

# Aproximación CDW-FS en colisiones positrón-átomo (ion).

O. A. FOJON\*, R. GAYET#, J. HANSSEN\*\* Y R. D. RIVAROLA\*

\* INSTITUTO DE FÍSICA ROSARIO (CONICET-UNR) Y ESCUELA DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES, FCEIA, UNR  
AV. PELLEGRINI 250 - (2000) ROSARIO - ARGENTINA

# LABORATOIRE DES COLLISIONS ATOMIQUES, UNIVERSITE DE BORDEAUX I, TALENCE, FRANCE

\*\* LABORATOIRE DE PHYSIQUE MOLECULAIRE ET DES COLLISIONS, INSTITUTE DE PHYSIQUE  
RUE ARAGO, TECHNOPOLE 2000, METZ, FRANCE

*e-mail: ofojon@unrctu.edu.ar*

Estudiamos teóricamente el proceso de transferencia de carga en colisiones positrón-átomo (ión) con formación de átomos de positronio utilizando un modelo obtenido de un formalismo cuántico de tres cuerpos. Analizamos la presencia del pico de Thomas, característico de un proceso de colisión en dos etapas, en las secciones eficaces diferenciales.

We study theoretically the charge transfer process in positron-atom (ion) collisions with positronium formation by using a model obtained from a three-body quantum formalism. We analyse the presence in the differential cross sections of the Thomas' peak characteristic of a two-step collision process.

## Introducción

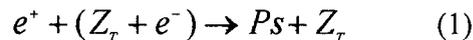
En los últimos años, se han publicado una cantidad considerable de trabajos tanto teóricos como experimentales relacionados con la formación de átomos de positronio en colisiones positrón-ion con transferencia de carga. Los avances tecnológicos producidos permitieron la obtención de haces de positrones de intensidad suficiente para efectuar tales experiencias y se cuenta actualmente con resultados de secciones eficaces extendidos en un amplio dominio energético. Sin embargo, los resultados a energías altas son todavía muy limitados. Además, el proceso de transferencia de carga utilizando proyectiles livianos no se encuentra tan bien comprendido en la actualidad como dicho proceso utilizando proyectiles pesados. El estudio teórico de la captura electrónica por proyectiles livianos resulta más complicado debido a que no se pueden realizar aproximaciones semiclásicas válidas para proyectiles pesados (aproximación del parámetro de impacto). El estado de los estudios de formación de positronio ha sido revisado de forma muy satisfactoria por Bransden y Noble<sup>1</sup>.

En un trabajo previo<sup>2</sup>, estudiamos la captura electrónica en colisiones positrón-átomo con formación de positronio utilizando el modelo Estado Final de Onda Distorsionada del Continuo (Continuum Distorted Wave-Final

State, CDW-FS)<sup>3</sup>. En dicho trabajo, presentamos secciones eficaces diferenciales a alta velocidad de impacto del positrón realizando una aproximación de alta energía del elemento de matriz del modelo CDW-FS. En este trabajo, presentamos secciones eficaces diferenciales CDW-FS evaluadas en forma exacta confirmando en las mismas la presencia del pico de Thomas asociado a mecanismos de colisión clásicos en dos etapas. Utilizaremos unidades atómicas salvo indicación en contrario.

## Teoría

Estudiamos la reacción de captura electrónica siguiente:



en la que un positrón  $e^+$  con velocidad de impacto  $v$  colisiona sobre un átomo hidrogénico de carga  $Z_T$  en el estado fundamental dando lugar a un átomo de positronio (Ps) también en su estado fundamental.

Las funciones inicial y final no perturbadas del sistema están dadas por

$$\Phi_\alpha = \varphi_i(\vec{r}_T) F_{k_\alpha}^+(\vec{R}_T) \quad (2)$$

$$\Phi_\beta = \varphi_f(\vec{r}_p) \exp(-i \vec{k}_\beta \cdot \vec{R}_p) \quad (3)$$

respectivamente.  $\varphi_i$  representa el estado ligado inicial y  $\varphi_f$  el estado ligado final. Además,

$$F_{k_\alpha}^+(\vec{R}_T) = N_{v_\alpha}^+ \exp(i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}_T) \times {}_1F_1[-iv_\alpha, 1, ik_\alpha R_T - i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}_T] \quad (4)$$

siendo  ${}_1F_1$  la función hipergeométrica confluyente,  $k_\alpha \approx v$ , y, además,

$$N_{v_\alpha}^+ = \exp[\pi v_\alpha / 2] \Gamma(1 - iv_\alpha) \quad v_\alpha = (Z_T - 1) / v \quad (5)$$

donde  $\Gamma$  indica la función Gamma. Las coordenadas utilizadas están indicadas en la figura 1.

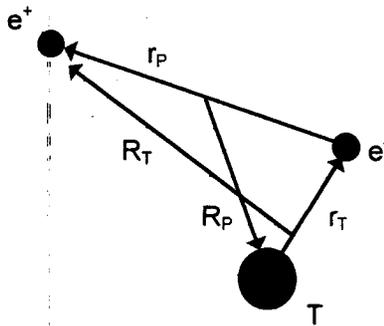


Figura 1: Coordenadas utilizadas en el texto.

La aproximación Estado Final de Onda Distorsionada del Continuo (Continuum Distorted Wave-Final State, CDW-FS)<sup>3</sup> para captura electrónica en colisiones positrón-átomo con formación de positronio se obtiene del primer orden de un formalismo de Dodd y Greider<sup>4</sup>. Dicho modelo incorpora estados coulombianos intermedios del continuo positrón-núcleo blanco y electrón-núcleo blanco en el canal final. La amplitud de transición CDW-FS en la versión *prior* resulta

$$T_{\alpha\beta}^{-,CDW-FS} = N_{v_\alpha}^+ N_{v_\beta}^- \int d\vec{r}_T d\vec{R}_T \exp[i(\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}_T + \vec{k}_\beta \cdot \vec{R}_P)] \varphi_f^*(\vec{r}_P) \left( \frac{1}{R_T} - \frac{1}{r_P} \right) {}_1F_1[-i\beta, 1, iv_\beta R_T + i\vec{v}_\beta \cdot \vec{R}_T] {}_1F_1[i\beta, 1, iv_\beta r_T + i\vec{v}_\beta \cdot \vec{r}_T] \varphi_i(\vec{r}_T) {}_1F_1[-iv_\alpha, 1, ik_\alpha R_T - i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}_T] \quad (6)$$

con

$$N_{v_\beta}^- = \pi\beta / \sinh(\pi\beta) \quad \beta = \frac{Z_T}{v_\beta} \quad (7)$$

y donde hemos realizado la aproximación  $v_\beta \approx 2k_\beta$

La sección eficaz diferencial se obtiene haciendo

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{\pi^2} \frac{v_\beta}{v} |T_{\alpha\beta}^{-,CDW-FS}|^2 \quad (8)$$

### Evaluación del elemento de matriz CDW-FS

En esta sección describimos brevemente el método de cálculo empleado.

Desarrollamos la función hipergeométrica que depende del parámetro  $v_\alpha$  de la forma siguiente<sup>5</sup>

$${}_1F_1[-iv_\alpha, 1, ik_\alpha R_T - i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}_T] = -(2\pi i)^{-1} \times \oint_C du (-u)^{-iv_\alpha-1} (1-u)^{iv_\alpha} \exp[i(k_\alpha R_T - \vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}_T)u] \quad (9)$$

donde el contorno de integración  $C$  se indica en la figura 2.

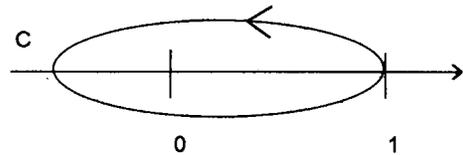


Figura 2: Contorno de integración.

Insertando la ecuación (9) en el elemento de matriz CDW-FS dado por (6), obtenemos

$$T_{\alpha\beta}^{-,CDW-FS} = -K (2\pi i)^{-1} \times \oint_C du (-u)^{-iv_\alpha-1} (1-u)^{iv_\alpha} J(u) \quad (10)$$

con

$$K = \frac{Z_T^{3/2}}{2\sqrt{2\pi}} N_{v_\alpha}^+ N_{v_\beta}^- \quad (11)$$

y donde  $J(u)$  está dada por

$$J(u) = \int d\vec{r}_T d\vec{R}_T \exp[i(\vec{M} \cdot \vec{R}_T + v u R)] \left( \frac{1}{R_T} - \frac{1}{r_P} \right) {}_1F_1[-i\beta, 1, iv_\beta R_T + i\vec{v}_\beta \cdot \vec{R}_T] {}_1F_1[i\beta, 1, iv_\beta r_T + i\vec{v}_\beta \cdot \vec{r}_T] \exp(-iv_\beta \cdot \vec{r}_T - Z_T r_T) \exp(-r_P / 2) \quad (12)$$

siendo

$$\vec{M} = \vec{v} (1 - u) - \vec{v}_\beta \quad (13)$$

Al obtener  $J(u)$  hemos hecho  $k_\alpha \approx v$ .

Mediante deformación continua del integrando, la integral en el plano complejo en (10) puede expresarse como una integral sobre el intervalo real  $[0, 1]$ , dando como resultado

$$T_{\alpha\beta}^{-,CDW-FS} = -K \left\{ J(u=0) + \frac{\sinh(\pi v_\alpha)}{\pi i} \int_0^1 du \left( \frac{1-u}{u} \right)^{i v_\alpha} \frac{[J(u) - J(u=0)]}{u} \right\} \quad (14)$$

La integral  $J(u)$  ha sido estudiada por diversos autores<sup>6,7</sup>. En particular, utilizaremos los resultados obtenidos por Chen y colaboradores<sup>8</sup>.

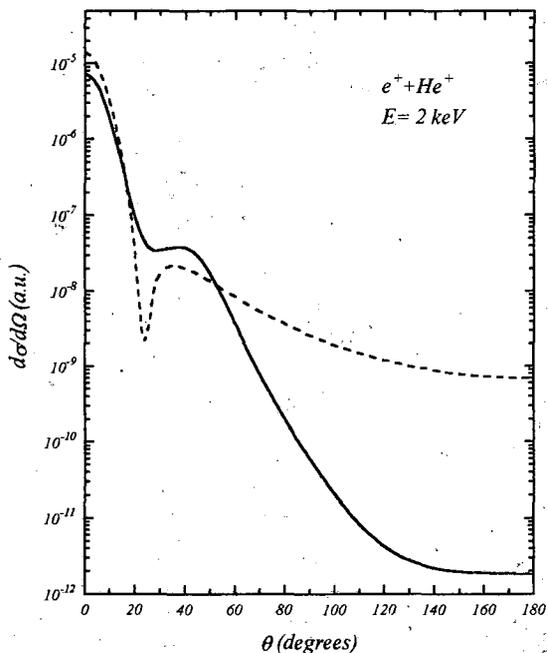


Figura 3: Sección eficaz diferencial para la colisión  $e^+ + He^+$  a energía de impacto del positrón de 2 keV.

Es digno de mencionar que muy recientemente hemos calculado secciones eficaces diferenciales CDW-FS utilizando otro método numérico basado en un desarrollo en ondas parciales<sup>9</sup>. Dicho método numérico presenta el

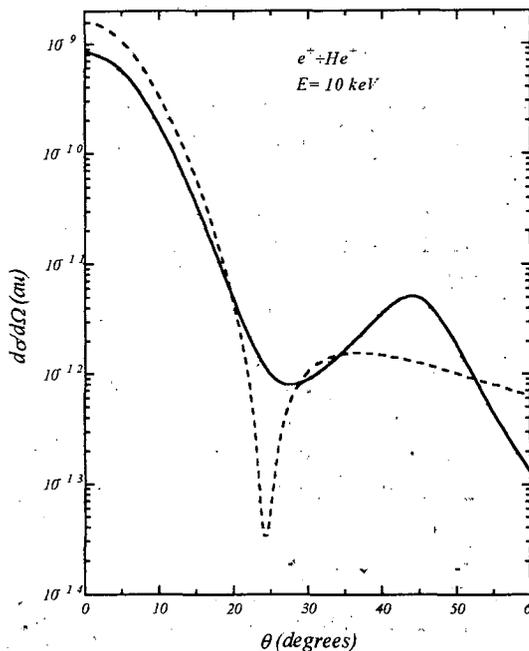


Figura 4: Idem figura 3 pero a energía de impacto del positrón de 10 keV.

inconveniente de que a medida que la energía crece, se requieren valores muy altos de momento angular para obtener convergencia en los resultados. El método presentado en este trabajo posee mejor convergencia en todo el dominio energético.

## Resultados

En esta sección presentamos resultados de secciones eficaces diferenciales (SED) CDW-FS para la reacción de captura electrónica sobre átomos de helio ionizados, en su estado fundamental, a alta energía de impacto del positrón.

Comparamos con las predicciones de la aproximación Coulomb-Born<sup>2,3</sup> que no presenta distorsiones en el canal final y por lo tanto no es capaz de describir los mecanismos de Thomas en dos etapas. En la figura 3 vemos las SED para una energía de impacto del positrón  $E_i=2$

keV. Se observa un comportamiento suave de la sección y la presencia de un pico alrededor de  $45^\circ$ , valor predicho por el mecanismo clásico de Thomas. A medida que la energía aumenta, dicho pico se vuelve más pronunciado como se aprecia en la figura 4 donde la energía de impacto es de 10 keV. Este último valor de energía debe considerarse sólo como ilustrativo de la evolución del pico ya que a estas energías deberían tenerse en cuenta efectos relativistas. En un trabajo previo<sup>2</sup> realizamos un cálculo aproximado de las SED CDW-FS para alta velocidad de impacto. Además de la presencia del pico de Thomas se observaban en las SED oscilaciones en todo el dominio angular que fueron comparadas con las oscilaciones que se encuentran en un cálculo de segundo orden de Born<sup>10,11</sup>. En vista de los nuevos resultados, las oscilaciones observadas anteriormente en las SED CDW-FS aproximadas deberían considerarse como resultado de la aproximación realizada o, con mayor probabilidad, como consecuencia de imprecisiones en el método numérico utilizado. Esta última afirmación estaría apoyada por los resultados de SED CDW-FS obtenidas con el método de cálculo basado en desarrollo en ondas parciales<sup>9</sup>, en las que a medida que la energía aumenta se observan oscilaciones en las SED provenientes de imprecisiones de origen numérico.

### Conclusiones

Hemos estudiado el proceso de captura electrónica en colisiones positrón-átomo (ion) con el modelo CDW-FS desarrollado dentro del formalismo cuántico de Dodd y Greider para tres cuerpos. Las secciones eficaces diferenciales CDW-FS a altas energías muestran la existencia de un pico localizado alrededor de  $45^\circ$  de acuerdo al valor predicho por los mecanismos clásicos de Thomas. No se observan estructuras que puedan asociarse con efectos de interferencia entre los diferentes términos cuánticos como en las secciones eficaces diferenciales correspondientes al segundo orden de Born<sup>10,11</sup>.

### Referencias

1 - Bransden B.H. y Noble C.J., Adv. in At. Mol. Opt. Phys., **32**, 19 (1994).

- 2 - Fojón O.A., Gayet R., Hanssen J. y Rivarola R., Anales AFA **94** 6 461 (1994).
- 3 - Fojón O.A., Tesis Doctoral UNR, (1994).
- 4 - Greider K.R. and Dodd L.D., Phys. Rev. **146** 675 (1966); Dodd K.R. y Greider K.R., Phys. Rev. **146** 675 (1966).
- 5 - Higher Transcendental Functions, Editor: Erdelyi A., Mc. Graw Hill Book Company Inc. (1953).
- 6 - Roy A., Roy K. y Sil N.C., J. Phys. B **13** 3443 (1980).
- 7 - Brauner M., Briggs J.S. y Klar H., J. Phys. B **22** 2265 (1989).
- 8 - Chen X.J., Wen B., Xu Y.W. y Zheng Y.Y., J. Phys. B **25** 4661 (1992).
- 9 - Fojón O.A., Rivarola R.D., Gayet R., Hanssen J. y Hervieux P., Phys. Rev. A **54** 4923 (1995).
- 10 - Igarashi A. y Toshima N., Phys. Rev. A **46** R1159 (1992).
- 11 - Igarashi A. y Toshima N., Phys. Rev. A **47** 2386 (1993).