

# Mecanismos de Thomas en colisiones positrón-átomo(ion) con formación de positronio.

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

\* INSTITUTO DE FISICA 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 los mecanismos de dos etapas de Thomas en colisiones positrón-átomo (ión) con formación de átomos de positronio. Mostramos resultados de secciones eficaces diferenciales a altas energías de incidencia del positrón utilizando un modelo obtenido del primer orden de un formalismo de Dodd y Greider. Los resultados muestran la presencia de un pico alrededor del ángulo crítico de 45 grados correspondiente a los mecanismos de Thomas.

We study theoretically the two-step Thomas mechanisms in positron-atom (ion) collisions with positronium formation. We introduce results of differential cross sections at high impact positron energies by using a model obtained from the first order of a Dodd and Greider formalism. The results show the presence of a peak around the critical angle of 45 degrees corresponding to the Thomas mechanisms.

## Introducción

Está bastante bien comprendido actualmente que el mecanismo dominante para captura electrónica mediante proyectiles pesados a energías suficientemente altas es el correspondiente al proceso de dispersión en dos etapas de Thomas. Dicho proceso fue descrito clásicamente en 1927 por Thomas<sup>1</sup>. El proceso clásico de captura electrónica que propuso Thomas es el que sigue (ver figura 1.a). En una primera etapa, el proyectil (P) moviéndose con velocidad  $v$  impacta sobre el electrón. Como resultado de esta primera colisión, el electrón se desvía un ángulo  $\theta_e$  y el proyectil un ángulo  $\theta_p$ , que en el sistema laboratorio resulta

$$\theta_p = \arcsin \left[ \frac{1}{2} \gamma \sqrt{3 - \gamma} \right] \quad (1)$$

con  $\gamma = m/M_p$ , siendo  $m$  la masa del electrón y  $M_p$  la masa del proyectil. En una segunda etapa, el electrón dispersado colisiona elásticamente con el blanco (T) y se reorienta. Para el caso de proyectiles pesados ( $\gamma \ll 1$ ) resulta

$$\theta_p \approx \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{m}{M_p} \quad \theta_e \approx \frac{\pi}{3} \quad (2)$$

Después de la segunda colisión,  $v'_p \approx v'_e \approx v$  y  $\theta_e \approx \theta_p$ , con lo cual la captura puede hacerse efectiva. Thomas predijo con este modelo una

dependencia asintótica con la velocidad de  $v^{-11}$  para las secciones eficaces totales de captura de capa K del blanco a capa K del proyectil (pesado). En 1928, Oppenheimer evaluó

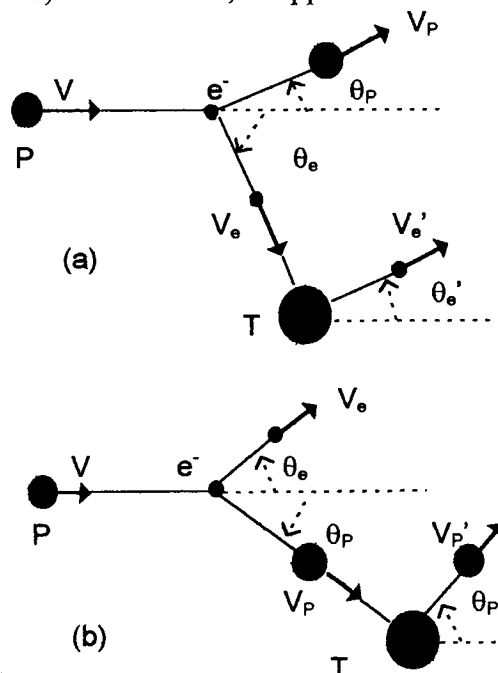


Figura 1: Mecanismos clásicos de Thomas en dos etapas para captura electrónica.

aproximadamente el primer orden de Born para la amplitud de transición correspondiente a captura desde la capa K de blancos hidrogenicos

a la capa K del proyectil. En 1930, Brinkmann y Kramers calcularon dicha sección total en forma exacta obteniendo una dependencia asintótica con la velocidad de  $v^{-12}$  en desacuerdo con el cálculo clásico de Thomas. Este resultado no fue comprendido plenamente en su momento. En 1955, Drisko aclaró la situación al relacionar el mecanismo de Thomas con un proceso de segundo orden de Born<sup>2</sup>; evaluó el segundo orden de Born de la amplitud de transición y encontró una dependencia asintótica de  $v^{-11}$ .

Consideremos ahora el elemento de matriz de transición en su forma *post*

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f | V_f | \Psi_i^+ \rangle \quad (3)$$

donde  $\Psi_i^+$  es la función de onda exacta del problema con condiciones de onda saliente,  $\Phi_f$  la función de onda del estado final y  $V_f = V_{Te} + V_{PT}$ , la perturbación correspondiente en el canal final.  $V_{PT}$  y  $V_{Te}$  representan las interacciones proyectil-blanco y blanco-electrón, respectivamente. La perturbación en el canal inicial resulta  $V_i = V_{Pe} + V_{PT}$ , con  $V_{Pe}$  la interacción proyectil-electrón. Desarrollando la amplitud en serie de Born, tenemos

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f | V_f | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | V_f G_0^+ V_i | \Phi_i \rangle + \dots \quad (4)$$

$$= T_{if}^{B+} + T_{if}^{2B+} + \dots$$

donde hemos indicado el primer y segundo orden de dicho desarrollo con

$$T_{if}^{B+} = \langle \Phi_f | V_f | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_f | (V_{Te} + V_{PT}) | \Phi_i \rangle \quad (5)$$

$$T_{if}^{2B+} = \langle \Phi_f | V_f G_0^+ V_i | \Phi_i \rangle =$$

$$= \langle \Phi_f | (V_{Te} + V_{PT}) G_0^+ (V_{Pe} + V_{PT}) | \Phi_i \rangle = \quad (6)$$

$$= T_A + T_B + T_C + T_D$$

respectivamente y donde

$$T_A = \langle \Phi_f | V_{Te} G_0^+ V_{Pe} | \Phi_i \rangle$$

$$T_B = \langle \Phi_f | V_{PT} G_0^+ V_{Pe} | \Phi_i \rangle$$

$$T_C = \langle \Phi_f | V_{Te} G_0^+ V_{PT} | \Phi_i \rangle \quad (7)$$

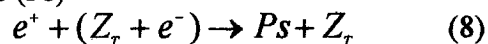
$$T_D = \langle \Phi_f | V_{PT} G_0^+ V_{PT} | \Phi_i \rangle$$

En las ecuaciones anteriores,  $G_0^+$  es el operador de Green libre del problema de tres cuerpos. El término de segundo orden  $T_A$  representa el mecanismo introducido por Thomas y se

corresponde con el proceso clásico que indicamos en la figura 1.a. El correspondiente a  $T_B$  se indica en la figura 1.b. Este mecanismo para el caso de proyectiles pesados ( $\gamma \ll 1$ ) tiene asociado un ángulo crítico muy próximo a  $\theta'_p = \pi/3$ . El pico de Thomas standard a pequeños ángulos para el caso de proyectiles pesados ha sido ampliamente estudiado teóricamente y su existencia se ha visto confirmada por mediciones experimentales de secciones eficaces diferenciales de captura<sup>3-5</sup>. Por otra parte, el pico a grandes ángulos fue predicho teóricamente por Shakeshat y Spruch<sup>6</sup> y existe evidencia experimental de su existencia<sup>7</sup>. En la sección que sigue, analizamos la presencia de picos de Thomas en los procesos de captura electrónica con formación de positronio utilizando positrones como proyectiles. Actualmente, no está del todo bien comprendido el proceso de captura para proyectiles livianos. Además, no es posible realizar un tratamiento semiclásico como en el caso de proyectiles pesados (aproximación del parámetro de impacto) y se debe tratar el problema con un formalismo cuántico completo.

## Teoría

Estudiemos la reacción de captura electrónica que conduce a la formación de átomos de positronio (Ps)



con blancos monoeléctricos de carga  $Z_T$ .

Consideremos ahora los términos  $T_A$  y  $T_B$  del segundo orden del desarrollo de Born para esta reacción y sus procesos clásicos asociados. En este caso ( $\gamma=1$ ), la fórmula (1) da el mismo valor,  $\theta=45^\circ$ , para el ángulo crítico de Thomas correspondiente a dichos procesos. Esto es consecuencia de la igualdad de masas entre el proyectil (positrón) y el electrón. Dado que además las cargas del positrón y electrón son unitarias pero de signo opuesto, Shakeshaft y colaboradores sugirieron<sup>8</sup> la posibilidad de interferencias entre los términos  $T_A$  y  $T_B$  a altas energías, resultando las mismas destructivas o constructivas según que el átomo de positronio se forme en un estado de momento angular  $l$  par

o impar, respectivamente. Igarashi y Toshima<sup>9,10</sup> realizaron recientemente el cálculo de segundo orden de Born (B2) en forma exacta para blancos de hidrógeno. Dichos autores encuentran que para los estados  $s$ , las partes imaginarias de los términos  $T_A$  y  $T_B$  interfieren destructivamente a altas energías para ángulos menores que  $40^\circ$  no apareciendo una estructura del tipo de Thomas en esta región angular. Encuentran, además, interferencias destructivas entre el término de primer orden y los términos de segundo orden. Esto genera en las secciones eficaces diferenciales a altas velocidades ( $v=20$  u.a.) la presencia de dos mínimos muy pronunciados alrededor de  $26^\circ$  y  $39^\circ$ . Por otra parte, McGuire y colaboradores<sup>11</sup> evaluaron secciones eficaces diferenciales para blancos de hidrógeno utilizando la aproximación del potencial fuerte (Strong Potential Born, SPB) encontrando un pico a  $45^\circ$ . La presencia de dicho pico se hace más evidente a medida que la energía cinética del positrón se incrementa. Igarashi y Toshima advierten que en el cálculo de McGuire y colaboradores aparecerían también mínimos si se tuvieran en cuenta los términos despreciados por estos últimos. Los cálculos de Igarashi y Toshima hacen uso de ondas planas como estados intermedios del continuo. Dichos estados intermedios no son los más adecuados para la descripción de las distribuciones angulares alrededor del pico de Thomas. Resultan más apropiados, en cambio, estados intermedios coulombianos.

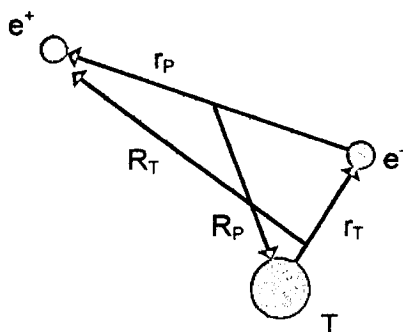


Figura 2: Coordenadas utilizadas en el texto.

En lo que sigue, utilizamos la aproximación Estado Final de Onda Distorsionada del Continuo (Continuum Distorted Wave-Final State, CDW-FS)<sup>12</sup> para analizar la presencia del

pico de Thomas a altas velocidades de impacto del positrón. Dicho modelo, obtenido del primer orden de un formalismo de Dodd y Greider<sup>13</sup>, 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

$$T_{\alpha\beta}^{-,CDW-FS} = N_{\nu_\alpha}^+ N_{\nu_\beta}^- \int d\vec{r}_T d\vec{R}_T \exp[i(\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}_T + \vec{k}_\beta \cdot \vec{R}_p)] \phi_f(\vec{r}_p) \left( \frac{1}{R_T} - \frac{1}{r_p} \right) {}_1F_1[-i\beta, 1, i\nu_\beta R_T + i\vec{\nu}_\beta \cdot \vec{R}_T] {}_1F_1[i\beta, 1, i\nu_\beta r_p + i\vec{\nu}_\beta \cdot \vec{r}_T] \phi_i(\vec{r}_T) {}_1F_1[-i\nu_\alpha, 1, i\vec{k}_\alpha \cdot R_T - i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}_T] \quad (9)$$

con

$$N_{\nu_\alpha}^+ = \exp[\pi\nu_\alpha/2] \Gamma(1-i\nu_\alpha) \quad N_{\nu_\beta}^- = \pi\beta / \sinh(\pi\beta) \quad (10)$$

$$\beta = \frac{Z_T}{v_p} \quad \nu_\alpha = (Z_T - 1)/v$$

siendo  $\phi_i$  y  $\phi_f$  los estados ligados inicial y final, respectivamente,  ${}_1F_1$  la función hipergeométrica confluyente,  $\Gamma$  la función Gamma y, además,  $k_\alpha \approx v$  y  $k_\beta \approx v/2$ . Las coordenadas utilizadas se indican en la figura 2.

Debido a la complejidad del cálculo numérico, los resultados que presentamos se obtienen con una aproximación de alta velocidad de impacto lo cual simplifica las integraciones a realizar. En las figuras 3 y 4 mostramos secciones eficaces diferenciales para la reacción (8) utilizando como blancos iones de helio monocargados a una energía de colisión de  $E=10$  y  $50$  KeV lo que corresponde a velocidades de  $v \approx 27$  u.a. y  $60$  u.a., respectivamente. El último valor debe tomarse como ilustrativo de la evolución de las secciones eficaces diferenciales a medida que la energía aumenta, ya que a estos valores tan altos de velocidad, los procesos relativistas son importantes. Observamos que las secciones presentan varias estructuras. En ambas figuras aparecen dos mínimos como en B2 aunque su posición se ha desplazado hacia valores angulares menores y ahora tenemos entre ellos una estructura adicional. También en las dos figuras notamos la presencia de un pico localizado alrededor de  $40^\circ$  para  $E=10$  KeV y a  $45^\circ$  a  $E=50$  KeV que podemos asociar con el proceso de dos etapas de Thomas. El pico

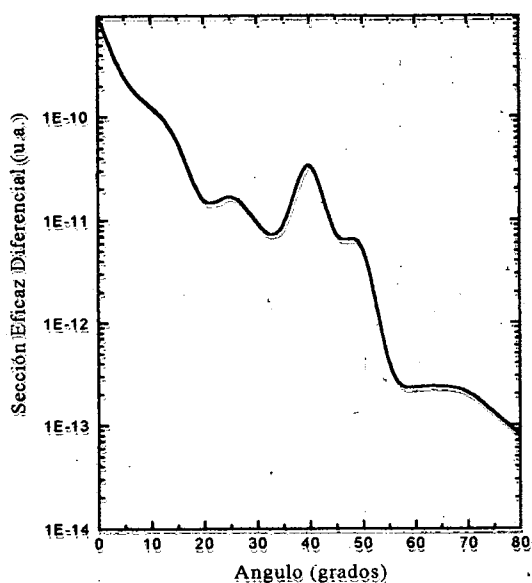


Figura 3: Sección eficaz diferencial para  $e^+ + He^+ \Rightarrow Ps + He^{2+}$  a energía de impacto del positrón  $E_i = 10 \text{ keV}$ .

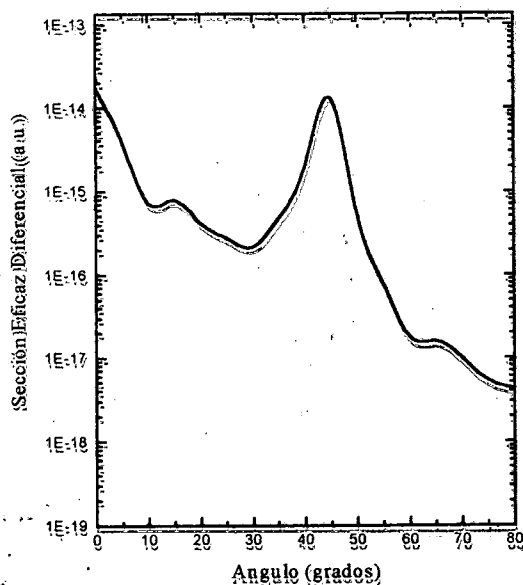


Figura 4: Idem figura 3 pero a energía de impacto del positrón  $E_i = 50 \text{ keV}$ .

se hace más importante en el caso de energía más alta.

### 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. Se observan estructuras provenientes posiblemente de efectos de interferencia entre los diferentes términos cuánticos. Experiencias que confirmen o no la presencia de dicho pico son bienvenidas.

### Referencias

- 1 - Thomas L.H., Proc. Roy. Soc. A, **114**, 561 (1927).
- 2 - Drisko R.M., Ph. D. Thesis, Carnegie Inst. of Techn., (1955).
- 3 - Shakeshaft R. and Spruch L., Rev. Mod. Phys., **51**, 369, (1979).
- 4 - Horsdal-Pedersen E., Cocke C.L. and Stockli M., Phys. Rev. Lett., **50**, 1910, (1983).
- 5 - Rivarola R.D., Phys. Rev. A, **30**, 1122, (1984).

- 6 - Shakeshaft R. and Spruch L., Phys. Rev. A, **29**, 695, (1984).
- 7 - Horsdal-Pedersen E., Loftager P. and Rasmussen J.L., J. Phys. B, **15**, 2461, (1982).
- 8 - Shakeshaft R. and Wadhera J. M., Phys. Rev. A, **22**, 968, (1980).
- 9 - Igarashi A. y Toshima N., Phys. Rev. A, **46**, R1159, (1992).
- 10 - Igarashi A. y Toshima N., Phys. Rev. A, **47**, 2386, (1993).
- 11 - McGuire J.H., Sil N.C. and Deb N.C., Phys. Rev. A, **34**, 685, (1986).
- 12 - Fojón O.A., Tesis Doctoral, Universidad Nacional de Rosario, (1994).
- 13 - Dodd L.R. and Greider K.R., Phys. Rev., **146**, 675, (1966).

**LOS SIGUIENTES TRABAJOS  
NO HAN SIDO ORDENADOS CORRECTAMENTE  
POR SU TARDIA ENTRADA A IMPRENTA**