

# Efectos de interferencia en colisiones positrón- $H_2^+$

O. A. FOJON\*, J. HANSEN\*\*, M. OURDANE\*\* 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 DE PHYSIQUE MOLECULAIRE ET DES COLLISIONS, INSTITUTE DE PHYSIQUE  
RUE ARAGO, TECHNOPOLE 2000, METZ, FRANCE

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

Se estudia teóricamente la captura electrónica por impacto de positrones veloces desde moléculas de  $H_2^+$ . Se obtienen secciones eficaces diferenciales usando la primera aproximación de Born. Se estudia la influencia de la orientación del eje molecular sobre la reacción de captura. Se comparan los resultados con los equivalentes de impacto de protones.

Electron capture from  $H_2^+$  by fast positron impact is studied theoretically. Differential cross sections are obtained within the first Born approximation. The influence of the orientation angle of the molecular axis on the reaction is analysed. Comparison with proton impact is made.

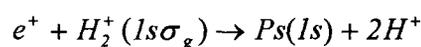
## Introducción

La formación de átomos de positronio por impacto de positrones sobre blancos atómicos (iónicos) ha sido objeto de estudio en los últimos años<sup>1-3</sup>. En este trabajo, el interés se centra en el caso de blancos moleculares. Luego de Tuan y Gerjouy<sup>4</sup>, diversos estudios sobre intercambio de carga utilizando proyectiles pesados y blancos moleculares diatómicos han puesto en evidencia la existencia de patrones de interferencia asociados con la dispersión producida por cada uno de los centros moleculares<sup>5-6</sup>. Estas predicciones teóricas han sido confirmadas por mediciones<sup>7</sup> para el sistema  $O^{8+}+D_2$ . El principal objetivo de este trabajo es estudiar la dependencia de la formación de positronio con la orientación del eje internuclear de la molécula y estudiar la aparición de patrones de interferencia en las secciones eficaces diferenciales. Se estudia el caso de blancos moleculares de hidrógeno ionizados para evitar la complicación producida por la existencia de electrones adicionales. Además, el análisis se limita al caso de energías de impacto intermedias y altas. Se utiliza la primera aproximación de Born. Son bien conocidas las limitaciones de esta aproximación. Sin embargo, es de esperar que los efectos físicos que se pretenden poner en evidencia no dependan fuertemente de la aproximación utilizada.

Se utilizan unidades atómicas salvo indicación en contrario.

## Teoría

La reacción de interés es



y las coordenadas utilizadas se muestran en la Fig. 1. El proceso se describe desde el centro de masa del sistema y el eje z se elige en la dirección de incidencia del positrón. La dirección del eje internuclear de la molécula está dada por los ángulos  $\theta_\rho$  (polar) y  $\varphi_\rho$  (azimutal) y se utiliza la longitud de equilibrio. Se supone que el tiempo característico de la colisión es mucho menor que los tiempos propios de la molécula (rotación y vibración). La dirección de salida del átomo de positronio está definida por los ángulos  $\theta_s$  y  $\varphi_s$ . La sección eficaz diferencial está dada por

$$\sigma^{(4)} = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_\rho d\Omega_s} = \frac{1}{16\pi^3} \frac{k_\beta}{k_\alpha} \mu_\alpha \mu_\beta |T^{a\beta}|^2$$

La masa reducida del sistema en el canal de entrada (salida) es  $\mu_\alpha \approx 1$  ( $\mu_\beta \approx 1/2$ ) y  $k_\alpha$  ( $k_\beta$ ) el momento del positrón (positronio).

El elemento de matriz en la primera aproximación de Born puede escribirse como  $T^{a\beta} = T_{11} + T_{22} + T_{12} + T_{21}$

donde hemos definido

$$T_{ij} = N \iint d\vec{r} d\vec{R} e^{-i\vec{k}_\beta \cdot \vec{r}_\beta} e^{i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}} \left( -\frac{1}{r_p} + \frac{1}{R_i} \right) \times \frac{1}{u^2} \frac{1}{\left[ \frac{1}{4} + \left( \vec{u} + \frac{\vec{k}_\beta}{2} + \vec{k} \right)^2 \right]^2} \times \varphi(\vec{r}_j) \varphi^*(\vec{r}_p) \quad i = j$$

$$T_{ij} = N \iint d\vec{r} d\vec{R} e^{-i\vec{k}_\beta \cdot \vec{r}_\beta} e^{i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}} \left( \frac{1}{R_i} \right) \times \varphi(\vec{r}_j) \varphi^*(\vec{r}_p) \quad i \neq j$$

con  $i=1,2$  y  $j=1,2$ .  $\varphi(\vec{r})$  representa una función hidrogénica de carga variacional  $\xi_T = 1.23$  y  $N$  es una constante de normalización. Los elementos de matriz con  $i=j$  (de ahora en más, términos directos) pueden interpretarse como la captura del electrón ligado al centro  $i$  mediante las interacciones positrón-electrón y positrón-núcleo del centro  $i$ . De la misma forma, los elementos de matriz con  $i \neq j$  (de ahora en más, términos indirectos) pueden interpretarse como captura del electrón ligado al centro  $j$  mediante la interacción positrón-núcleo del centro  $i$ . Por supuesto, en la molécula el electrón está simultáneamente ligado a ambos centros pero los elementos de matriz admiten esta interpretación.

En el caso de blancos homonucleares, el elemento de matriz correspondiente a la primera aproximación de Born puede escribirse como

$$T^{\alpha\beta} = 2N \cos(\vec{k} \cdot \frac{\vec{\rho}}{2}) T + e^{i\vec{k} \cdot \frac{\vec{\rho}}{2}} f(\vec{\rho}) + e^{-i\vec{k} \cdot \frac{\vec{\rho}}{2}} f(-\vec{\rho})$$

con  $\vec{k} = \vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta$  y además  $T=t_1=t_2$  donde

$$t_i = \iint d\vec{R}_i d\vec{r}_p e^{i(\vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta) \cdot \vec{R}_i + i\vec{k}_\beta \cdot \frac{\vec{r}_p}{2}} \left( \frac{1}{R_i} - \frac{1}{r_p} \right) \times \varphi^*(\vec{r}_p) \varphi(\vec{r}_i) \quad i = 1,2$$

y

$$f(\vec{\rho}) = \frac{8N\xi_T}{\sqrt{2\pi}} \int d\vec{u} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \frac{1}{\left[ \xi_T^2 + (\vec{u} + \vec{k})^2 \right]^2} \times$$

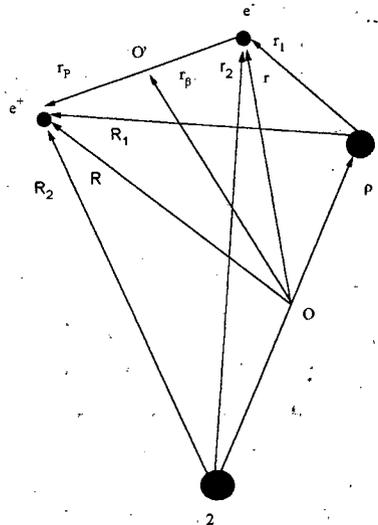


Figura 1: Coordenadas utilizadas en el texto.

### Resultados y conclusiones.

Estudiamos la dependencia de las secciones eficaces diferenciales (SED) con la orientación del eje intermolecular. En las Fig. 2 y 3 presentamos SED para formación de positronio con blancos de  $H_2$  integradas sobre todas las direcciones de emisión del átomo de positronio en función de  $\theta_p$  a velocidades (energías) de impacto  $v_i = 2.7$  ua ( $\cong 100$  eV) y 12.13 ua ( $\cong 2$  keV), respectivamente (no se incluyen efectos relativistas aunque podrían resultar importantes a la velocidad más alta). Se observan patrones típicos de interferencia. Los términos cruzados no pueden despreciarse sin cambiar apreciablemente los resultados a energías de impacto intermedias. A medida que la energía

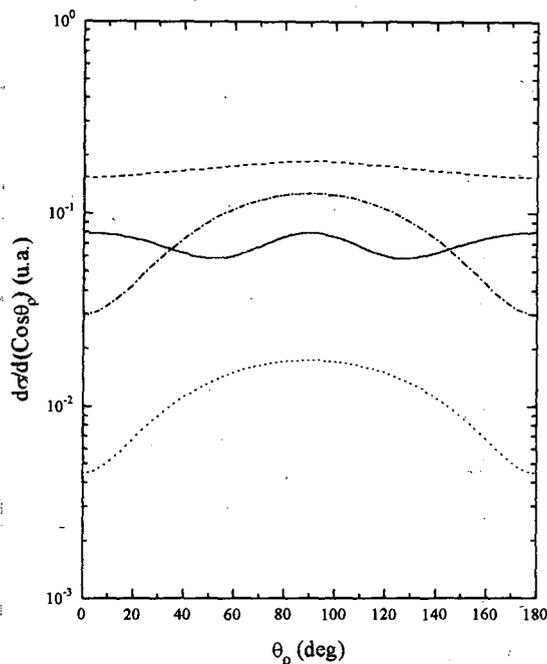


Figura 2: SED para  $e^+ + H_2^+$  a velocidad de impacto  $v_i = 2.7$ . —, Aproximación de Born; - - -, Aproximación de Born sin términos indirectos. SED para  $H^+ + H_2^+$  a  $v_i = 2.7$ . - · - ·,  $OBK^2$ ; ·····,  $CDW^2$ .

aumenta, la contribución de estos términos se vuelve menos importante. En general, la inclusión de dichos términos disminuye las SED como es de esperar de una interacción repulsiva. Se incluyen también SED de impacto de protones obtenidas con las aproximaciones  $OBK$  y  $CDW^9$  a las mismas velocidades de impacto de los positrones. Las interacciones proyectil-núcleos de la molécula no están incluidas dado que no afectan las SED integradas. Aunque los resultados  $OBK$  y  $CDW$  difieren en magnitud presentan formas similares. Es de esperar un comportamiento similar en el caso de impacto de positrones al utilizar un modelo de orden superior. Las diferencias entre impacto de protones y positrones pueden atribuirse a efectos de masa.

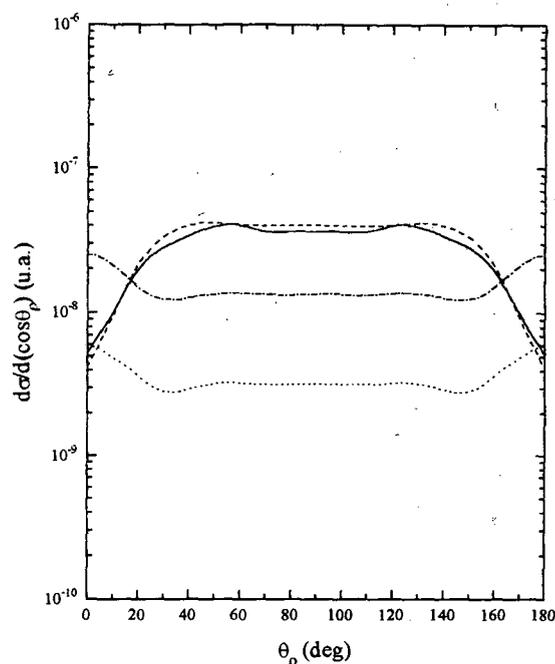


Figura 3: Idem Fig. 2 pero  $v_i = 12.13$ .

## Referencias

- 1 - Bransden B.H. y Noble C.J., Adv. in At. Mol. Opt. Phys., **32** (1994) 19; Laricchia G., XIX ICPEAC (Whistler, Canada), Book of Contributed papers (1995) 385 (y las referencias indicadas en ambos).
- 2 - O.A. Fojón, R. Gayet, J. Hanssen y R. D. Rivarola, Anales AFA 94 Vol. 4 (1994) 461.
- 3 - Fojón O.A., Rivarola R.D., Gayet R., Hanssen J. y Hervieux P. A., Phys. Rev. A **54** (1996) 4923.
- 4 - T. F. Tuang y E. Gerjouy, Phys. Rev. **117** (1960) 756.
- 5 - Y. D. Wang, J. H. McGuire y R. D. Rivarola, Phys. Rev. A **40** (1989) 3673.
- 6 - H. F. Busnengo, S. E. Corchs, R. D. Rivarola y J. McGuire, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. **B 98** (1995) 227.
- 7 - S. Cheng, C.L. Cocke, V. Frohme, E. Y. Kamber y S.L. Varghese, Phys. Rev. A **47** (1993) 3923.
- 8 - O. A. Fojón, R. D. Rivarola, J. Hanssen y M. A. Ourdane, Phys. Rev. A **55** (1997) 4913.
- 9 - H. F. Busnengo, S. E. Corchs, J. H. McGuire y R. D. Rivarola, XIX ICPEAC (Whistler, Canada), Book of Abstracts (1995) 407.