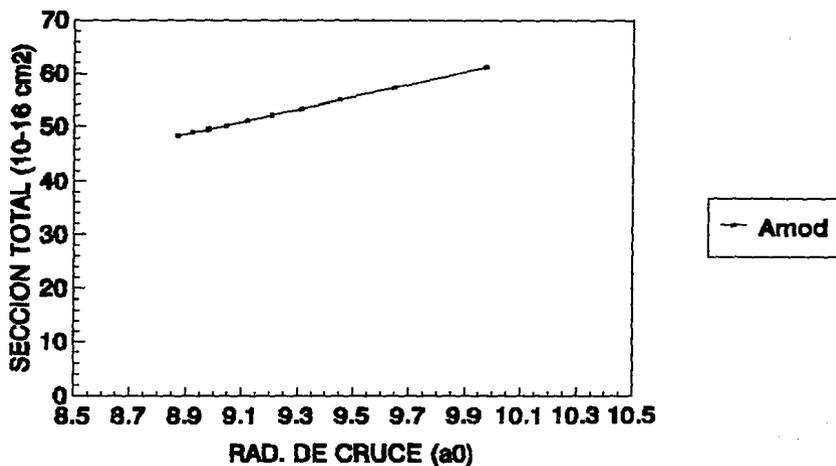
GRAFICA VA3; Datos correspondientes a la TABLA VA.

SISTEMA $Kr q^+ - He \rightarrow Kr(q-1)^+ - He^+$



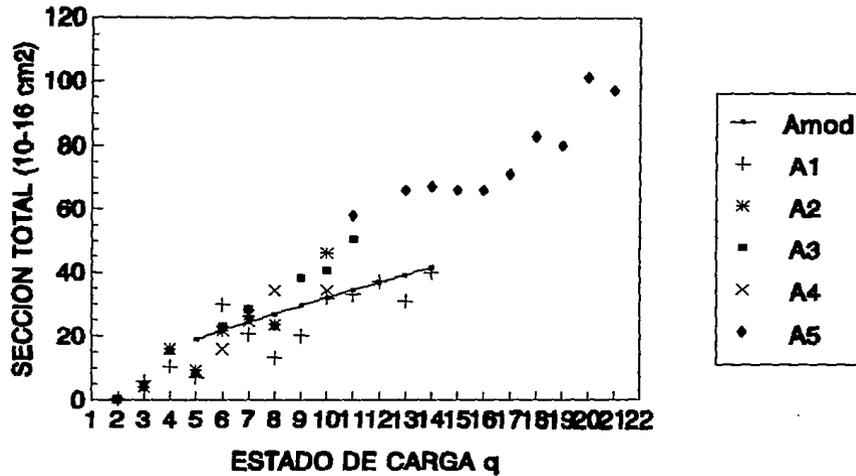
GRAFICA VB1; Datos correspondientes a la TABLA VB.

SISTEMA $Kr q^+ - He$ -----> $Kr(q-1)^+ - He^+$



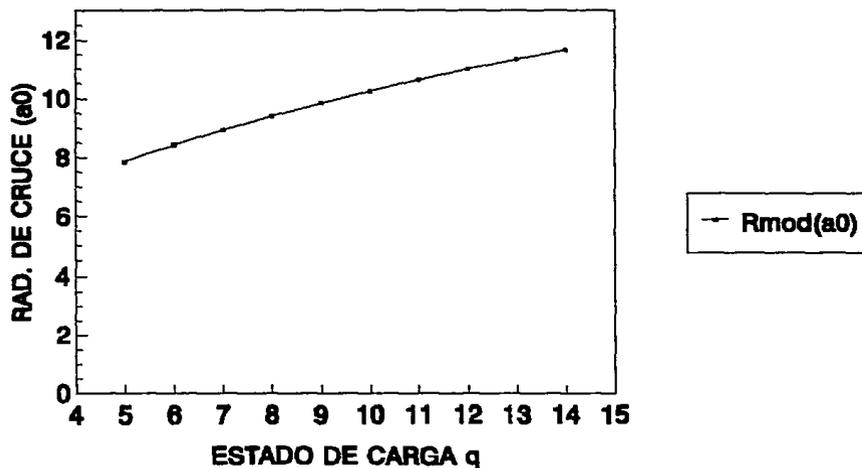
GRAFICA VB2; Datos correspondientes a la TABLA VB.

SISTEMA $Xe q^+ - He \rightarrow Xe(q-1)^+ - He^+$



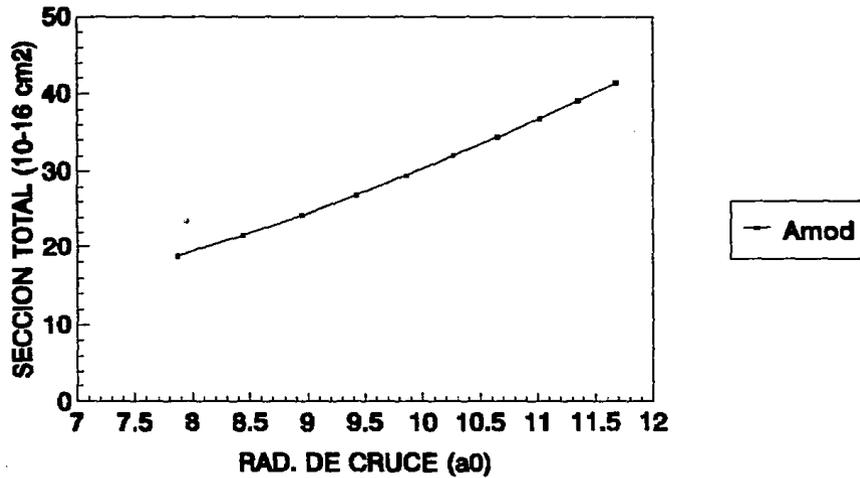
GRAFICA VIA1; Datos correspondientes a la TABLA VIA.

SISTEMA $Xeq^+ - He \rightarrow Xe(q-1)^+ - He^+$



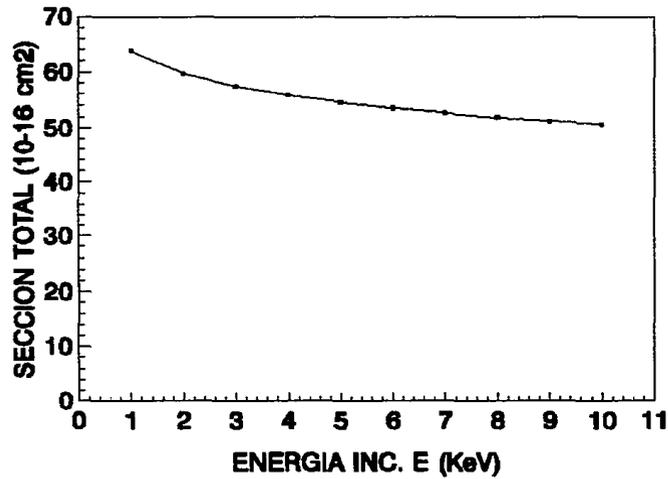
GRAFICA VIA2; Datos correspondientes a la TABLA VIA.

SISTEMA $Xe q+ - He \rightarrow Xe(q-1)+ - He+$



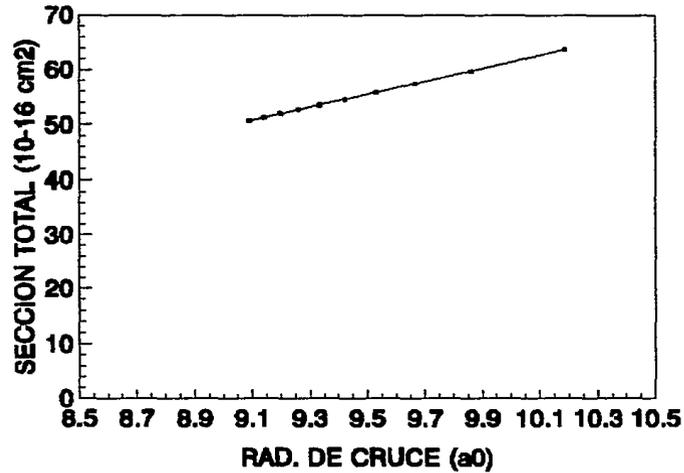
GRAFICA VIA3; Datos correspondientes a la TABLA VIA.

SISTEMA $Xe^{q+} - He \rightarrow Xe^{(q-1)+} - He^+$



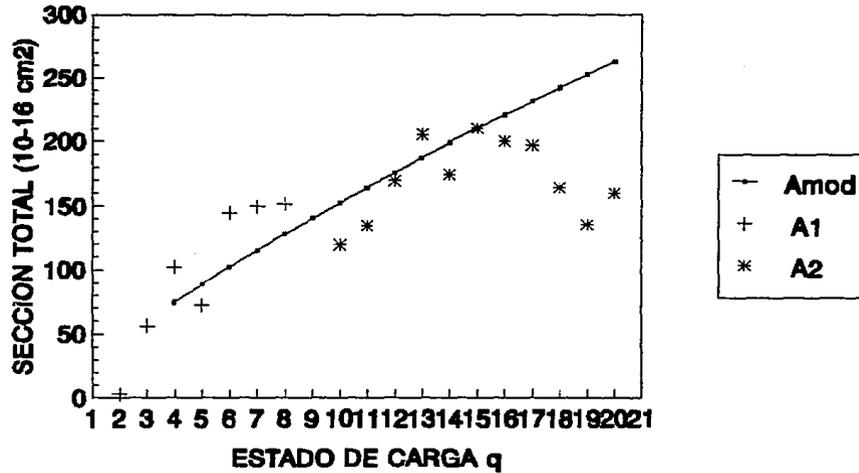
GRAFICA VIB1; Datos correspondientes a la TABLA VIB.

SISTEMA $Xe^{q+} - He \rightarrow Xe^{(q-1)+} - He^{+}$



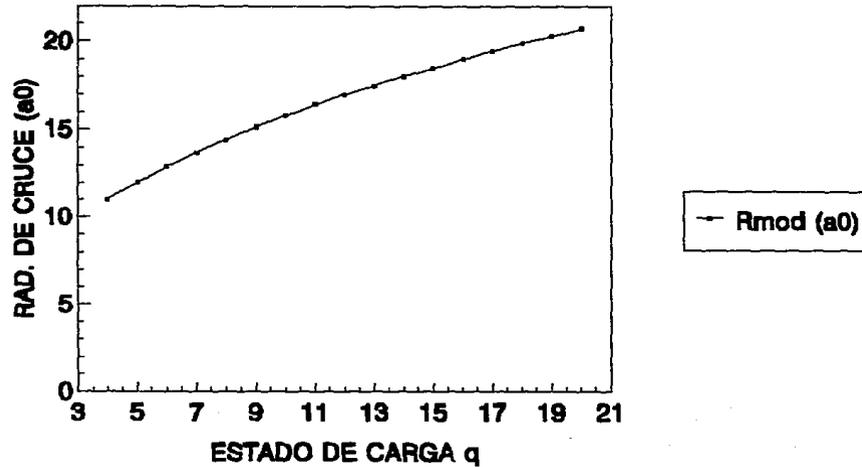
GRAFICA VIB2; Datos correspondientes a la TABLA VIB.

SISTEMA $Xe q^+ - Xe \rightleftharpoons Xe(q-1)^+ - Xe^+$



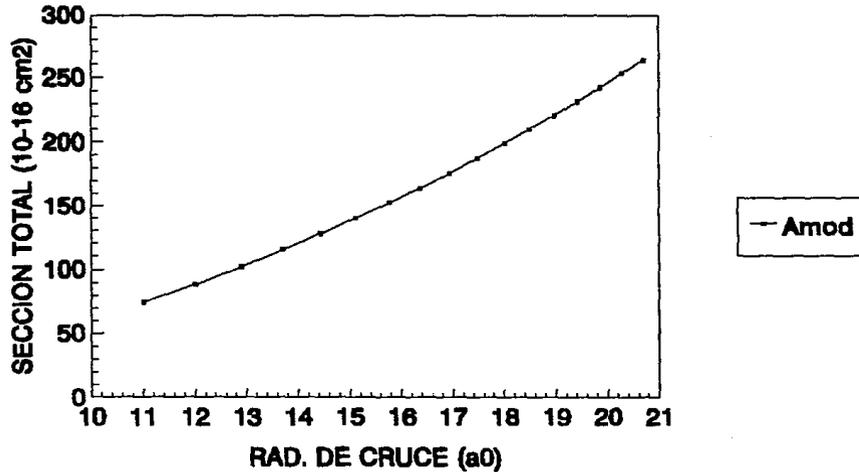
GRAFICA VIIA1; Datos correspondientes a la TABLA VIIA:

SISTEMA $Xe^q+ - Xe \rightleftharpoons Xe^{(q-1)+} - Xe^+$



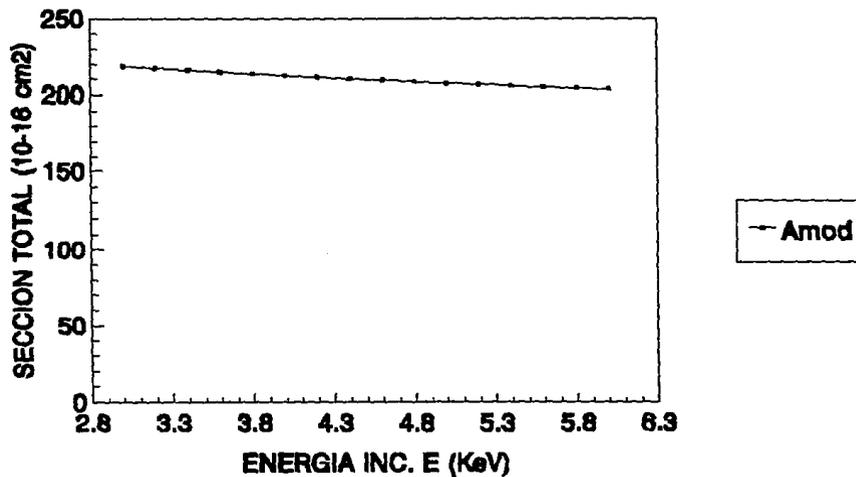
GRAFICA VIIA2; Datos correspondientes a la TABLA VIIA:

SISTEMA $Xe_{q+} - Xe \rightarrow Xe_{(q-1)+} - Xe+$



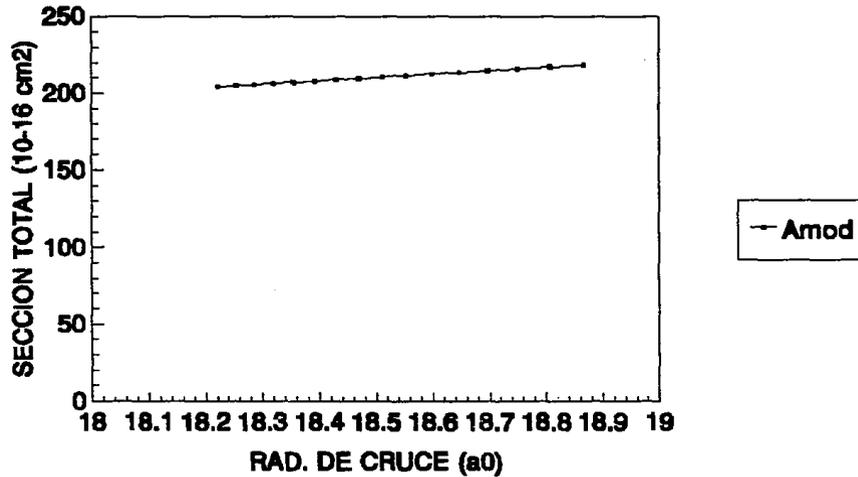
GRAFICA VIIA3; Datos correspondientes a la TABLA VIIA:

SISTEMA $Xe^{q+} - Xe \rightarrow Xe^{(q-1)+} - Xe^{+}$



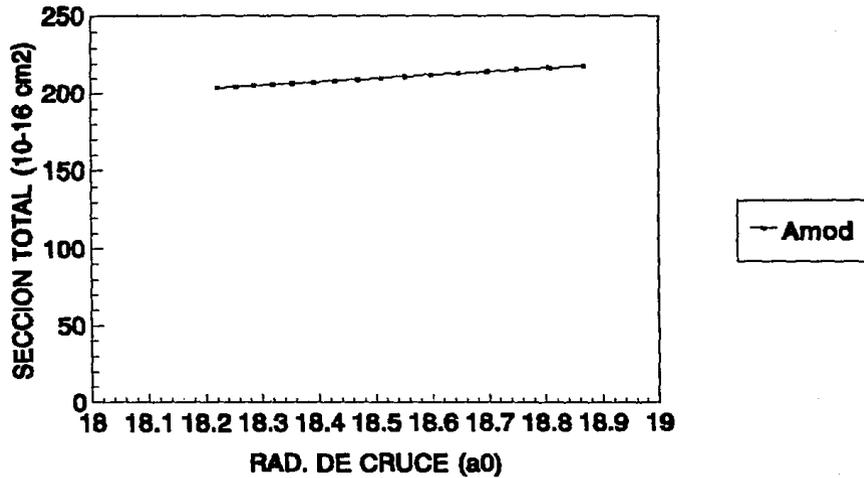
GRAFICA VIIB1; Datos correspondientes a la TABLA VIIB.

SISTEMA $Xe^{q+} - Xe \rightleftharpoons Xe^{(q-1)+} - Xe^{+}$



GRAFICA VIIB2; Datos correspondientes a la TABLA VIIB.

SISTEMA $Xeq+ - Xe \rightarrow Xe(q-1)+ - Xe+$



GRAFICA VIIB2; Datos correspondientes a la TABLA VIIB.

IV.- RESULTADOS Y DISCUSION.

IV.1.- DISCUSION DE SISTEMAS EN COLISION INDIVIDUALES. COMPARACION ENTRE MODELO DE ESFERA ABSORBENTE DE OLSON-SALOP Y DATOS EXPERIMENTALES.



A) Dependencia del Estado de Carga del Proyectoil Incidente.

Este sistema ha sido estudiado previamente de una manera amplia por E. Justiniano et al. [44]; E. Salzborn et al. [51,59]; T. Kusakabe et al. [60]; T. Iwai et al. [65]; C. Schmeissner et al. [66]; y por R. Mann et al. [74]. Los valores de las secciones transversales encontradas por dichos autores cuando se varía el estado de carga se encuentran listadas en la TABLA IA, junto con las calculadas por el modelo de esfera absorbente. Para las secciones transversales calculadas con el modelo de esfera absorbente se tomó como energía incidente a 1.5 KeV correspondiendo a la energía promedio de los datos para $q=8$ de C. Schmeissner et al. [66]. Las secciones transversales calculadas se multiplicaron por 0.246 para normalizarlas todas ellas respecto al dato experimental mencionado. Una gráfica de dicha dependencia se muestra en la GRAFICA IA1. En todos estos resultados para diferentes iones se observa que están dispersos alrededor de una curva universal. Abajo de $q=10$, que es lo que realmente se muestra en la gráfica, la oscilación de las secciones transversales se nota claramente como ha sido observado así mismo por dichos autores. En particular, los saltos en $q=5$, $q=7$ y $q=9$ son muy significativos

porque han sido observados por algunos de los autores mencionados. Las secciones transversales son caracterizadas por grandes valores de éstas, creciendo suavemente y poco pronunciado como Salzborn et al. [51-53] han hecho notar en su estudio sistemático de captura electrónica de proyectiles altamente cargados a bajas energías en colisiones de gases raros en gases raros. Los cálculos con el modelo de Olson y Salop [24], confirman la persistencia de este comportamiento igualmente a bajas energías. Por otro lado, los datos calculados con el modelo de esfera absorbente se incrementan de una manera relativamente suave, aunque el modelo se aplique para $q \geq 4$ y funcione mejor en la región de iones altamente cargados. Una gráfica del radio de cruce (en a_0) respecto al estado de carga q se muestra en la GRAFICA IA2, en donde se observa un comportamiento análogo al de las secciones transversales con respecto al estado de carga q . Graficando las secciones transversales respecto al radio de cruce (en a_0) se manifiesta el comportamiento de dependencia cuadrática esperada y predicha por el modelo de Olson y Salop (GRAFICA IA3).

B) Dependencia de la Energía del Proyectil Incidente.

Este sistema ha sido estudiado previamente por E. Justiniano et al. para $q=4, 6$ y 8 [44], y por T. Iwai et al. para $q= 7, 8$ y 9 [65,67]. En la TABLA IB se encuentran listados los valores de las secciones transversales encontrados por dichos autores cuando se varía la energía del proyectil incidente, junto con los calculados por el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop [24], para los intervalos de energía reportados en la literatura. Para los

cálculos con el modelo de esfera absorbente se escogieron energías de 0.25 KeV a 4.0 KeV a intervalos de 0.25 KeV para comparar con los de Justiniano et al. [44], y $q=8$. La gráfica de esta dependencia se muestra en la GRAFICA IB1. Hay relativamente pocos resultados experimentales y todos ellos se encuentran dispersos, por lo que no se puede decir nada acerca del comportamiento de ellos. La dependencia de las secciones transversales con la energía es suave. Este comportamiento ha sido observado por Salzborn et al. [51-53], similarmente para colisiones entre sí de gases raros a energías arriba de 100 KeV y en colisiones que involucran blancos de H, por Huber y Kahlert [58]. Los cálculos con el modelo de Olson y Salop confirman la persistencia de este comportamiento. La GRAFICA IB2 representa la dependencia de las secciones transversales con el radio de cruce (en a_0), la cual se espera que sea cuadrática como lo predice el modelo de Olson y Salop, pero debido al intervalo cubierto ésta dependencia parece lineal como se esperaría en un intervalo pequeño del radio de cruce.



A) Dependencia del Estado de Carga del Proyectil Incidente.

Este sistema sólo ha sido estudiado por R. Mann et al. [74]. En la TABLA IIA se muestran los datos experimentales de R. Mann et al. [74], así como los calculados por el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop. Para los cálculos con esfera absorbente se utilizó 470 eV como energía incidente, correspondiente a los datos de R. Mann et al. [74], y se multiplicaron todas ellas por 0.237 para normalizarlas a dichos

resultados experimentales. Una comparación de datos se muestra en la GRAFICA IIA1. Debido a los pocos datos experimentales no se puede decir nada con respecto al comportamiento de dicho sistema, aunque se siguen manifestando valores grandes de las secciones transversales y un crecimiento suave poco pronunciado como lo ha notado Salzborn et al. [51-53]. Los cálculos con el modelo de esfera absorbente [24], confirman el comportamiento de dicho sistema. En la GRAFICA IIA2 se muestra la dependencia del radio de cruce (en a_0) con el estado de carga manifestándose una dependencia suave y monótona creciente. En la GRAFICA IIA3 se muestra la dependencia cuadrática de las secciones transversales con el radio de cruce (en a_0) como lo predice el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop.

B) Dependencia de la Energía del Proyectoil Incidente.

Al igual que en la dependencia con el estado de carga, este sistema ha sido estudiado únicamente por R. Mann et al. [74], presentando una única medición para $q=9$ y 10 . Los datos experimentales de R. Mann et al. [74], junto con los calculados por el modelo de esfera absorbente se presentan en la TABLA IIB. Los datos calculados con esfera absorbente se realizaron para $q=9$ y energías de 1 a 10 KeV debido a la escasez de reportes en la literatura, excepto lo reportado por R. Mann et al. [74], con lo cual se comparó únicamente. Los datos se muestran en la GRAFICA IIB1. Para energías mayores que 5 KeV la dependencia de las secciones transversales con la energía es muy suave. En la GRAFICA IIB2 se muestra la dependencia de las secciones transversales con

el radio de cruce (en a_0). Debido al tamaño del intervalo considerado, la dependencia no se muestra con su forma cuadrática como lo predice el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop [24].



A) Dependencia del Estado de Carga del Proyectoil Incidente.

Este sistema ha sido estudiado previamente de una manera amplia por R. Mann [47]; E. Justiniano et al. [61]; J. Vancura et al. [50]; E. Salzborn et al. [51,52,59]; T. Kusakabe et al. [60]; y por M. N. Panov et al. [77]. En la TABLA IIIA se encuentran los datos experimentales reportados cuando se varía el estado de carga q , así como los calculados con el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop [24]. Para las secciones transversales calculadas con el modelo de esfera absorbente se tomó 1.5 KeV como energía incidente correspondiendo al promedio de los datos para $q=5$ de R. Mann [47]. Todas ellas se multiplicaron por 0.360 para normalizarlas a dicho resultado experimental. Los datos se muestran en la GRAFICA IIIA1. Todos los resultados para diferentes energías de incidencia se observa que siguen una curva universal, aunque todas ellas se encuentren dispersas se nota que se pueden coincidir, excepto por un factor numérico. En esta gráfica, además se comparan resultados experimentales con las estimaciones del modelo de esfera absorbente de Olson y Salop [24]. Como en los casos anteriores, se observan grandes valores de las secciones transversales con un crecimiento monótono y suave como lo han hecho notar Salzborn et al [51-53]. La persistencia de este

comportamiento es avalada por los cálculos del modelo de Olson y Salop, igualmente a bajas energías. En la GRAFICA IIIA2 se muestra la dependencia del radio de cruce (en a_0) con el estado de carga, predicho por el modelo de esfera absorbente; asimismo en la GRAFICA IIIA3 se muestra para las secciones transversales respecto al radio de cruce (en a_0).

B) Dependencia de la Energía del Proyectil Incidente.

Igualmente a la dependencia con el estado de carga q , este sistema ha sido estudiado por E. Justiniano et al. [44]; E. Salzbom [51]; J. Vancura et al. [50], y M. Kimura et al. [62], todos ellos para $q=8$ y E. Justiniano et al. [44], para $q=4$ y 6. La TABLA IIIB muestra dichos datos experimentales junto con los cálculos predichos por el modelo de esfera absorbente. Para los cálculos con el modelo de esfera absorbente se escogieron energías entre 0.1 KeV a 10 KeV para comparar con los datos para $q=8$ de M. Kimura et al. [62]. En la GRAFICA IIIB1 se muestran graficados dichos resultados experimentales y se comparan con las estimaciones del modelo de esfera absorbente. Los datos de M. Kimura et al. [62], son compatibles con las predicciones del modelo de esfera absorbente, excepto por un factor, mostrando una débil dependencia de la energía por parte de las secciones transversales para intervalos grandes de ésta, como ya lo hizo notar Salzbom et al. [51-53]. Respecto a los datos experimentales reportados en la literatura no se puede decir nada al respecto debido a los cortos intervalos de energía involucrados. En la GRAFICA IIIB2 se muestra la dependencia de las secciones transversales con el radio de cruce

(en a_0), mostrando la dependencia esperada y predicha por el modelo de esfera absorbente (dicha dependencia se presenta para un intervalo pequeño del radio de cruce por ello a primera vista dicha dependencia parece ser lineal).

$$4) Ar^{q+} + Ar \text{ ----> } Ar^{(q-1)+} + Ar^+$$

A) Dependencia del Estado de Carga del Proyectoil Incidente.

Este sistema ha sido estudiado exclusivamente por H. Klinger et al. [53]. Sus resultados experimentales se muestran en la TABLA IVA junto con los predichos por el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop para el intervalo reportado por el mismo. Para las secciones transversales calculadas con el modelo de esfera absorbente se utilizó 50 KeV como energía incidente correspondiendo a la energía utilizada por H. Klinger et al. [53]. Todas ellas fueron multiplicadas por 1.1 para normalizarlas a los resultados experimentales. Dicho valor del factor de normalización puede deberse a la alta energía de incidencia del proyectoil, región en donde el modelo de esfera absorbente deja de ser aplicable. Gráficamente se muestran en la GRAFICA IVA1. Se nota que los valores experimentales de H. Klinger et al [53], siguen una curva universal, aunque se observa una clara dispersión en $q=5$, en particular dicho salto es muy significativo. Los valores estimados por Olson y Salop están por abajo de los experimentales, aunque debe recordarse que el modelo es mas adecuado para iones mltiplemente cargados, que es su región de validez. Se vuelven a notar grandes valores de las secciones transversales y un crecimiento suave y poco pronunciado como se ha observado

previamente en colisiones de gases raros en gases raros [51-53]. Los cálculos con el modelo de esfera absorbente [24], confirman la persistencia de este comportamiento. En la GRAFICA IVA2 se muestra la dependencia del radio de cruce (en a_0) respecto al estado de carga q , predicha por el modelo de esfera absorbente. La dependencia de las secciones transversales respecto al radio de cruce (en a_0), predicha también por dicho modelo de esfera absorbente de Olson-Salop se presenta en la GRAFICA IVA3.

B) Dependencia de la Energía del Proyectoil Incidente.

Este caso ha sido estudiado previamente por J. Vancura et al. [68], para $q=8$; y por J. Aubert et al. [71], para $q=6$. Los resultados se muestran en la TABLA IVB, junto con los predichos por el modelo de esfera absorbente. Para las secciones transversales calculadas con el modelo de esfera absorbente se tomaron energías de 3 a 22 KeV a intervalos de 1 KeV y $q=8$ para comparar con los datos de J. Vancura et al. [68]. Gráficamente se muestran en la GRAFICA IVB1. Los datos de J. Vancura et al. [68], muy por encima de los estimados por el modelo de esfera absorbente, además de observarse una clara oscilación de dichas secciones transversales. Sin embargo, los datos de J. Aubert et al. [71], para $q=6$ son mas compatibles con los calculados con el modelo de esfera absorbente. La dependencia de las secciones transversales con la energía es suave como se ha hecho notar anteriormente igualmente para colisiones entre sí de gases raros a energías arriba de 100 KeV. Los cálculos con el modelo de esfera absorbente confirman este comportamiento igualmente a bajas energías. La GRAFICA IVB2

representa la dependencia de las secciones transversales con el radio de cruce (en a_0) predicha por el modelo de esfera absorbente.



A) Dependencia del Estado de Carga del Proyectoil Incidente.

Este sistema ha sido estudiado previamente por E. Justiniano et al. [44]; T. Kusakabe et al. [60]; B. A. Huber et al. [58]; C. L. Cocke et al. [63]; T. Iwai et al. [45]; M. Kimura et al. [64], y por H. Tawara et al. [46]. En la TABLA VA se muestran los valores experimentales por ellos reportados junto con los estimados por el modelo de esfera absorbente. Gráficamente se muestran en la GRAFICA VA1. Los resultados para diferentes energías incidentes se observa que siguen una curva universal aunque se encuentran dispersos alrededor de ella. Se comparan con los valores estimados por el modelo de Olson y Salop de esfera absorbente. Para las secciones transversales calculadas con el modelo de esfera absorbente se tomó como energía incidente a la energía promedio de los datos experimentales de Iwai et al. [45], correspondiendo a 15 KeV para el dato $q=15$ y se multiplicaron por 0.539 para normalizarlos todos ellos a este dato experimental. Se observa asimismo, cómo en los casos anteriores, valores grandes de las secciones transversales, creciendo suave y monótonamente, confirmando asimismo también el modelo de esfera absorbente y la persistencia de este comportamiento igualmente a bajas energías. Por otro lado, los datos calculados con esfera absorbente van de $q=8$ a 25 ya que el modelo se aplica a iones múltiplemente cargados y también para poder comparar con los de Iwai et al. [45]. Una

gráfica del radio de cruce (en a_0) respecto al estado de carga predicha por el modelo de esfera absorbente se muestra en la GRAFICA VA2. Análogamente para las secciones transversales respecto al radio de cruce (en a_0) se muestra en la GRAFICA VA3.

B) Dependencia de la Energía del proyectil Incidente.

En este caso no se presentan estudios previos de la dependencia de las secciones transversales con la energía del proyectil incidente. En la TABLA VB se presentan los cálculos predichos por el modelo de esfera absorbente. Estos cálculos se realizaron para $q=8$ y energías incidentes de 1 a 10 KeV. Gráficamente se muestran en la GRAFICA VB1, notando una débil dependencia de las secciones transversales con la energía incidente a intervalos grandes de ésta, confirmando lo observado por Salzborn et al. [51-53], y por Huber y Kahlert [58]. La GRAFICA VB2 representa la dependencia de las secciones transversales con el radio de cruce (en a_0), la cual se espera cuadrática como lo predice el modelo de esfera absorbente (debido al pequeño intervalo en energía considerado en la gráfica, la dependencia parece ser lineal a primera vista).



A) Dependencia del Estado de Carga del proyectil Incidente.

Este sistema ha sido estudiado por E. Justiniano et al. [44]; E. Salzborn et al. [51,54]; T. Kusakabe et al. [60]; D. H. Crandall et al. [42], y H. Andersson et al. [48]. En la TABLA VIA se muestran los valores experimentales por ellos reportados, junto con los predichos por el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop.

Graficamente se muestran en la GRAFICA VIA1. De la misma manera a los casos anteriores, todos los resultados para diferentes energías incidentes siguen una curva universal, aunque todos ellos se encuentran dispersos alrededor de ella. Se observa claramente una oscilación para las secciones transversales abajo de $q=10$. Las secciones transversales son caracterizadas por grandes valores de éstas, creciendo suave y monótonamente como lo ha observado Salzborn et al. [51-53], en colisiones entre sí de gases raros. Se comparan con las estimaciones del modelo de esfera absorbente, donde para las secciones transversales calculadas por dicho modelo se tomó como energía incidente a la correspondiente al promedio de todos los datos reportados por E. Justiniano et al. [44], siendo 5 KeV y $q=10$. Los datos obtenidos por esfera absorbente se multiplicaron por 0.344 para normalizarlos todos ellos a dicho dato experimental. Se confirma la persistencia del comportamiento observado por E. Salzborn et al. [51-53], para bajas energías. Una gráfica del radio de cruce (en a_0) respecto al estado de carga predicho por el modelo de esfera absorbente se muestra en la GRAFICA VIA2. Asimismo, para las secciones transversales respecto al radio de cruce (en a_0) se muestra en la GRAFICA VIA3.

B) Dependencia de la Energía del proyectil Incidente.

Al igual que en el caso 5B), no hay estudios previos. En la TABLA VIB se muestran los cálculos estimados por el modelo de Olson y Salop de esfera absorbente. Los cálculos se hicieron para $q=8$ y energías de 1 a 10 KeV a intervalos de 1 KeV por tratarse de un estado de carga considerable y una energía de incidencia baja,

región en donde el modelo es válido. Los cálculos se muestran en la GRAFICA VIB1, notando una débil dependencia para energías arriba de 4 KeV, confirmándose la observación mencionada para el caso de colisiones entre sí de gases raros. La GRAFICA VIB2 representa la dependencia de las secciones transversales con el radio de cruce (en a_0), la cual se espera cuadrática como lo predice el modelo de esfera absorbente, aunque debido al pequeño intervalo considerado la dependencia parece ser lineal.



A) Dependencia del Estado de Carga del Proyectoil Incidente.

Este sistema ha sido estudiado previamente por D. H. Crandall et al. [42], y por P. Hvelplund [73]. En la TABLA VIIA se muestran los datos experimentales por ellos reportados, junto con los estimados por el modelo de esfera absorbente. Los datos de la TABLA VIIA se muestran en la GRAFICA VIIA1. Se observan fuertes oscilaciones en las secciones transversales para los datos de Crandall et al. [42], y Hvelplund [73], con lo cual algunos están por encima y otros por abajo respecto a la curva teórica predicha por el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop. Para las secciones transversales calculadas con el modelo de esfera absorbente se tomó como energía incidente a 4.5 KeV correspondiendo a la energía promedio de los datos de Crandall et al. [42], para el dato $q=15$. Las secciones transversales calculadas se multiplicaron por 0.696 para normalizarlas todas ellas respecto al dato experimental mencionado. Asimismo, como en los casos anteriores, se observan grandes valores de las secciones transversales y un

crecimiento suave y monótono, confirmándose lo observado anteriormente por Salzborn et al. [51-53], para bajas energías. Una gráfica del radio de cruce (en a_0) respecto al estado de carga predicha por el modelo de esfera absorbente se muestra en la GRAFICA VIIA2 , observándose un débil crecimiento y un comportamiento análogo al de las secciones transversales respecto al estado de carga. Análogamente para las secciones transversales respecto al radio de cruce (en a_0) se muestra en la GRAFICA VIIA3, observándose el comportamiento esperado y predicho por el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop.

B) Dependencia de la Energía del Proyectoil Incidente.

No hay reportes en la literatura de estudios previos de dicho sistema. En la TABLA VIIB se muestran los cálculos estimados por el modelo de esfera absorbente. Dichos cálculos se realizaron para $q=15$ en relación a la coincidencia con el dato correspondiente al de Crandall et al. [42], con energías de 3 a 6 KeV a intervalos de 0.3 KeV comparables a los datos de Crandall et al. [42]. Esta información se muestra en la GRAFICA VIIB1, observándose una débil dependencia de las secciones transversales con la energía incidente del proyectoil y confirmándose lo observado por Salzborn et al. [51-53] y por Huber y Kahlert [58], para colisiones entre sí de gases raros. La GRAFICA VIIB2 representa la dependencia de las secciones transversales con el radio de cruce (en a_0), la cual se espera cuadrática como lo predice el modelo de esfera absorbente, aunque a primera vista parece ser lineal debido al corto intervalo considerado en el radio de cruce (en a_0).

V.- CONCLUSIONES.

En el caso de colisiones de proyectiles altamente cargados de gases raros y especies neutras de gases raros, todas las dependencias de las secciones transversales totales de captura electrónica simple con el estado de carga son caracterizadas por grandes valores de éstas para todos los valores del estado de carga. Además, hay una dependencia suave, monótona creciente y poco pronunciada (Ver GRAFICAS IA1, IIA1,..., VIIA1) como lo han hecho notar Salzborn et al. [51-53], tanto para captura simple como para captura múltiple, de un estudio sistemático de captura electrónica de proyectiles altamente cargados a bajas energías en colisiones de gases raros en gases raros. Ellos han observado asimismo que estas secciones transversales siguen ciertas reglas de escalamiento. Esta tendencia en el comportamiento de los gases raros es justamente reflejada en la dependencia del elemento de matriz de acoplamiento sobre el potencial de ionización del blanco (ec. 74), en donde se puede observar que a una distancia internuclear dada, el mas alto potencial de ionización corresponde al mas pequeño elemento de matriz de acoplamiento y viceversa, de ahí que es mas difícil remover al electrón del blanco. Las secciones transversales calculadas con el modelo de esfera absorbente para diferentes energías de incidencia de proyectiles altamente cargados de gases raros sobre gases raros, fueron multiplicadas por un factor que se encuentra entre 0.2 y 0.7, para normalizarlas todas ellas a las secciones transversales experimentales a las cuales fueron

comparadas. Ellas se muestran en las GRAFICAS IA1, IIA1, ..., VIIA1, junto con los datos experimentales. La forma general de las secciones transversales calculadas concuerda muy bien con los datos experimentales, aunque en magnitud no. La única cantidad ajustable en los cálculos de secciones transversales con el modelo de esfera absorbente es el elemento de matriz de acoplamiento $H_{nn}=9.13\text{EXP}(-1.324\alpha R_c/Z^{1/2})$, el cual fue obtenido a conveniencia de un estudio de un gran número de sistemas iones múltiplemente cargados-hidrógeno atómico [24]. Si los valores de 9.13 y 1.324 se incrementan en un 18% en promedio, las magnitudes de las secciones transversales calculadas se aproximan a los valores experimentales, pero el acuerdo en general con los datos no es tan bueno como con los datos originales.

Cuando se comparan los datos calculados con esfera absorbente con aquellos de otros autores, debe tomarse en cuenta que todos ellos fueron medidos a diferentes energías de colisión. De acuerdo al modelo de esfera absorbente, las secciones transversales ascenderían conforme decrece la velocidad de colisión [23]. Sin embargo, las secciones transversales medidas por E. Justiniano et al. [61], y R. Mann [47], a bajas energías de colisión son claramente mas pequeñas que las estimadas por el modelo.

Si se observa la dependencia de la energía de los datos medidos para el sistema $\text{Ar}^{8+} + \text{He}$, mostrados en la GRAFICA IIIB1, los cuales fueron medidos por diferentes grupos, hay una curva universal y todos los datos parecen consistentes con esta. Es muy posible que la diferencia entre las secciones transversales

calculadas con esfera absorbente y las de R. Mann [47], sea debido a la variación de la energía de las secciones transversales, al menos el sistema $\text{Ar}^{8+} + \text{He}$ indica lo mencionado. En el caso de no tratarse de gases raros, por ejemplo el sistema Ar^{4+} sobre H_2 ($8 \leq q \leq 10$), los datos obtenidos por C. Can et al. [77], a 2.0q KeV son mucho más cercanos en energía que los datos calculados con el modelo de esfera absorbente y sus secciones transversales medidas parecen ser también bajas. La dependencia de la energía por parte de las secciones transversales también es muy suave. Este comportamiento ha sido observado previamente por E. Salzborn et al. [51-53], igualmente para colisiones entre sí de gases raros a energías arriba de 100 KeV y en blancos que involucran H_2 por Huber y Kahlert [58]. Los cálculos con el modelo de esfera absorbente de Olson y Salop confirman la persistencia de este comportamiento igualmente a bajas energías.

Como se observa de todas las gráficas presentadas para los diferentes sistemas en colisión, los datos obtenidos con el modelo de esfera absorbente: secciones transversales totales de captura electrónica simple y radio de cruce (en a_0) respecto al estado de carga, GRAFICAS IA1, IIA1,...,VIIA1 y IA2, IIA2,...,VIIA2, respectivamente; secciones transversales respecto al radio de cruce (en a_0), GRAFICAS IA3, IIA3,..., VIIA3; dependencia de las secciones transversales respecto a la energía incidente del proyectil, GRAFICAS IB1, IIB1,..., VIIB1; y secciones transversales respecto al radio de cruce (en a_0) cuando se varía la energía, GRAFICAS IB2, IIB2,..., VIIB2, a pesar de la aproximación a primer

orden y el conocimiento limitado que incluye un comportamiento incorrecto a altas energías y estados simples de carga, prueba ser extremadamente útil para hacer estimaciones de las secciones transversales totales de captura electrónica simple; son frecuentemente confiables dentro de un factor de 2 o 3. Mientras pocos de tales tratamientos existan en la literatura, el incremento en la disponibilidad de datos experimentales estimularán el trabajo en esta dirección. Así en un futuro cercano será posible hacer una comparación crítica entre teoría y el experimento.

Otra conclusión es hacer notar el alcance del modelo desarrollado en los capítulos anteriores, aplicándose a resultados experimentales conectados con el problema de colisiones de iones múltiplemente cargados. La ventaja de disponer de un modelo sencillo ofrece posibilidades de un puente entre la teoría y experimento. Este modelo para un sistema de ion múltiplemente cargado de gas raro en un gas raro como los estudiados requiere de 15 minutos para su evaluación. Este trabajo recomienda el uso de su programa en colisiones de iones múltiplemente cargados con blancos atómicos ya que involucra correctamente la interpretación física del proceso y se espera un buen acuerdo con los resultados experimentales. Esto es muy valioso ya que permite estimar diferentes reacciones, las cuales no pueden ser experimentalmente accesibles por las limitaciones experimentales de los laboratorios de investigación, pero que son de importancia en física básica, física de la atmósfera, física de plasmas y astrofísica.

Por otra parte, la interpretación de las curvas universales se

puede explicar en base a las consideraciones que se llevaron a cabo en el modelo para explicar el proceso de captura, esto es:

1) La transición electrónica toma lugar en un espectro de energía iónica donde la densidad de estados es suficientemente alta. Generalmente esta suposición es justificada para iones múltiplemente cargados con valores grandes de carga iónica ($z \geq 10$). Para valores menores de z , donde esta condición no es completamente satisfecha, el modelo sobre-estima el valor de la probabilidad de transición.

2) Otra característica del proceso de transferencia electrónica incluida en el tratamiento, es su carácter resonante. Esto implica que los procesos de pérdida electrónica el cual involucra transferencia de energía no son incluidos en la probabilidad de transición.

REFERENCIAS.

- [1].- A. V. Vinogradov e I. I. Sobelman, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 63, 1919(1972), [Sov. Phys.- JETP 36, 1115(1973)].
- [2].- B. Miller, R. W. Gould, E. A. Frieman y A. W. Trivelpiece, Review of the Research Program of the Division of Controlled Thermonuclear Research, ERDA-39 (Energy Research and Development Administration, Washington D. C., 1974), pp. 145-
- [3].- A. Salop y R. E. Olson, Phys. Rev. A 13, 1312(1976).
- [4].- A. Salop, Phys. Rev. A 13, 1321(1976).
- [5].- R. E. Olson, F. T. Smith y E. Bauer, Appl. Opt. 10, 1848 (1971).
- [6].- D. Brandt, Nuc. Ins. Met. 214, 93(1983).
- [7].- L. D. Landau, Z. Phys. Sowjet 2, 46(1932).
- [8].- C. Zener, Proc. Roy. Soc. A, 137, 696(1932).
- [9].- D. R. Bates, Proc. Roy. Soc. A 257, 22(1960).
- [10].- D. R. Bates, H. C. Johnsston e I. Stewart, Proc. Phys. Sov., 84, 317(1964).
- [11].- E. E. Nikitin, Opt. Spectrosc 11, 246(1961);13, 431(1962). E. E. Nikitin, Discuss. Faraday Soc., 33, 14(1962). E. E. Nikitin y V. K. Kykhovskii, Opt. Spectrosc 17, 444(1964). V. K. Kykhovskii, E. E. Nikitin y M. Ya. Ovchinnikov, Sov. Phys., JETP 20, 500 (1963).
- [12].- E. C. G. Stueckelberg, Helv. Phys. Acta 5, 370(1932).
- [13].- W. Lichten, Phys. Rev. A 139, 27(1965).. T. A. Green y R. E. Johnson, Phys. Rev., A 152, 9(1966). D. Coffey Jr.; D. C. Lorentz y F. T. Smith, Phys. Rev. A 187, 201(1969).

- [14].- L. L. Marino, Phys. Rev. 152, 46(1966). S. Dworetzky, R. Novick, W. W. Smith y N. Tolch, Phys. Rev. Lett. 18, 939 (1967). J. R. Peterson y D. C. Lorentz, Phys. Rev. 182, 152 (1969).
- [15].- N. F. Mott y H. S. W., Massey, The Theory of Atomic Collisions (Clarendon Press, Oxford, 1965), p. 650.
- [16].- Yu. N. Demkov, Sov. Phys. JETP 18, 138(1964).
- [17].- D. Rapp y W. E. Francis, J. Chem. Phys. 37, 2631(1962).
- [18].- D. Hund, Z. Physik, 40, 742(1927).
- [19].- Neumann y Wigner, Phys. Z., 30, 467(1929).
- [20].- C. Kemble y C. Zener, Phys. Rev. 33, 536(1929).
- [21].- Whitaker y Watson, Modern Analysis, pp. 347-349, 4th. ed., 1952.
- [22].- A. Sarmiento Nava, Tesis Profesional, Fac. Ciencias Químicas e Industriales, UAEM, 1993.
- [23].- R. E. Olson, J. Chem. Phys. 56, 2979(1972).
- [24].- R. E. Olson y A. Salop, Phys. Rev. A 14, 579(1976).
- [25].- J. Van Den Bos, J. Chem. Phys. 52, 3234(1970).
- [26].- R. E. Olson, Phys. Rev. A 6, 1822(1972).
- [27].- J. B. Hasted y A. Y. J. Chong, Proc. Phys. Soc. 80, 441 (1962).
- [28].- E. Bauer, E. R. Fisher y F. R. Gilmore, J. Chem. Phys. 51, 4173 (1969).
- [29].- B. M. Smirnov, Sov. Phys. Dokl. 10, 218(1965); 12, 242 (1967).

- [30].- I. Popescu Iovitsu y N. Ionescu-Pallas, Sov. Phys. Tech. Phys. 4, 781(1960).
- [31].- N. Bohr y J. Lindhard, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Phys. Medd. 28, (1954), núm. 7.
- [32].- N. Bohr, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Pys. Medd. 18, (1948), núm. 8.
- [33].- H. C. Brinkman y H. A. Kramers, Proc. Acad. sci. Amsterdam 33, 973(1930).
- [34].- J. D. Power, Philos. Trans. R. Soc. Lond. 274, 663(1973).
- [35].- J. L. Magee, Dis. Faraday Soc. 12, 33(1952).
- [36].- C. E. Moore, Atomic Energy Levels, NBS circ. no. 467 (U. S. GPO, Washington, D. C., 1949, 1952 y 1958), Vols. I, II y III.
- [37].- H. B. Gilbody, Phys. Scr. 23, 143(1981).
- [38].- R. A. Phaneuf, Phys. Rev. A, 24, 1138(1981).
- [39].- C. Can et al., Phys. Rev. A, 31, 72(1985).
- [40].- B. A. Huber, Z. Phys. A, 299, 307(1981).
- [41].- W. Scim et al., J. Phys B, 14, 3475(1981). Los datos para $\text{Ne}^{9+} + \text{H}_2$ fueron tomados de W. Scim, Ph. D. Dissertation, Justus-Liebig-Universität, Giessen(1981).
- [42].- D. H. Crandall, R. A. Phaneuf y F. W. Meyer, Phys. Rev. A, 22, 379(1980).
- [43].- T. V. Goffee (Información Personal).
- [44].- E. Justiniano, C. L. Cocke, T. J. Grey, R. Dubois, W. Waggoner, R. Schuch, H. Schmidt-Bocking y H. Ingmensen, Phys. Rev. A, 29, 1088(1984).

- [45].- T. Iwai, Y. Kaneko, M. Kimura, N. Kobayashi, A. Matsumoto, S. Ohtani, K. Okuno, S. Takagi y S. Tsurubuchi, J. Phys. B, 17, L95(1984).
- [46].- H. Tawara, T. Iwai, Y. Kaneko, M. Kimura, N. Kobayashi, A. Matsumoto, S. Ohtani, K. Okuno, S. Takagi y S. Tsurubuchi, J. Phys. B, 18, 337(1985).
- [47].- R. Mann, Z. Phys. D, 3, 85(1986).
- [48].- H. Andersson, G. Astner y H. Cederquist, J. Phys. B, 21, L187(1988).
- [49].- H. Cederquist et al., Phys. Rev. Lett. 62, 1465(1989).
- [50].- J. Vancura, V. J. Marchetti, J. J. Perotti y V. O. Kostroun, Phys. Rev. A, 47, 3758(1993).
- [51].- E. Salzbom y A. Müller, In invited Papers and Progress Reports of the eleventh ICPEAC, Kyoto, 1979, edited by N. Oda and K. Takayanagi (North-Holland, Amsterdam, 1980), p. 407.
- [52].- A. Müller y E. Salzbom, Phys. Lett. 62A, 391(1977).
- [53].- H. Klinger, A. Müller y E. Salzbom, J. Phys. B, 8, 230(1975).
- [54].- R. Vane, M. H. Prior y R. Marrus, Phys. Rev. Lett. 46, 107(1981).
- [55].- H. F. Beyer, K. H. Schartner y F. Folkmann, J. Phys. B, 13, 2459 (1980).
- [56].- R. Mann, F. Folkmann y H. F. Beyer, J. Phys. B, 14, 1161 (1981). R. Mann, H. F. Beyer y F. Folkmann, Phys. Rev. Lett. 46, 646(1981).

- [57].- R. K. Janev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 52, 1221(1967) [Sov. Phys. JETP 25, 812(1967)].
- [58].- B. A. Huber y H. J. Kahlert, J. Phys. B, 13, L159(1980).
- [59].- A. Müller, H. Klinger y E. Salzborn, J. Phys. B, 9, 291 (1976). A. Müller, C. Achenbach y E. Salzborn, Phys. Lett. 70A, 410 (1979).
- [60].- T. Kusakabe, H. Hanaki, N. Nagai, T. Horinouchi, I. Konomi y M. Sakisaka, Memoirs of the Faculty of Engineering, Kyoto University, 1983 (No publicado).
- [61].- E. Justiniano, C. L. Cocke, T. J. Gray, R. D. DuBois, C. Can, W. Waggoner, R. Schuch, H. Schmidt-Böcking, H. Ingwersen, Phys. Rev. A, 29, 1088(1984). E. Justiniano, C. L. Cocke, T. J. Gray, R. D. DuBois, C. Can, Phys. Rev. A24, 2953 (1981).
- [62].- M. Kimura y R. E. Olson, Phys. Rev. A, 31, 489(1985).
- [63].- C. L. Cocke, R. D. DuBois, T. J. Gray y E. Justiniano, IEEE Trans. Nucl. Sci., NS-28, 1032(1981).
- [64].- M. Kimura, T. Iwai, Y. Kaneko, N. Kobayashi, A. Matsumoto, S. Ohtani, K. Okuno, S. Takagi, H. Tawara y S. Tsurubuchi, J. Phys. Soc. Japan, 53, 2224(1984).
- [65].- T. Iwai, Y. Kaneko, M. Kimura, N. Kobayashi, S. Ohtani, K. Okuno, S. Takagi, H. Tawara y S. Tsurubuchi, Phys. Rev. A, 26, 105(1982).
- [66].- C. Schmeissner, C. L. Cocke, R. Mann y W. Meyerhof, Phys. Rev. A, 30, 1661(1984).

- [67].- H. Imamura, Y. Kaneko, T. Iwai, S. Ohtani, N. Kobayashi, K. Okuno, S. Tsurubuchi, M. Kimura y H. Tawara, Nucl. Ins. Met., 188, 233(1981).
- [68].- J. Vancura y V. O. Kostroun, Vith. International Conference on the Physics of Highly Charged Ions, Manhattan, Kansas, edited by Patrick Richard, Martin Stockli, C. Lewis Cocke y C. D. Lin (Manhattan, Kansas, 1992), p. 109.
- [69].- E. H. Nielsen, L. H. Andersen, A. Báráni, H. Cederquist, P. Hvelplund, H. Knudsen, K. B. MacAdam y J. Sorensen, J. Phys. B, 17, L139(1984).
- [70].- C. L. Cocke, R. D. DuBois, T. J. Gray, E. Justiniano y C. Can. Phys. Rev. Lett. 46, 1671(1981).
- [71].- J. Aubert, S. Bliman, R. Geller, B. Jacquot B. y Van Houtte D., Phys. Rev. A, 22, 2403(1980).
- [72].- G. Astner et al., 1984, será publicado.
- [73].- P. Hvelplund, A. Báráni, H. Cederquis y J. O. K. Pedersen, J. Phys. B, 20, 2515(1987).
- [74].- R. Mann, C. L. Cocke, A. S. Schlachter, M. Prior y R. Marrus, Phys. Rev. Lett. 49, 1329(1982).
- [75].- H. Winter, E. Bloemen y F. J. de Heer, J. Phys. B, 10, L453(1977).
- [76].- S. Bliman, M. Bonnefoy, J. J. Bonnet, S. Dousson, A. Fleury, D. Hitz y B. Jacquot, Phys. Scr. T3, 63, (1983).
- [77].- M. N. Panov, A. A. Basalaev y K. O. Lozhkin, Phys. Scr. T3, 124, (1983).