

# STUDIUL REACTIEI "SCHIMB DE SARCINA" $H^+ + H \rightarrow H + H^+$

## INTRODUCERE

Un fascicol de protoni rapizi (1-50 keV) este trecut printr-un gaz de hidrogen a cărei temperatură este în jur de 2500°K și presiunea de  $10^{-2}$  mm Hg sau mai mică. În aceste condiții gradul de disociere este foarte ridicat, hidrogenul găsindu-se în stare atomică. Protonul poate captura electronul de la atomul de hidrogen având loc reacția de schimb de sarcină. Ne interesează să măsurăm probabilitatea sau secțiunea eficace a acestei reacții. Se pot obține mai multe informații dacă în loc de a măsura secțiunea eficace totală măsurăm secțiunea eficace diferențială, adică probabilitatea ca protonul să captureze electronul și să fie împrăștiat sub un unghi  $\theta$ , în unghiul solid  $\theta$  și  $\theta + d\theta$ .

Schema unei astfel de instalații este arătată în fig.1.

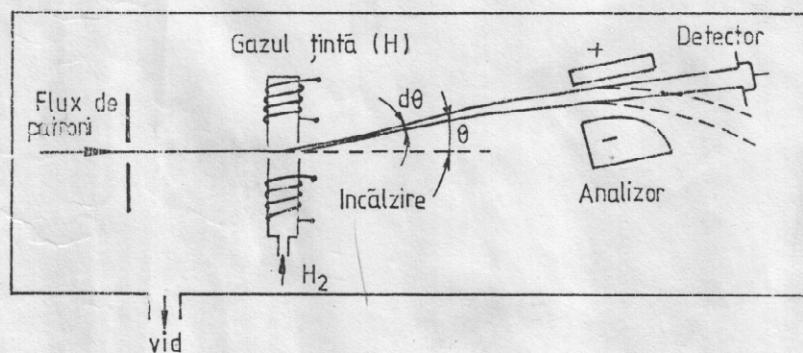


Fig.1 Detectia reacției de captură electronică

Alegând unghiul de împrăștiere destul de mare ( $\theta = 3^\circ$ ) restrângem împrăștierea la acele cazuri în care protonul trece prin interiorul atomului de hidrogen.

O alegere mai mare a lui  $\theta$  ar putea avea ca efect trecerea protonului de două sau mai multe ori prin interiorul atomului de hidrogen și pentru a elimina acest lucru ar trebui să scădem mult presiunea gazului, ceea ce ar face măsurătorile dificile și anevoiase.

În timpul ciocnirii, protonul are o anumită probabilitate de a captura electronul de la atomul de hidrogen prin care trece, astfel că fascicolul împrăștiat ce trece prin analizorul electrostatic constă dintr-o mixtură de protoni și atomi de

hidrogen proveniți din fascicolul inițial. Detectorul va număra cu o viteză de numărare  $N$ . Dacă se aplică pe analizor o tensiune atunci detectorul va număra numai particulele neutre din fluxul împrăștiat, adică atomii de hidrogen apăruiți în urma reacției de schimb de sarcină. Fie  $N_0$  viteza de numărare în acest caz. Raportul:

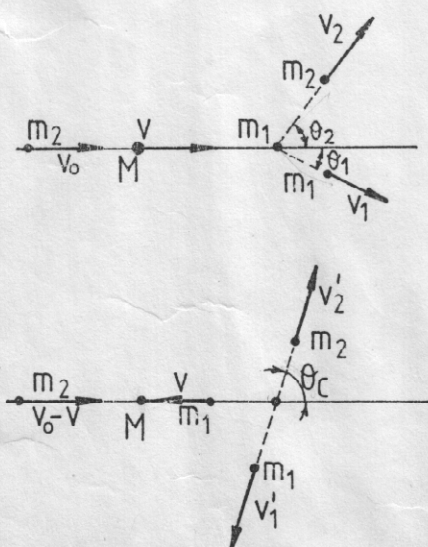
$$P_0 = \frac{N_0}{N} \quad (1)$$

va indica fracțiunea din numărul de particule, împrăștiate în unghiul solid respectiv, care au suferit reacția de schimb de sarcină, adică probabilitatea capturii electronice (sau a schimbului de sarcină).

Această probabilitate, sau secțiune eficace a reacției, reflectă proprietățile cuantice ale atomilor.

Pentru a verifica unele ipoteze care se vor folosi ulterior se va arăta folosind formula de împrăștiere clasică a lui Rutherford, valabilă în sistemul centrului de masă, că pentru domeniul de energii în care vom lucra  $E_p = (1-50 \text{ keV})$  parametrul de impact este mai mic decât dimensiunile atomice (raza Bohr,  $a_0$ ) la unghiul de împrăștiere în sistemul laboratorului de  $|\theta_2 = 3^\circ|$ .

Formula împrăstierii și relațiile de transformare se dau mai jos, iar mărimile care intervin se pot vedea pe fig.2.



$a_0 \approx 0,523 \text{ \AA}$

$$\text{tg} \frac{\theta_c}{2} = K \frac{1}{p} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{m_1 v^2} = K \frac{1}{p} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_r} \quad , \quad K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

$K = 9 \cdot 10^9$

$$E_r = \frac{m_1}{m_1 + m_2} E_L$$

$$\text{tg} \theta_2 = \frac{\sin(\theta_c)}{(\cos(\theta_c) + \tau)} \quad (2)$$

$\sin^2 \theta_c + \cos^2 \theta_c = 1$

$$\theta_1 = \frac{1}{2} (\pi - \theta_c)$$

$$\tau = \frac{m_2}{m_1}$$

Fig. 2. Ciocnirea în sistemul laboratorului și al centrului de masă

În relațiile de mai sus,  $E_r$  și  $E_L$  reprezintă energia relativă și respectiv energia totală a particulei în sistemul laboratorului.

Se va mai arăta că este imposibil să detectăm la astfel de unghiuri, protoni sau atomi de recul proveniți din gazul țintă



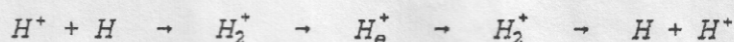
( $m_1$ ), adică  $\theta_1 \gg \theta_2$ . Datele se vor trece în următorul tabel:

$a_0$ (Å)	$\theta_2$	$E_L$ (keV)	$\theta_c$	$\theta_1$	$p$ (Å)
0.53	3	1			
		50			

Măsurând probabilitatea capturii electronice la un unghi fixat  $\theta = 3^\circ$  cu un aparat și cu un procedeu descris mai sus, s-au obținut datele experimentale din fig. 4, care prezintă o serie de maxime și minime în funcție de energia protonului incident. Modificând unghiul de împrăștiere s-a constatat că aceste date nu sunt sensibile la variația unghiului de împrăștiere cu condiția ca energia protonilor să fie destul de mare.

### TEORIA CUANTICA A REACTIEI DE CAPTURA

Reacția se consideră a avea loc în felul următor:



Atunci când protonul se găsește la o distanță mai mare de atomul țintă, funcția de undă a electronului este puțin diferită de funcția de undă pentru atomul de hidrogen în starea fundamentală,  $\psi$ . Deci  $\Psi(t=0) = \Psi_1 \approx 1/2 (\psi_s + \psi_a)$  unde  $\psi_s$  și  $\psi_a$  reprezintă orbitalul de legătură  $1s_g$  și respectiv de antilegătură  $1s_u$  pentru molecula  $H_2^+$  (fig. 3).

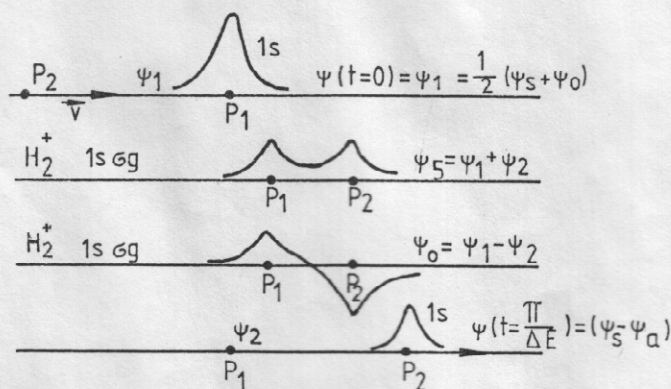


Fig. 3. Comportarea funcției de undă electronice în timpul ciocnirii

La apropierea protonului de atomul de hidrogen funcția de undă devine dependentă de timp. O undă plană dependentă de timp se scrie în general:

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

În cazul nostru funcția de undă a sistemului va fi:

$$\Psi(t) = \frac{1}{2} (\Psi_s e^{-iEt/\hbar} + \Psi_a e^{-iE't/\hbar}) = \frac{1}{2} (\Psi_s + \Psi_a e^{-i((E'-E)t/\hbar)}) e^{-iEt/\hbar}$$

Notăm cu  $\Delta E = E' - E$ , diferența de energie între stările  $1s\sigma_s$  și  $1s\sigma_a$ . La timpul  $t = \pi\hbar/\Delta E$  obținem:

$$\Psi(t = \pi\hbar/\Delta E) = \frac{1}{2} (\Psi_s - \Psi_a) e^{-iEt/\hbar} = \Psi_2 e^{-iEt/\hbar}$$

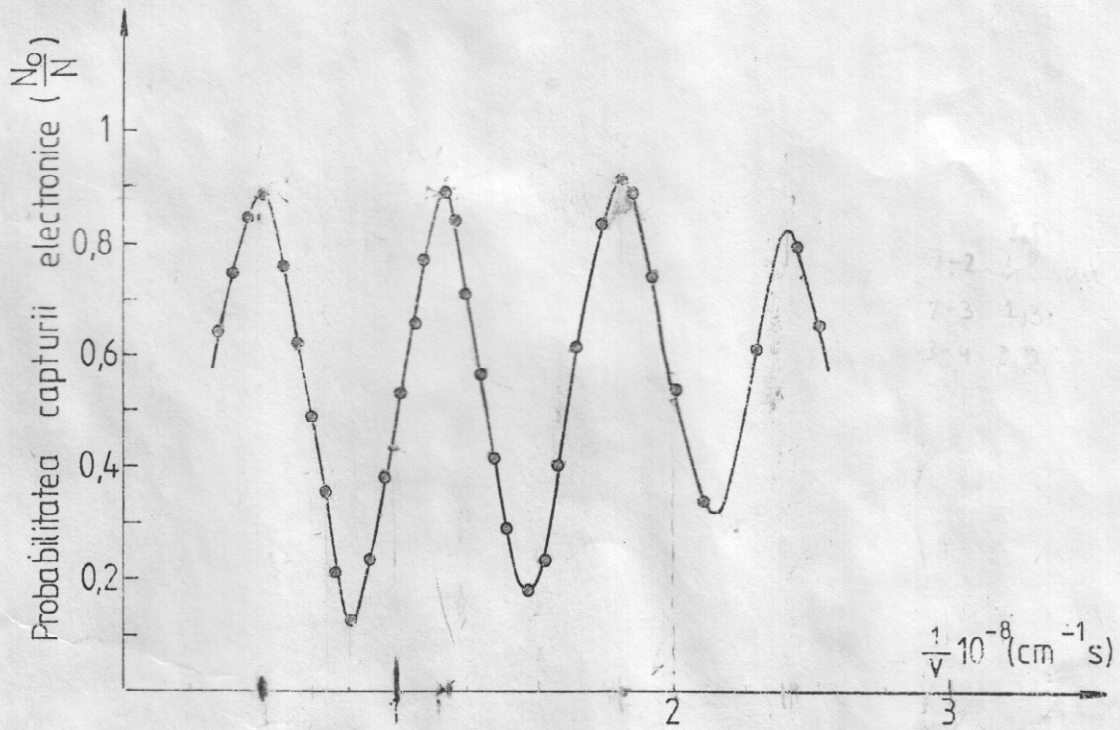


Fig. 4. Dependența probabilității de captură de viteza ionului proiectil

deci funcția de undă corespunde electronului trecut de la atomul țintă (1) la protonul proiectil (2).

La timpul  $t = 2\pi\hbar/\Delta E$  obținem :

$$\Psi(t = 2\pi\hbar/\Delta E) = \frac{1}{2} (\Psi_s + \Psi_a) e^{-iEt/\hbar}$$

adică electronul a revenit la atomul părinte. Deci în timp ce protonul proiectil trece pe lângă atomul țintă electronul oscilează de la un atom la altul cu perioada:

Pentru domeniul energetic în care ne aflăm protonul trece



$$T = 2\pi\hbar/\Delta E = h/\Delta E$$

(3)

foarte aproape de protonul din atomul țintă ( $10^{-10}$  cm; vezi tabelul completat), astfel încât se poate presupune că perturbarea funcției de undă se produce numai când protonul (2) este în interiorul unei sfere de rază "a" compatibilă sau puțin mai mare decât extinderea orbitalului 1s al hidrogenului.

Dacă probabilitatea maximă de captură apare la viteza  $v_n$  (fig. 4) timpul de interacțiune este  $t_n = a/v_n$ . Atunci următorul maxim va apare când timpul de interacțiune va fi  $t_{n+1} = t_n + T$ , astfel ca electronul să execute cu o oscilație mai mult, găsindu-se în final la protonul incident. Deci:

$$T = t_{n+1} - t_n = a(1/v_{n+1} - 1/v_n) \quad (4)$$

Dacă se folosește relația (3):

$$h/\Delta E = a(1/v_{n+1} - 1/v_n) \quad \text{sau} \quad a \cdot \Delta E = \frac{h}{1/v_{n+1} - 1/v_n} \quad (5)$$

Relația (5) arată că diferența  $\Delta(1/v)$  între două maxime (sau minime) consecutive trebuie să fie constantă. Se va verifica relația (5), datele trecându-se în următorul tabel:

Tabel 2

$\Delta n$	1-2	2-3	3-4
$\Delta(1/v) \text{ (m}^{-1}\text{s)}$			
$a \cdot \Delta E \text{ (eV.Å)}$			
$\langle a \cdot E \rangle$	calculat	din relația (6)	=70 eV Å

În relația (4) care exprimă faptul că  $a \cdot \Delta E$  este constant, nici  $\Delta E$  și nici  $a$  nu au o valoare bine precizată.  $\Delta E$  este diferența de energie între stările  $1s\sigma_g$  și  $1s\sigma_u$  ale moleculei  $H_2^+$ , energii care depind de distanța de separare între protoni în timpul ciocnirii, iar raza de interacțiune "a" nu o putem defini precis. Este rezonabil să se introducă în loc de produsul  $a \cdot \Delta E$  o mărime efectivă  $\langle E \cdot a \rangle$  care se poate calcula integrând valoarea diferenței de energie între cele două stări după parcursul protonului, adică:

$$\langle E \cdot a \rangle = \int_{-a}^a E(s) ds \quad (6)$$

$$E(s) = E(1s\sigma_g) - E(1s\sigma_u) \quad (7)$$

Energiile orbitalilor de legătură și antilegătură pentru molecula  $H_2^+$  sînt date de expresiile:

unde  $E_H$  este energia orbitalului 1s al hidrogenului (13,6 eV),  $R$  distanța dintre cei doi protoni, iar  $J, K, S$  sînt integrala coulombiană de schimb și respectiv de acoperire, date de

5  
 $\frac{1}{cm} = \frac{1}{m \cdot 10^2}$   
 $\frac{1}{m} = \frac{1}{m \cdot 10^2}$

$$E(1s\sigma_g) = E_{H^+} \frac{e^2}{R} - \frac{J+K}{1+S} \quad (8)$$

$$E(1s\sigma_u) = E_{H^+} \frac{e^2}{R} - \frac{J-K}{1-S}$$

expresiile:

$$J = \frac{e^2}{R} [1 - e^{-2R}(1+R)] \quad (9)$$

$$K = e^2 e^{-R}(1+R)$$

$$S = e^2 \left(1+R + \frac{R^2}{3}\right) e^{-R}$$

unde R este distanța în unități atomice (unități de rază Bohr), iar  $e^2$  este pătratul sarcinii electronului.

Folosind relația (8), ecuația (7) devine:

$$E = \frac{J-K}{1-S} - \frac{J+K}{1+S} - \frac{2JS-K}{1-S^2} \quad (10)$$

iar pentru (6) rezultă:

$$\langle Ea \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} E(s) ds = \int_{-\infty}^{\infty} E(R) dR = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2JS-K}{1-S^2} dR \quad (11)$$

Relația (11) este o aproximare semiempirică a reacției de schimb de sarcină. O teorie mai exactă ar trebui, pe lângă a prevedea maximele și minimele, să prezică localizarea lor și eventual să reproducă teoretic curba experimentală.

#### PRELUCRAREA DATELOR

1. Folosind relația (2) se va completa tabelul 1. Se vor trage concluzii privind posibilitățile de detectare a reacției de schimb de sarcină.
2. Din măsurătorile de pe figura 3 se va verifica relația (5), datele trecându-se în tabelul 2.
3. Folosind relația (5) și  $\Delta(1/v)$  măsurat experimental se va aprecia diferența de energie între stările  $1s\sigma_g$  și  $1s\sigma_u$  pentru un  $a = 10a_0$ , unde  $a_0$  este prima rază Bohr.