

## EFECTO DE LA EXCENRICIDAD DE LA ORBITA ELECTRONICA DEL ATOMO DE H EN EL CALCULO DEL PODER DE FRENADO EN LA COLISION DE UN PROTON CON UN ATOMO DE H(1s), MEDIANTE EL METODO CTMC

J. M. RODRÍGUEZ AGUIRRE<sup>(1)</sup>; E. CUSTIDIANO<sup>(1)</sup> y M.M. JAKAS<sup>(2)</sup>

**RESUMEN:** Se aplicó el método de trayectorias clásicas monte carlo (CTMC) al cálculo de las secciones eficaces de ionización, captura, excitación y stopping total de la colisión de un protón con un átomo de hidrógeno.

Se utilizó las ecuaciones del movimiento planetario de Kepler para representar el electrón 1s en el campo Coulombiano del protón y se generaron las condiciones iniciales del electrón mediante la función de distribución microcanónica.

Se consideraron las excentricidades  $\varepsilon=0.75$ ,  $\varepsilon=0.001$  y  $\varepsilon$  aleatoria (en el rango  $[0,1]$ ) para el cálculo de las secciones eficaces y stopping total. Los resultados muestran que las secciones eficaces para  $\varepsilon=0.75$  y  $\varepsilon$  aleatoria coinciden entre sí, no así para  $\varepsilon=0.001$ ; mientras que para el stopping total los resultados reproducen bien los resultados experimentales de energías intermedias y altas.

**ABSTRACT:** The Classical trajectory Monte Carlo Method (CTMC) is applied to the calculation of ionization, excitation, charge transfer and Stopping cross sections in the proton-Hydrogen collision process.

Kepler equations for planetary motion are used to resemble the 1s electron in the proton Coulombic field and the electron initial conditions were generated by a microcanonical distribution function.

Fixed eccentricities  $\varepsilon=0.75$ ,  $\varepsilon=0.001$  and random ( $[0,1]$  range) eccentricities were used for the calculation of cross sections and stopping. The results shows that the  $\varepsilon=0.75$  and  $\varepsilon$ =random cross sections coincide between them, that is not the case for the  $\varepsilon=0.001$  distribution; also the total stopping results are in good agreement with the experimental data in the high and intermediate energy range.

**Palabras claves:** Monte Carlo, ionización, sección eficaz, colisión, captura

**Key words:** Monte Carlo, ionization, Cross Section, collision, capture

### INTRODUCCIÓN

El método de Trayectorias Clásicas Monte Carlo, CTMC, se aplica con éxito en el cálculo de secciones eficaces de ionización, excitación y transferencia de carga de la colisión de protones y átomos de hidrógeno. En el mismo se aplica la dinámica clásica exacta sobre trayectorias cuyas condiciones iniciales se obtienen mediante funciones de distribución clásicas. El método de cálculo es exacto en el sentido de que ninguna aproximación dinámica es introducida [4].

En este método se determina el estado inicial del electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno, mediante una función de distribución clásica [1-2].

---

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

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

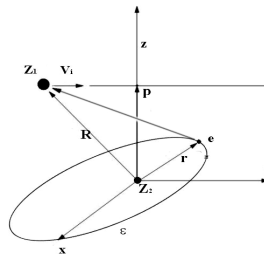
Las discrepancias observadas en los valores de secciones eficaces de ionización, respecto de los valores experimentales, en la región de bajas energías, han sido atribuidas a la incapacidad de la distribución microcanónica para reproducir correctamente la distribución cuántica radial [2-3].

### MÉTODO

En la aplicación del método CTMC para la determinación de poderes de frenado se considera un sistema compuesto de tres partículas de masa  $m_i$  y cargas  $Z_i$ . En el caso particular del proceso de colisión  $H^+ - H$ , y utilizando unidades atómicas; La ecuación que gobierna el movimiento del electrón será entonces [4]:

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

donde  $m$  es la masa del electrón y  $e$  la carga elemental y  $Z_1$  y  $Z_2$  son la carga del ión y del núcleo, respectivamente. Y  $\vec{R} = \vec{p} + t\vec{v}_0$  siendo  $\vec{v}_0$  la velocidad inicial del ión y  $\vec{p}$  el parámetro de impacto (Fig. 1).



**Fig. 1:** Descripción esquemática de los elementos orbitales considerados en la colisión

Las trayectorias de las tres partículas se obtienen integrando estas ecuaciones. Esto se realiza con el método de Runge Kutta de 4º orden, integrado a un algoritmo de control de paso adaptativo [5].

La pérdida de energía del ión para una trayectoria particular se obtiene substrayendo la energía final a la energía inicial del electrón (considerando la transferencia de energía al núcleo, despreciable).

$$T_j = E_j^{(f)} - E_j^{(i)}$$

Luego de calcular  $N$  trayectorias estadísticamente independientes, podemos calcular la energía media perdida para un parámetro de impacto determinado:

$$\bar{T}(p) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N T_j$$

donde N se elige de manera de asegurarnos que la incerteza estadística de T(p) sea menor que cierto valor predeterminado  $\epsilon$ .

Finalmente la sección eficaz de Poder de frenado se obtiene integrando T(p) sobre un conjunto finito de parámetros de impacto:

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

### Generación de los estados iniciales del electrón

En el método, CTMC, es importante la generación de estados iniciales del electrón en el átomo de H. Se ha demostrado que es posible utilizar las ecuaciones de Kepler del movimiento planetario para representar las condiciones iniciales de un átomo hidrogenoide cuyos parámetros se obtienen aleatoriamente mediante cierta función de distribución, [1-3].

La generación de las condiciones iniciales se puede resumir de la siguiente manera:

- a) Fijar la energía de enlace  $U_0$
- b) Elegir la excentricidad de la órbita elíptica  $\epsilon$

$$0 \leq \epsilon^2 \leq 1$$

- c) Elegir un valor de anomalía media  $\psi$

$$0 \leq \psi \leq 2\pi$$

Resolver la ecuación de Kepler para la anomalía excéntrica  $\xi$  en términos de la anomalía media para establecer la posición y velocidad inicial sobre la elipse:

$$\psi = \xi - \epsilon \cdot \text{sen } \xi$$

- d) Generación de tres valores uniformemente distribuidos según:

$$-\pi \leq \varphi \leq \pi$$

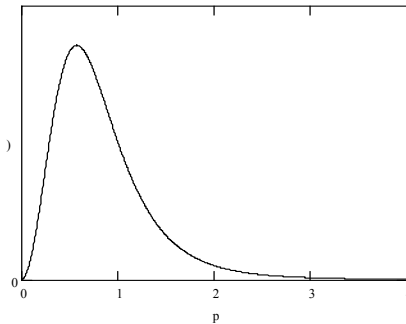
$$-1 \leq \cos \theta \leq 1$$

$$-\pi \leq \eta \leq \pi$$

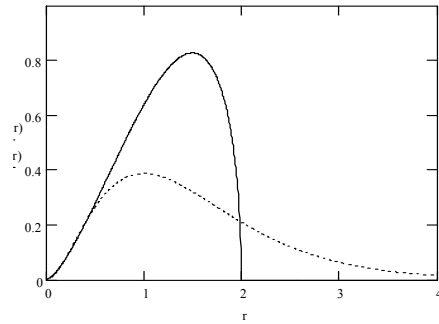
A los efectos de determinar la orientación arbitraria de l órbita en el espacio

El procedimiento descrito anteriormente tiene aplicabilidad general cuando el potencial de ligadura del electrón es del tipo Coulombico.

Para el electrón 1s en el campo Coulombico del protón, la función de distribución microcanónica reproduce muy bien la correspondiente cuántica en el espacio de los momento, Fig. 2-1 , no así la distribución cuántica en el espacio de las coordenadas, Fig. 2-2.



**Fig. 2.1:** Función de distribución electrónica para estado 1s del H, en el espacio de los momentos, clásica (línea continua), cuántica (línea de puntos).



**Fig. 2.2:** Función de distribución electrónica para estado 1s del H. En el espacio de las coordenadas, Clásica (línea continua), cuántica (línea de puntos)

La determinación de las condiciones iniciales del electrón en el átomo de H, se basa en la elección aleatoria de los parámetros orbitales que definen la órbita del electrón y, seguidamente, su posición aleatoria inicial en dicha órbita, considerando la energía de enlace inicial como la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno  $U_0 = -0.5$  (u.a.).

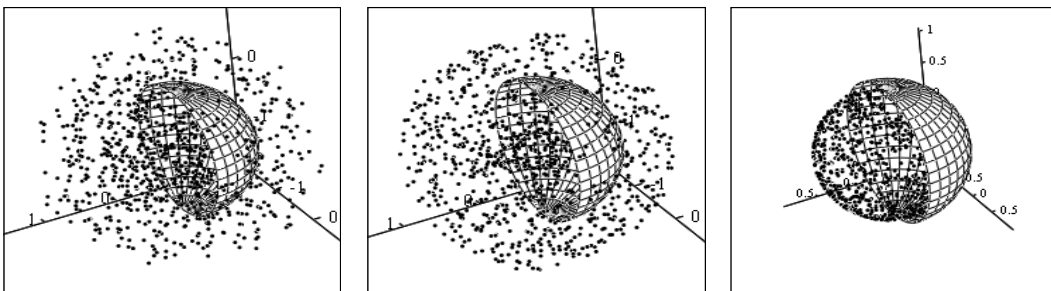
A los efectos de estudiar el efecto del valor de la excentricidad,  $\varepsilon$ ; en primer lugar, se eligió la misma aleatoriamente en el rango  $[0,1]$ .

$$0 \leq \varepsilon^2 \leq 1$$

Y se consideraron casos con excentricidad fija donde  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon = 0.001$ . Este último para simular órbitas casi circulares.

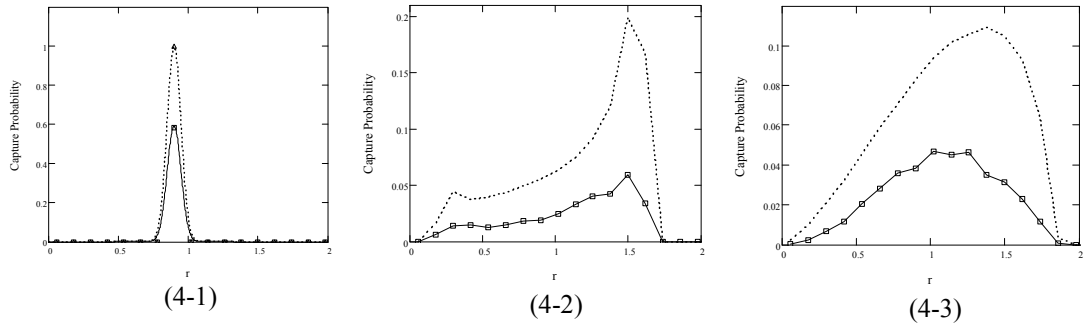
## RESULTADOS

En las Fig. 3-1, 3-2 y 3-3 se muestran las distribuciones de las posiciones iniciales del electrón en el átomo de H; para distintas excentricidades, según el procedimiento descrito.

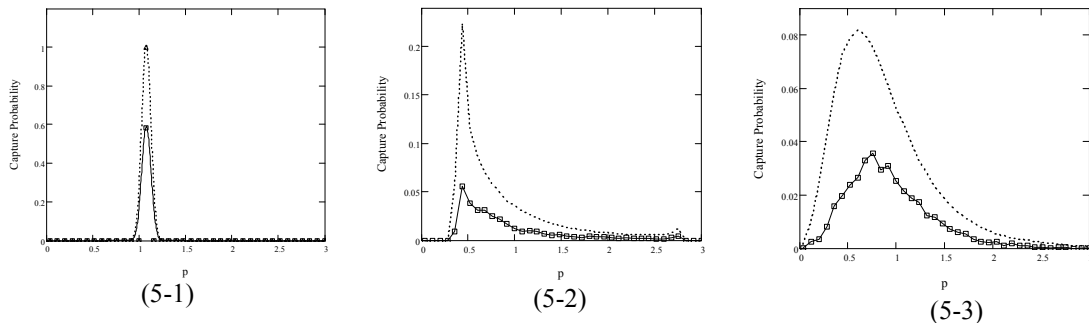


**Fig. 3-1:** Distribución de 1000 posiciones correspondientes a  $\varepsilon$ : aleatoria, según el procedimiento descrito. **Fig. 3-2:** para  $\varepsilon = 0,75$  constante y **Fig. 3-3:** para  $\varepsilon = 0.001$ ; generada por el programa de cálculo. La semiesfera unidad esta dibujada a modo de referencia.

En las Fig. 4-1, 4-2 y 4-3, Fig 5-1, 5-2 y 5-3 se muestran las distribuciones iniciales de los electrones que van a ser capturados ( $\times 10$ ), en el espacio  $r$  y  $p$ , respectivamente; para las excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : *aleatoria*, en las cuales se observa que la distribución inicial de los electrones con  $\varepsilon = 0.75$ , tanto en el espacio  $r$  como en el espacio  $p$  son semejantes a la distribución de  $\varepsilon$ : *aleatoria*.

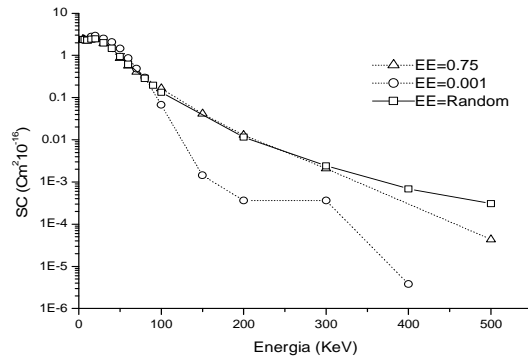


**Figs. 4-1, 4-2 y 4-3:** Distribuciones iniciales, en el espacio  $r$ , de los electrones que van a ser capturados; para las excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : *aleatoria*, respectivamente. Líneas de punto la distribución inicial total.



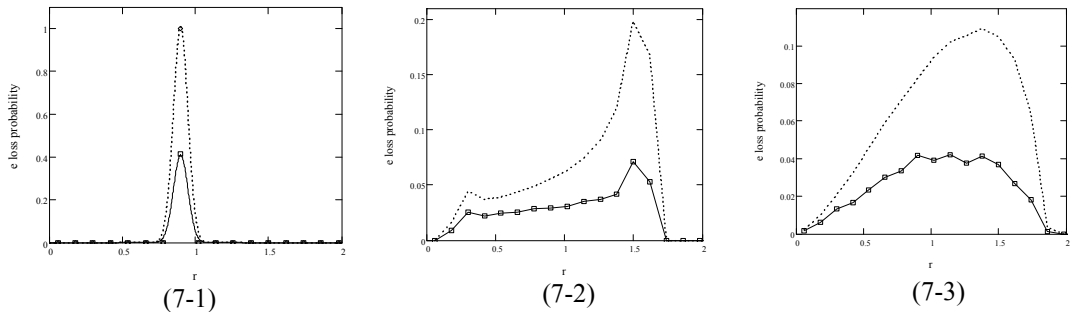
**Figs. 5-1, 5-2 y 5-3:** Distribuciones iniciales, en el espacio  $p$ , de los electrones que van a ser capturados; para las excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : *aleatoria*, respectivamente. Líneas de punto la distribución inicial total.

En la Fig. 6 se muestran las secciones eficaces de captura, para las excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : *aleatoria*, en función de la energía del proyectil. En ellas se observa el efecto de las diferencias observadas en las distribuciones iniciales de los electrones que van a ser capturados. En la misma se observa una sección eficaz mayor en la zona de altas energías del ión incidente, para las excentricidades  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : *aleatoria*, respecto de  $\varepsilon = 0.001$ , siendo las primeras, prácticamente coincidentes.

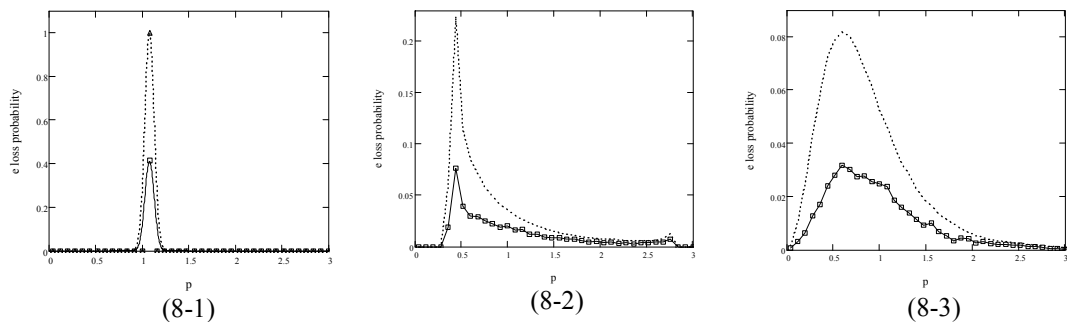


**Fig. 6:** Secciones eficaces de captura, para excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$  : aleatoria, en función de la energía del Ion incidente.

En las Fig. 7-1, 7-2 y 7-3, Fig. 8-1, 8-2 y 8-3 se muestran las distribuciones de los electrones que van a ser capturados e ionizados ( $\times 10$ ), respectivamente; para las excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon = \text{aleatoria}$ , en las cuales se observa las mismas características observadas para las distribuciones en  $r$ .

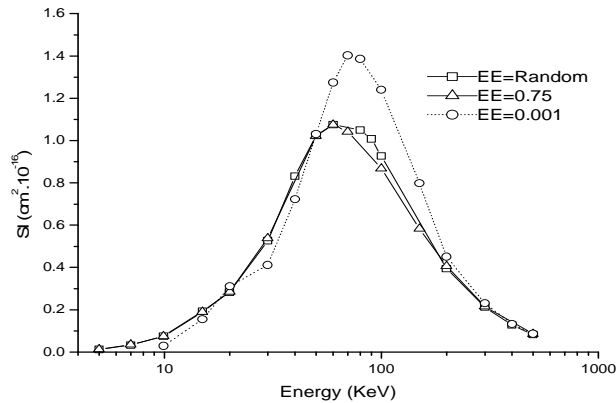


**Figs. 7-1, 7-2 y 7-3:** Distribuciones iniciales, en espacio  $r$ , de los electrones que van a ser ionizados, para las excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$  : aleatoria, respectivamente. Líneas de punto la distribución inicial total.



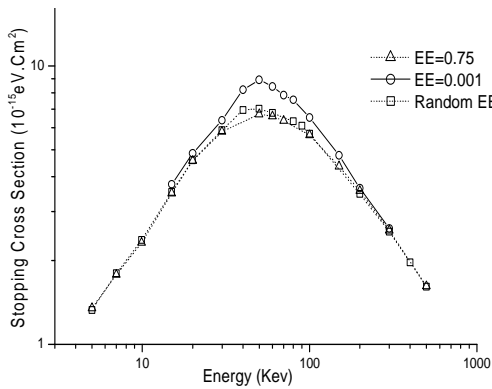
**Figs. 8-1, 8-2 y 8-3:** Distribuciones iniciales, en el espacio  $p$ , de los electrones que van a ser ionizados; para las excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$  : aleatoria, respectivamente. Líneas de punto la distribución inicial total.

En la Fig. 9 se muestran las secciones eficaces de ionización, para excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : aleatoria,, en función de la energía del proyectil. En ellas se observa el efecto de las diferencias observadas en las distribuciones iniciales de los electrones que van a ser ionizados. En la misma se observa una sección eficaz mayor en la zona de energías intermedias del ión incidente, para las excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ , respecto de las excentricidades  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : aleatoria siendo las últimas, prácticamente coincidentes.

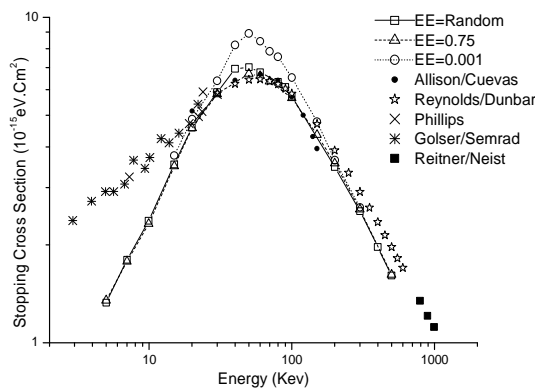


**Fig. 9:** Secciones eficaces de ionización, para excentricidades  $\varepsilon = 0.001$ ,  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : aleatoria, en función de la energía del Ion incidente.

De las excentricidades consideradas, la correspondiente a trayectorias circulares es la que menos coincidencia muestra con las restantes excentricidades consideradas. Los resultados muestran que no existe una diferencia apreciable entre los valores obtenidos con excentricidades aleatorias y  $\varepsilon = 0.75$ . Los valores obtenidos con esta última distribución reproducen mejor los valores experimentales en la región de máximo poder de frenado. Fig. 10.1 y 10.2.



**Fig. 10.1:** Comparación del Poder de frenado para simulaciones con distintas Excentricidades [8-11]



**Fig. 10.2:** Comparación del Poder de frenado calculado con valores experimentales.[8-11].

## CONCLUSIONES

Los cálculos realizados por el método de simulación CTMC de secciones eficaces considerando una distribución electrónica consistente en trayectorias elípticas fijas de excentricidad  $\varepsilon = 0.75$ , coincidieron con los obtenidos con la distribución de excentricidades tomadas aleatoriamente, para todo el rango de energías consideradas; no así para el caso de excentricidad  $\varepsilon = 0.001$ , la cual difiere de las anteriores en la zona de energías intermedias.

Los resultados obtenidos para el stopping electrónicos total reproducen bien los resultados experimentales para energías intermedias y altas, subestimando a bajas energías para excentricidades  $\varepsilon = 0.75$  y  $\varepsilon$ : *aleatorias*. Para  $\varepsilon = 0.001$  los resultados obtenidos sobreestiman los resultados experimentales en la zona de energías intermedias y subestiman en la zona de bajas energías.

## REFERENCIAS

- [1] ABRINES, R. and I.C. PERCIVAL. Proc. Phys. Soc., **88**, 861 (1966).
- [2] OLSON, R.E. and A. SALOP. Phys. Rev. A, **16**, 531-541 (1977).
- [3] COHEN, J.S. J.Phys. B: At. Mol. Phys., **18**: 1759-1769 (1985).
- [4] CUSTIDIANO, E.R. and M.M. JAKAS. Phys. Rev. A, **72** 022708 (2005).
- [5] PRESS, W.H.; S.A. TEUKOLSKY; W.T. VETTERLING and B.P. FLANNERY. Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing, Second Edition (2001).
- [6] GRYZINSKI, M. Phys. Rev., **138**, (2A), A336-A358 (1965).
- [7] CABRERA-TRUJILLO, R.; Y. ÖHRN; E. DEUMENS and J.R. SABIN. J. Chem. Phys. **116**, 2783 (2002).
- [8] PHILLIPS, J.A. Phys. Rev., **90**, 532 (1953).
- [9] REYNOLDS, H.K.; D.N. DUNBAR; W.A. WENTZEL and W. WHALING. Phys. Rev., **92**, 742 (1953).
- [10] ALLISION, S. and J. CUEVAS. Phys. Rev., **127**, 792 (1962).
- [11] REITNER, G.; N. NIEST; E. PFAFF and G. CLAUSNITZER. Nucl. Instrum.Methods Phys. Res. B, **44**, 399 (1990).

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