

Estudio de la sección eficaz quintuple diferencial en colisiones de ionización por impacto de positrones

R. Della Picca and R. O. Barrachina
 Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro,
 8400 S.C. de Bariloche, Río Negro

La sección eficaz quintuple diferencial (QDCS) brinda la mayor información posible en una colisión de ionización; el estudio de la misma, sin realizar aproximaciones sobre las relaciones de las masas involucradas ([1] y [2]), puede revelar estructuras hasta ahora desconocidas.

En particular en este trabajo se estudió la colisión de positrones contra moléculas de hidrógeno y se encontró una nueva estructura que no había sido identificada hasta el momento. Se presentan sus características principales y una posible explicación.

The quintuple differential cross section (QDCS) gives the more complete information about a ionization collision. Its study, without any approximation on the mass ratios ([1] and [2]), can unveil new, not previously observed, structures.

In particular, in this work the ionization of Hydrogen molecules by the impact of positrons was studied and a new structure that has not been identified until now was found. Its main characteristics and a possible explanation are presented.

PACS numbers:

I. INTRODUCCIÓN

Durante muchos años se han estudiado las colisiones que involucran tres cuerpos, en particular las colisiones de ionización, donde debido a la interacción del proyectil, el electrón que se encontraba ligado al blanco pasa a un estado del continuo.

Con el nuevo desarrollo de la técnica experimental COLTRIMS (Cold Target Recoil Ions Momentum Spectroscopy) es posible obtener toda la información posible de una colisión de ionización (3). Es por esto que en los últimos años se ha preferido estudiar la sección eficaz multiple diferencial (MDCS), o bien, quintuple diferencial (QDCS); que es la que aporta toda la información cinemática disponible de la colisión de ionización.

Sin embargo, no resulta inmediato el estudio de la QDCS, ya que como su nombre lo indica, para poder graficarla en función de sus cinco variables (en realidad son cuatro, al considerar simetría cilíndrica) se necesitarían seis (cinco) dimensiones. Es por esta razón que se realizan "cortes" de la misma. En este trabajo, la necesidad de dos restricciones en las variables del problema es satisfecha imponiendo simetría coplanar ($\Delta\varphi = 0$) y el ángulo de dispersión del proyectil igual al del electrón ($\theta_e = \theta_p$). Ver Fig (2).

En los trabajos de Fiol *et al* 2001 (1) y 2002 (2) se presenta un formalismo que permite realizar estudios sobre la QDCS para cualquier tipo de relaciones entre las masas de los cuerpos, ya que en el estado final pone en pie de igualdad a las tres interacciones y se utiliza una cinemática correcta. Dentro de este marco teórico, en el presente artículo se estudió la QDCS con positrones como proyectiles con energías de incidencia intermedias (100 y 1000 eV). La aparición de una estructura hasta ahora desconocida, descrita en este trabajo, revela la importancia del tratamiento correcto de las masas involucradas.

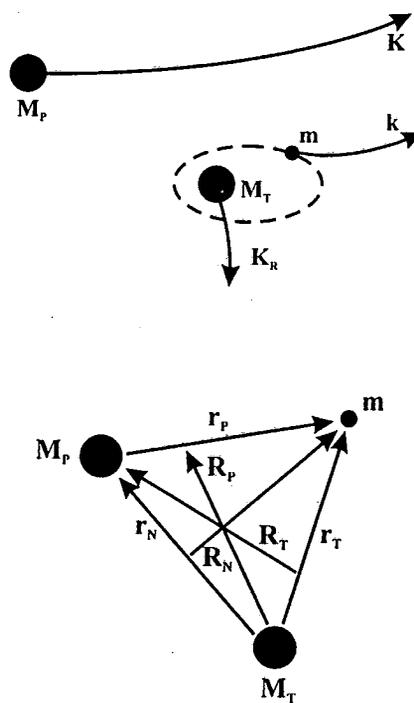


FIG. 1: Las Coordenadas de Jacobi describen el movimiento relativo respecto del centro de masa.

II. TEORÍA

El proyectil de masa M_P y carga Z_P incide con una velocidad v sobre el sistema electrón-blanco. El núcleo del blanco (target) tiene una masa M_T y carga Z_T . Se considera que el blanco tiene un sólo electrón ligado, con energía de ligadura ϵ_i . En caso de utilizar blancos con más electrones y/o protones, se utilizará una carga efectiva para el blanco que se adecúe con la energía de ionización.

El problema puede ser descrito en el sistema de centro de masa mediante la utilización de cualquier

par de las coordenadas de Jacobi (ver Fig.(1)).

El hamiltoniano escrito en este sistema es (en este trabajo se utilizan unidades atómicas):

$$H = \frac{k_j^2}{2m_j} + \frac{K_j^2}{2\mu_j} + \frac{Z_T Z_P}{r_N} - \frac{Z_T}{r_T} - \frac{Z_P}{r_P} \quad (1)$$

para $j = T, P, N$, donde k_j y K_j corresponden a los impulsos de las coordenadas r_j y R_j respectivamente. Las masas reducidas están definidas por:

$$\begin{aligned} m_T &= \frac{mM_T}{m + M_T} & \mu_T &= \frac{(m + M_T)M_P}{m + M_T + M_P} \\ m_P &= \frac{mM_P}{m + M_P} & \mu_P &= \frac{(m + M_P)M_T}{m + M_T + M_P} \\ m_N &= \frac{M_P M_T}{M_P + M_T} & \mu_N &= \frac{(M_P + M_T)m}{m + M_T + M_P} \end{aligned} \quad (2)$$

Los impulsos del electrón, proyectil y blanco están

relacionados con los \mathbf{K}_j mediante:

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= m\mathbf{v}_{CM} + \mathbf{K}_N \\ \mathbf{K} &= M_P\mathbf{v}_{CM} + \mathbf{K}_T \\ \mathbf{K}_R &= M_T\mathbf{v}_{CM} - \mathbf{K}_P \end{aligned} \quad (3)$$

La más completa información de la colisión está en la sección eficaz quintuple diferencial, QDCS, ⁽¹⁾

$$\frac{d\sigma}{dk_j dK_j} = \frac{(2\pi)^4}{v} |t_{if}|^2 \delta(E_i - \frac{k_j^2}{2m_j} - \frac{K_j^2}{2\mu_j})$$

Realizando un cambio de variables es posible llevar la QDCS a la siguiente forma, que es la que se utilizó en este trabajo:

$$\frac{d\sigma}{dE_k d\Omega_k d\Omega_K} = \frac{(2\pi)^4}{v} |t_{if}(\mathbf{k}, \mathbf{K})|^2 \frac{m k m_N K^2}{|K + \hat{K} \cdot (\mathbf{k} - m\mathbf{v}) m_N / M_T|}$$

donde el módulo de \mathbf{K} está fijado por la conservación de energía y t_{if} es la matriz de transición.

La matriz de transición en su forma prior es (Taylor 1972 ⁽⁴⁾):

$$t_{if} = \langle \psi_f^- | V_{Pe} + V_{PT} | \psi_i \rangle = t_P + t_N \quad (4)$$

donde $|\psi_i\rangle$ es un producto de una función de onda del estado ligado e-T, por una onda plana correspon-

diente a la partícula incidente (P). $|\psi_f^- \rangle$ es autoestado del hamiltoniano total (H de la ec. (1) más la energía del centro de masa) y es la función de onda del estado final. En este trabajo se utilizará una función de onda aproximada, Ψ_{C3} , que describe tres cuerpos con interacción coulombiana en el continuo, o sea, un producto de tres hipergeométricas con sus respectivos factores de coulomb:

$$\psi_f^- \approx \Psi_{C3} = \frac{e^{i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j + \mathbf{K}_j \cdot \mathbf{R}_j)}}{(2\pi)^3} \prod_{j=T,P,N} \Gamma(1 - i\nu_j) e^{-\pi\nu_j/2} {}_1F_1(i\nu_j; 1; -i(k_j r_j + \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j)) \quad (5)$$

Por último, t_{if} se puede separar en dos términos: t_P y t_N correspondientes a V_{Pe} , potencial de interacción entre el proyectil y el electrón, y V_{PT} , el potencial internuclear, respectivamente, como se indica en la ec. (4).

En la introducción se mencionó la necesidad de realizar cortes de la QDCS para su estudio. De las dos restricciones que se fijaron en este trabajo, la primera corresponde a la simetría coplanar; esto es que el plano que contiene al vector del impulso final del electrón, \mathbf{k} , y a la dirección de incidencia (o la dirección de \mathbf{v}), coincide con el plano que contiene al impulso \mathbf{K} y a \mathbf{v} (ver Fig.(2)). Por conservación de momento, \mathbf{K}_R debe permanecer en dicho plano. De esta forma,

los momentos de las partículas quedarán definidos por sus respectivos módulos y por los ángulos que formen con la dirección de incidencia: θ_e , θ_P y θ_T . La segunda restricción que se estableció corresponde a fijar $\theta_e = \theta_P = \theta$, esto es que el electrón y el proyectil luego de la colisión salen en igual dirección. Dado que el plano donde viven todos los impulsos puede ser fijado arbitrariamente, por la simetría cilíndrica del problema, quedan como variables k y θ , solamente.

Dentro de todas las posibilidades de restricciones que se pueden escoger, se eligieron éstas para que coincidan con las condiciones de trabajo en que un grupo experimental se propone observar los efectos aquí descritos ⁽⁵⁾.

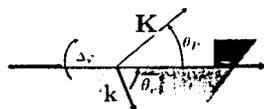


FIG. 2: Los planos a los que pertenecen los momentos del electrón k y del proyectil K son distintos en una simetría NO coplanar.

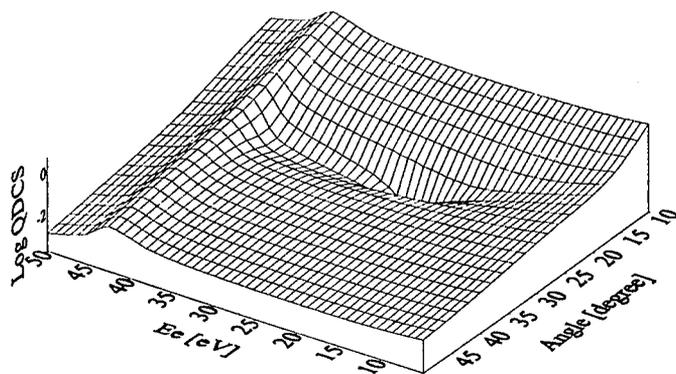


FIG. 3: Logaritmo de QDCS en función de la energía del electrón y del ángulo de dispersión para la ionización simple de H_2 por impacto de positrones de 100 eV.

III. CÁLCULOS DE QDCS

En esta sección se presentan las QDCS para una colisión: $e^+ + H_2 \rightarrow e^+ + H_2^+ + e^-$ para diferentes energías de incidencia del positrón. La carga efectiva del hidrógeno molecular se consideró $Z_{eff} = Z_T = 1.064$.

En la Fig. (3) se muestra el logaritmo de la QDCS para una colisión de positrones de 100 eV (o bien $v = 2.7$ u.a.). Se pueden observar dos estructuras: un máximo extendido para todo ángulo y cercano a 50 eV, y un mínimo centrado a 22.5° hasta ahora no descrito en la bibliografía.

El máximo cercano a una energía del electrón (E_e) de 50 eV, corresponde a la cúspide de ECC (electron capture to the continuum, ver ⁽⁶⁾, ⁽⁷⁾ y ⁽²⁾) en la que el electrón y el proyectil salen con igual velocidad y en la misma dirección. Al escoger $\theta_p = \theta_e$ como restricción para los cálculos, este máximo está presente para todo ángulo. Y dado que las masas de e^- y e^+ son iguales, ECC está presente cuando las energías de ambos coinciden, casi a 50 eV, que corresponde a que cada partícula quedó con la mitad de la energía incidente.

La información de la Fig. (3) puede ser descrita en términos de los momentos paralelo y perpendicular del electrón, proyectil o blanco, ver Fig. (4).

Por conservación de energía y momento los módulos del momento del e^- y e^+ no pueden superar el valor de 2.7 u.a.; más allá de este valor la QDCS se anula. Esto puede observarse en la Fig. (4) (a) y (b). El caso (c) muestra que la distribución de momentos del blanco

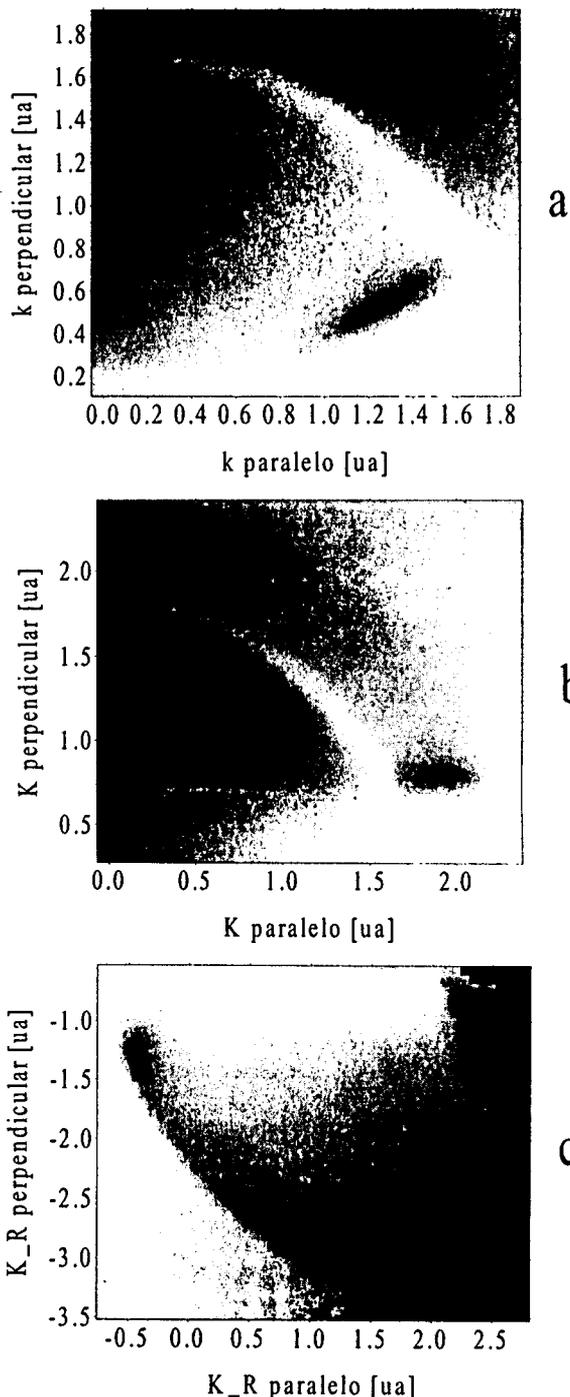


FIG. 4: Logaritmo de QDCS en función de los momentos paralelos y perpendicular del electrón (a), proyectil (b) y blanco (c), para una colisión de positrones de 100 eV.

no es nula, o sea, el ion residual no se queda quieto durante la colisión; contrariamente a muchas aproximaciones donde se supone que el blanco permanece fijo.

En la Fig. (5) se muestra la sección eficaz quintuple diferencial para una colisión con energía de incidencia de 1000 eV. Se pueden observar las mismas estructuras que para el caso anterior, ECC y mínimo a 22.5° y también otro mínimo a 45° que es debido a la interferencia entre dos procesos de colisiones bi-

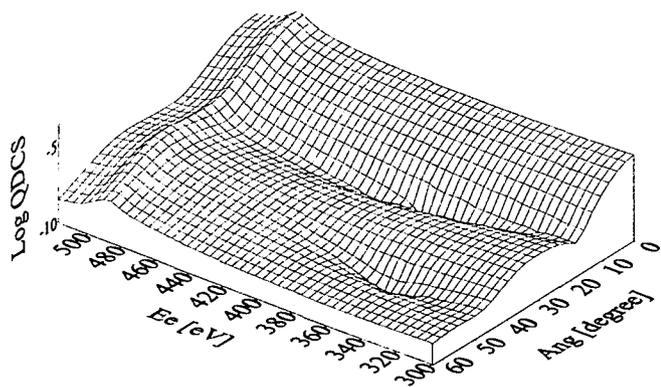


FIG. 5: Logaritmo de QDCS en función de energía del electrón emitido y ángulo de dispersión ($\theta_e = \theta_p$) para una colisión de positrones de 1000 eV.

narias que coinciden en ese ángulo, (ver el trabajo de Brauner and Briggs ⁽⁸⁾). Este tipo de mecanismos, de una colisión binaria (proyectil-electrón) seguida de una dispersión elástica (electrón-blanco) introducido por Thomas en 1927 ⁽⁹⁾. Para el caso en que el proyectil sea un positrón, puede ocurrir que luego del choque $e^+ + e^-$, tanto el electrón como el positrón se dispersen elásticamente con el núcleo; estos dos casos interfieren a 45° .

IV. ELECTRONES DE ENSILLADURA

El estudio de la estructura desconocida observada a 22.5° se llevó a cabo mediante los siguientes pasos. En primer lugar se observó que el término de la matriz de transición que contiene el potencial internuclear (t_N) no presenta este mínimo. En la Fig (6) se muestra la QDCS y las correspondientes contribuciones de t_P y t_N , para una colisión de 100 eV para una energía fija del electrón de 19 eV, (lo que corresponde a un corte del gráfico de la Fig. (3)). Se observa que el mínimo es debido solamente al término t_P de la matriz de transición (ver ec. (4)); esto indica que primeramente tiene lugar la colisión que corresponde a la del positrón contra la del electrón.

En segundo lugar se estudió la QDCS apagando una por vez, cualquiera de las tres interacciones presentes en el estado final, o sea, sacando la función hipergeométrica correspondiente a la interacción que se quisiese anular en la función de onda del estado final, (ver ec. (5)). De esta forma se presenta en el gráfico de la Fig. (7) el cálculo para la QDCS apagando las interacciones electrón-positrón (e-P), electrón-blanco (e-T) y blanco-positrón (T-P); también el cálculo sin aproximaciones. Se puede concluir que el mínimo observado es intrínseco a la interacción de los tres cuerpos involucrados.

Considerando las conclusiones anteriores, proponemos el siguiente mecanismo de colisión: el e^+ choca con el e^- y es dispersado en un ángulo θ_P mientras que el electrón es impulsado contra el blanco, quien lo dispersa elásticamente, de manera tal que

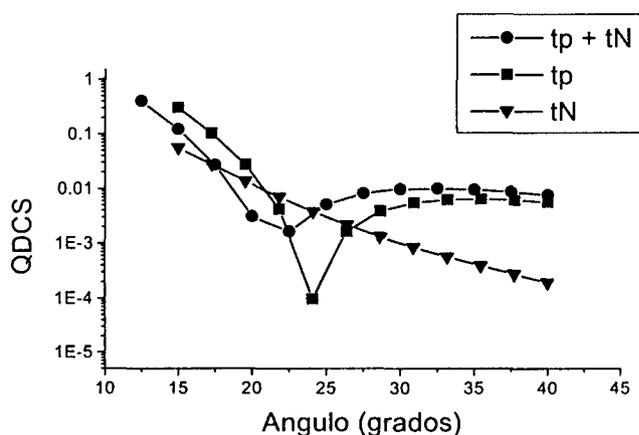


FIG. 6: QDCS en función del ángulo de dispersión ($\theta_e = \theta_p$) para una colisión de positrones de 100 eV y $E_e = 19$ eV.

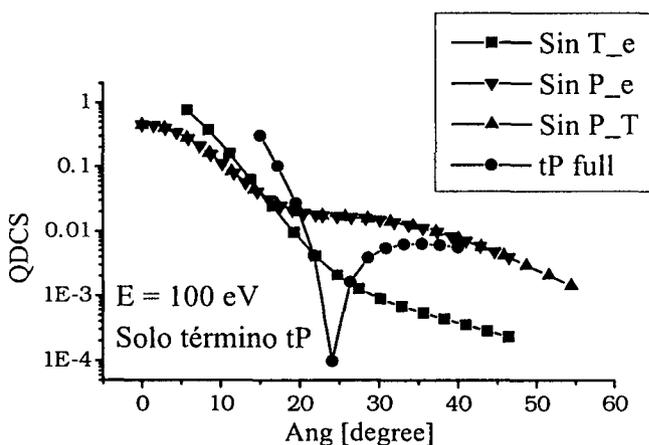


FIG. 7: QDCS en función del ángulo de dispersión ($\theta_e = \theta_p$) para una colisión de positrones de 100 eV y $E_e = 19$ eV. El resto de las curvas corresponde a apagar interacciones en el estado final (ver texto).

luego de la colisión sale con un ángulo igual al del proyectil. En esta instancia, el electrón se ubica espacialmente en el punto de ensilladura del potencial generado por el blanco y el proyectil (ver Fig.(8)). Para que el electrón pueda permanecer en ese punto debe tener una velocidad igual a:

$$\frac{v_P}{1 + \sqrt{\frac{Z_P}{Z_T}}}$$

donde v_P es la velocidad relativa entre el proyectil y el blanco residual. Bajo la consideración de que el blanco tiene un momento pequeño o casi nulo (como lo indica la Fig. (4, caso (c)); es de esperar una contribución importante de estos electrones que salen con velocidad cercana a $\frac{v_P}{2}$ en la misma dirección que el proyectil, mientras que éste lo hace con velocidad v_P . Si en el primer choque (e^+ contra e^-), se impone que la velocidad del electrón deba ser la mitad que la del proyectil, bajo consideraciones de conservación de energía y momento para una colisión binaria, se obtiene

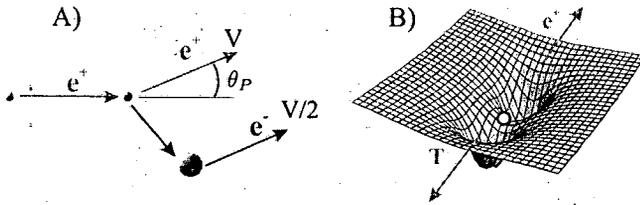


FIG. 8: (a) El e^+ choca con el e^- , el primero se dispersa en un ángulo θ_p y el electrón, ahora con velocidad $v/2$, colisiona elásticamente con el blanco. (b) El electrón siente este potencial. "Sentado" en el punto de ensilladura puede escapar del núcleo.

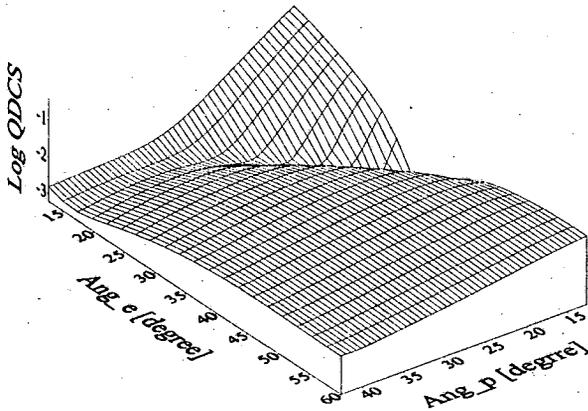


FIG. 9: QDCS en función del ángulo de dispersión θ_e y θ_p para una colisión de positrones de 100 eV y $E_e = 19$ eV.

que éste debe dispersarse en un ángulo de 23.5° .

El hecho de que estos "electrones de ensilladura" o "saddle-point electrons" ⁽¹⁰⁾ produzcan un mínimo y no un máximo en la QDCS puede deberse a una interferencia entre éstos y los electrones que escapan debido a una colisión directa.

Por último, se realizó el cálculo de la QDCS liberando la condición de ángulos iguales ($\theta_e = \theta_p$). En la Fig. (9) se muestra QDCS en forma logarítmica en función de los ángulos de dispersión del e^- y e^+ para una energía fija de $E_e = 19$ eV para la colisión de positrones de 100 eV. En esta nueva figura se puede observar que la restricción de ángulos iguales no es más que un corte del gráfico y que el mínimo corresponde a una estructura más general que la estudiada en este trabajo con la restricción $\theta_e = \theta_p$.

V. CONCLUSIONES

En este trabajo se estudió la sección eficaz quintuple diferencial para una colisión de positrones de energías de 100 y 1000 eV contra hidrógeno. Se identificaron estructuras como ECC e interferencia de dos mecanismos de Thomas a 45° . La aparición de un mínimo cercano a 22.5° se entendió considerando una colisión binaria entre el proyectil y el electrón, quien adquiere una velocidad que es la mitad que la del e^+ , y luego se dispersa elásticamente con el blanco para salir, finalmente, en la misma dirección que el proyectil. Para describir este tipo de procesos se requiere que se mantengan las tres interacciones en pie de igualdad, tal como se utiliza en la teoría presentada.

[1] Fiol J, Rodríguez V D and Barrachina R O, 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **34**, 933.
 [2] Fiol J, Barrachina R O and Rodríguez V D, 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **35**, 149.
 [3] Dörner R, Mergel V, Liu Zhaoyuan, Ullrich J, Spielberger L, Olson R E and Schmidt-Böcking H, 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **28**, 435.
 [4] Taylor J R, 1972 *Scattering theory: The quantum theory of nonrelativistic collisions*, Wiley J & Sons, New York.

[5] Kövér A, comunicación personal (2003)
 [6] Crooks G B and Rudd M E, 1970 *Phys. Rev. Lett.*, **25**, 1599.
 [7] Macek J H, 1970 *Phys. Rev. A*, **1**, 235.
 [8] Brauner M, Briggs J S, 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **24**, 2227.
 [9] Thomas L H, 1927 *Proc. R. Soc., A* **114**, 561
 [10] Olson R E, 1983, *Phys. Rev. A*, **27**, 1871.