

IFT

Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

158

Tese de Doutorado

IFT-T.004/99

OK

Espalhamento pósitron-hélio em energias intermediárias
usando a aproximação “Close-coupling”

Puspitapallab Chaudhuri



Orientador

Sadhan K. Adhikari

Agosto, 1999

Para *Angsula*,
que tem me apoiado
mais do que possa agradecer

Agradecimentos

É um prazer agradecer as pessoas que, sem elas, a presente tese não seria possível. Primeiramente, gostaria de agradecer o prof. Sadhan K. Adhikari, do Instituto de Física Teórica, UNESP, por sua ajuda e orientação. Gostaria de expressar minha sempiterna admiração e profunda gratidão ao Prof. A. S. Ghosh do Indian Association for the Cultivation of Science, Calcutta, India, por me introduzir nesta área e por sua constante inspiração e ajuda durante todo tempo. É um prazer agradecer Prof B. M. Escobar Pimentel do IFT, UNESP, Prof B. N Roy e Dr. L. K Jha da B. R. A. Bihar University, India, pelo encorajamento e assistência nos vários estágios nos últimos anos. Eu especialmente devo a meus amigos Angelina Veiga Chakrabarti e Eduardo Chohfe, que não estão ligados à física, por suas constantes ajudas em outros campos da vida e por gastar seu valioso tempo para fazer minha estada em São Paulo mais agradável. Agradeço também meu amigo Christiano Santos, por não somente pelo auxílio na tradução, como também pela amizade. Meu especial agradecimento vai para todos os funcionários da biblioteca e secretarias do IFT, UNESP por ajudar-me sinceramente sempre quando precisei. Nesta ocasião, gostaria de expressar de coração minha gratidão a minha esposa Angsula por sua inspiração, cooperação, amor e acima de tudo acreditar em mim, algo de crucial significado na finalização desse trabalho. Também agradeço aos meus pais pelo apoio e encorajamento desde a infância.

O autor agradece à CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Devido a descoberta de feixes de pósitrons mono-energéticos de alta intensidade e ao desenvolvimento de detetores altamente sensíveis, na última década tem havido grande interesse nas pesquisas sobre espalhamento entre pósitrons e átomos, criando-se um novo ramo na física atômica. Nesta tese estudamos o espalhamento de pósitrons com átomo de Hélio por um método de aproximação conhecido como “*Close - Coupling - Approximation*” (CCA) utilizando combinações diferentes de bases de funções $\text{He}(1s1s)$, $\text{He}(1s2s)$, $\text{He}(1s2p)$, $\text{He}(1s3s)$, $\text{He}(1s3p)$, $\text{Ps}(1s)$, $\text{Ps}(2s)$ and $\text{Ps}(2p)$. Seguindo o princípio desta aproximação, a função total do sistema $e^+ - \text{He}$ é expandida em termos de autofunções do alvo atômico, do Hélio e de átomos de positrônio (Ps) que se formam no canal final. Assim, as equações integrais acopladas a serem resolvidas são obtidas. Temos calculado as seções de choque diferencial e total para vários processos, como espalhamento elástico, excitação de Hélio para os estados $\text{He}(1s2s)$, $\text{He}(1s2p)$, $\text{He}(1s3s)$ e $\text{He}(1s3p)$ e formação de átomos de positrônio nos estados $\text{Ps}(1s)$, $\text{Ps}(2s)$ e $\text{Ps}(2p)$. Ressonâncias estreitas e proeminentes em ondas S têm sido observadas em canais elástico, inelástico e “rearrangement” em baixas energias. As seções de choque diferencial e total para todos os canais e para várias energias incidentes são demonstradas e as contribuições de formação de positrônio na convergência geral do modelo e sua influência sobre outros canais diretos são estudados detalhadamente. As seções de choque total na região de energia média deste trabalho estão de acordo com as experiências.

Abstract

Due to the discovery and the subsequent improvement of highly intense mono-energetic positron beam and highly sensitive detectors in the last few years, the scattering of positrons by atoms has gained a renewed interest creating a new branch of research within the limit of atomic physics. In the present thesis we have studied the scattering of positrons with helium atom within the frame work of Close-Coupling Approximation (CCA) using different combination of the following basis functions : $\text{He}(1s1s)$, $\text{He}(1s2s)$, $\text{He}(1s2p)$, $\text{He}(1s3s)$, $\text{He}(1s3p)$, $\text{Ps}(1s)$, $\text{Ps}(2s)$ and $\text{Ps}(2p)$. Following the principle of this approximation scheme the total wavefunction of the $e^+\text{-He}$ system is expanded in terms of the eigenstates of target helium and resulting positronium (Ps) atom in the final channel and the required coupled-integral equations to be solved are obtained. We have calculated differential and total cross sections for various processses like elastic scattering, excitation of Helium to $\text{He}(1s2s)$, $\text{He}(1s2p)$, $\text{He}(1s3s)$ and $\text{He}(1s3p)$ states and Ps-formation to $\text{Ps}(1s)$, $\text{Ps}(2s)$ and $\text{Ps}(2p)$ states in an energy range of 0-300 eV. Prominent narrow S-wave resonances have been observed in elastic, inelastic and rearrangement channels at low energies. Differential and total cross sections are reported for all the channels for various incident energy and the effect of the Ps-formation channel on the general convergence of the model and its influence on other direct channels have been studied in detail. Present total cross sections in the medium energy region for all the channels are in good agreement with experiments.

Key words: Aproximação Close-coupling, pósitron, positrônio, ressonância

PACS Number(s) : 34.90.+q, 34.40.+n

Índice

1	Espalhamento Pósitron-átomo	1
1.1	Introdução	1
1.1.1	Comparação do espalhamento do pósitron e do elétron	3
1.1.2	Formação e aniquilação do positrônio	5
1.1.3	Plano da tese:	7
2	Teoria de Close Coupling	9
3	Espalhamento Pósitron-Hélio	19
3.1	Introdução	19
3.2	Teoria	25
3.2.1	Função de onda do hélio:	28
3.2.2	Função de onda do positrônio:	30
3.3	Técnica Numérica:	30
3.4	Resultados e Discussões	32
3.4.1	Deslocamento de fase abaixo do threshold de formação de Ps	33
3.4.2	Ressonância:	36
3.4.3	Seção de Choque Diferencial:	43
3.4.4	Parâmetros de coincidência:	49
3.4.5	Seção de Choque Total:	52

4 Conclusão	69
A Equações integrais acopladas usadas no presente trabalho	73
B Deslocamentos de fase elásticos a baixas energias para diferentes conjuntos de bases	76
B.1 Deslocamento de fase elástico de onda S	76
B.1.1 Conjunto de bases sem canal de formação de Ps	76
B.1.2 Conjunto de base com canal de formação de Ps	77
B.2 Deslocamento de fase elástico em onda P	78
B.2.1 Conjunto de base sem o canal de formação de Ps	78
B.2.2 Conjunto de bases com canal de formação de Ps	79
B.3 Deslocamento de fase elástico em onda D	80
B.3.1 Conjunto de bases sem canal de formação de Ps	80
B.3.2 Conjunto de bases com canal de formação de Ps	81
C Algumas relações e identidades matemáticas	82
D Solução da amplitude de espalhamento de Born, $f^B(k', k)$	84
D.1 Amplitude de espalhamento para a excitação do He(1s1s) para o He(1s2s) por impacto do pósitron:	84
D.2 Amplitude de espalhamento para a formação do Ps(1s) de He(1s1s) pelo impacto do pósitron	87
Referências	90

Capítulo 1

Espalhamento Pósitron-átomo

1.1 Introdução

O fenômeno do espalhamento é de importância crucial no estudo de sistemas clássicos. Porém, quando o tamanho do sistema é tão pequeno que não podemos vê-lo diretamente, ou quando as forças envolvidas são de tão curto alcance que não podemos medi-lo diretamente, o espalhamento torna-se uma prova indispensável. Muitos dos experimentos feitos hoje em dia são, de uma forma de outra, baseados no espalhamento de partículas. Espalhamentos em colisões elásticas e inelásticas, bem como captura de partículas elementares, núcleos, átomos, moléculas e quasipartículas são efetuados. Podemos obter mais informações sobre forças e propriedades de partículas em nível microscópico através de experimentos de espalhamento. A análise do processo de colisão é de extrema importância em investigações teóricas e experimentais sobre estrutura da matéria e sua forma física em escala microscópica. Assim, um conhecimento das colisões atômicas e moleculares é de importância básica em muitos campos da física.

A era da física de pósitrons iniciou-se com uma surpreendente predição de Dirac [1] e com as subseqüentes confirmações experimentais realizadas por Anderson [2] e Blackett & Occhialine [3]. Os pósitrons, desde sua descoberta, têm sido intensiva-

mente utilizados como prova em diferentes ramos da física. Quando foi descoberto, o espalhamento de elétrons por átomos teve grande avanço, principalmente com J. S. Townsend na Inglaterra e C. Ramsauer na Alemanha e seus respectivos colaboradores e discípulos. Sir H. S. W. Massey tinha convicções de que o espalhamento pósitron-átomo poderia levar a um melhor entendimento das interações de partículas carregadas com átomos, motivando colaboradores experimentais e teóricos. Quase sete décadas se passaram depois da descoberta do pósitron e muitos avanços em física de pósitrons e estudos das colisões pósitron-átomo tem sido feitos.

O espalhamento de pósitrons com alvos atômicos tem gerado novos fatos acerca da estrutura interna dos alvos, o que vem complementar os dados coletados sobre elétrons no mesmo alvo. O pósitron tem características peculiares e a interação com átomos possui um sentido próprio. Além dos tradicionais processos de espalhamento elástico e inelástico, há também um processo de *rearrangement* na formação de positrônio (Ps) - um estado ligado de elétron e pósitron - e um processo onde o pósitron aniquila-se com o elétron, liberando energia. A aplicação do método de aniquilação do pósitron [4] para investigar defeitos em sólidos cresceu rapidamente nas duas últimas décadas. A técnica tem-se desenvolvido nos moldes da ciência de estado sólido, capaz de produzir informações valiosas sobre concentração, configuração e estrutura interna de defeitos em matéria condensada. Esses métodos estão sendo bastante efetivos na determinação da superfície de Fermi em cristais. Essa informação é muito útil no cálculo da estrutura de banda. Além disso, a aniquilação de pósitrons pode ser uma ferramenta para o entendimento de sistemas práticos tais como, o rastreamento PET do processo cerebral humano, e para obter informações sobre regiões inacessíveis do universo.

No campo de física de altas energias, as interação de feixes de pósitrons com feixes de elétrons têm produzido informações valiosas e levou, em particular, à excitante descoberta da partícula J/Ψ em 1974.

1.1.1 Comparação do espalhamento do pósitron e do elétron

Colisões de pósitron-átomo e elétron-átomo têm sido tratadas de uma maneira análoga, ainda que alguns aspectos físicos do espalhamento pósitron-átomo sejam distintos. Devemos logo enfatizar que a aniquilação, embora espetacular e única, é muito improvável de acontecer quando comparada com processos atômicos usuais. Por essa razão, é possível tratar um pósitron de baixa energia como uma partícula positivamente carregada e não relativística, com a mesma massa do elétron; mais tarde a aniquilação pode ser incluída como uma perturbação muito fraca [5]. Portanto, podemos escrever o hamiltoniano para um pósitron interagindo com um átomo como uma soma de três termos:

$$H_A = - \sum_{i=1}^z \left[\frac{1}{2m_a} \nabla_i^2 + \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i < j}^z \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (1.1)$$

$$H_+ = - \frac{1}{2m_x} \nabla_x^2 \quad (1.2)$$

$$H' = \frac{Z}{x} - \sum_{i=1}^z \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|}, \quad (1.3)$$

Aqui, $\mathbf{r}_i$ é a coordenada do i -ésimo elétron, $\mathbf{x}$ é a coordenada do pósitron, ambas medidas da posição do núcleo da carga Z , assumido fixo. O hamiltoniano é praticamente o mesmo que o usual para o espalhamento do elétron de um átomo, exceto pela mudança no sinal de H' . Assim, num primeiro momento, podemos ver que a colisão pósitron-átomo difere muito pouco da colisão elétron-átomo: o potencial de interação envolvendo o projétil simplesmente muda de sinal. Todavia,

essa simples mudança no sinal tem implicações muito maiores. A primeira e mais óbvia, o pósitron sente uma repulsão efetiva de curto alcance quando se aproxima e penetra no átomo não perturbado (*aproximação Coulombiana estática*), enquanto um elétron sentiria uma atração.

Em segundo lugar, no campo elétrico do projétil o átomo adquire um momento de dipolo elétrico e se polariza (*interação coulombiana dinâmica* ou *interação de polarização*). O efeito é maior se o projétil está perto mas ainda fora do átomo tal que o projétil passa ao lado da nuvem eletrônica total. A interação entre a carga do projétil e o momento de dipolo induzido é sempre atrativa. Para o elétron, adiciona-se a interação coulombiana estática atrativa enquanto que para o pósitron subtrai-se. Em energias muito baixas o projétil não alcança a nuvem eletrônica e a interação de polarização é dominante. Consequentemente, indo de energias mais altas para mais baixas, a rede de interação repulsiva pósitron-átomo torna-se uma rede atrativa. Isto gera o efeito Ransauer-Townsend para o pósitron de maneira similar ao do espalhamento elétron-átomo. Uma diferença importante entre o espalhamento do pósitron e do elétron jaz no fato de que o pósitron é distinguível dos elétrons do alvo. No caso de espalhamento de elétrons, a natureza da função de onda total é puramente guiada pelo princípio de Pauli, enquanto que no espalhamento pósitron-átomo, o conhecimento da função de onda total é incompleto para pequenas separações. Então, quando o pósitron penetra na região ocupada pelos elétrons atômicos, os detalhes desse efeito na função de onda continuam sendo importantes.

Finalmente analisemos propriedades particulares de cada processo de colisão. No caso específico de espalhamento elétron-átomo o spin está relacionado com *interação*

de troca como elétrons atômicos. A dependência de spin relacionada a *interação spin-órbita*, o famoso espalhamento Mott de elétrons, é muito pequeno para pósitrons como os cálculos de Stauffer e McEachran tem mostrado [6]. De novo isto está relacionado ao fato que o pósitron é repelido pelo núcleo atômico e não pode ser estimado por experimentos de interação spin-órbita.

Uma propriedade particular do espalhamento pósitron-átomo é o processo de *formação do positrônio* (Ps). O fato que H' na eq. (1.3) tem um termo atrativo torna possível a formação do positrônio, o estado ligado do pósitron e elétron, quando energeticamente possível. Assim, um novo threshold inelástico aparece na colisão pósitron-átomo quando a formação de Ps é energeticamente possível. Este threshold inelástico sempre está abaixo do primeiro threshold inelástico de excitação. A formação de Ps é também um processo dependente do spin, mas não de uma forma trivial. “Uma boa teoria de espalhamento deve incluir formação de Ps , real ou virtual, e isto é mais importante que a troca eletrônica propriamente[7].

As diferenças entre os espalhamentos elétron-átomo e pósitron se mostram somente para baixas energia; a altas energias as seções transversais são iguais. Na primeira aproximação de Born (válida para altas energias), as seções transversais dependem somente do quadrado carga.

1.1.2 Formação e aniquilação do positrônio

O positrônio, o estado ligado do par elétron-pósitron é um isótopo do hidrogênio com massa $M = 2m_e \approx 1 \text{ meV}$. A massa reduzida é $\mu = m_e/2$ o que leva à energia do estado fundamental de $E=(13.6 \text{ eV})/2=6.8 \text{ eV}$ (no vácuo, pode ser menor, na média). O tamanho do átomo Ps é quase duas vezes o do átomo de hidrogênio e o

espectro de energia é similar ao do átomo de hidrogênio. As energias de formação do positrônio são descritas pelo modelo de Ore gap [8]. A probabilidade de formação do Ps é máxima quando a energia do pósitron durante a termalização está em um gap onde nenhuma outra transferência eletrônica de energia é possível. Para capturar um elétron de um átomo ou uma molécula com energia de ionização E_i , a energia de ionização E_p , a energia cinética do pósitron deve ser maior que $E_i - E_{ps}$, E_{ps} sendo a energia de ligação do átomo positrônio. Se E_p é maior que E_i do meio, o positrônio é formado com uma energia cinética maior que sua energia de ligação e se quebrará rapidamente na próxima colisão. Além disso, acima da mais baixa energia de excitação E_{ex} , ocorre os processos inelásticos. Estes processos definitivamente diminuem a razão da probabilidade da formação do positrônio. Assim, a formação do positrônio é mais provável com a energia no intervalo

$$E_i - E_{ps} < E_p < E_{ex} \quad (1.4)$$

o qual é o gap de Ore.

O estado fundamental de um positrônio pode ser formado nos estados singlete 1^1S_0 ou tripleto 1^3S_0 dependendo do spin do pósitron e elétron capturado. Os estados singlete e tripleto são conhecidos como *parapositrônio* (p-Ps) e *ortopositrônio* (o-Ps), respectivamente. Na ausência de uma conversão orto-para, 1/4 dos positrônios são formados no estado singlete e 3/4 no estado tripleto. Sua energia de separação é de 8.45×10^{-4} eV, o estado singlete sendo o de mais baixa. O parapositrônio decai em dois fótons sendo que o ortopositrônio decai em três. O tempo de vida médio para o p-Ps e o-Ps é de 1.25×10^{-10} sec e 1.42×10^{-7} sec respectivamente. Portanto, o tempo de vida de o-Ps é mais que três vezes ordens de magnitude maior que do p-Ps.

1.1.3 Plano da tese:

Esta tese apresenta o resultado de nossas investigações teóricas do espalhamento em baixas e médias energias. Temos usado o “eight-state Close Coupling Approximation” (CCA) que contém cinco auto-estados do hélio: $\text{He}(1s1s)$, $\text{He}(1s2s)$, $\text{He}(1s2p)$, $\text{He}(1s3s)$ e $\text{He}(1s3p)$ e três do positrônio (Ps): $\text{Ps}(1s)$, $\text{Ps}(2s)$ e $\text{Ps}(2p)$. Temos tratado ambos elétrons do alvo com valor igual e temos usado uma função de onda realística para o alvo de hélio e funções de onda do positrônio. O estudo tem sido feito para três regiões: i) abaixo do threshold de formação de Ps (0-16.6 eV) ii) região de gap de Ore (16.64-19.48 eV) iii) região de energia média (20-300 eV). Vários parâmetros de espalhamento têm sido calculados e comparados com outras teorias e experimentos.

A presente tese é colocada de tal forma que nos auxilie a entender a base matemática dos cálculos de CCA e as importantes características dos sistema e^+ -He. É também fornecido uma visão da relativa importância de cada auto-estado incluído nos canais direto e rearrangement. Ressonâncias no espalhamento e^+ -He são demonstradas de uma maneira sistemática pela primeira vez. Além da usual seção de choque total para canais elástico, excitação e formação de Ps, seções diferenciais também são calculadas para todos os canais.

A tese está elaborada da seguinte forma:

- O capítulo 1 contém uma pequena revisão histórica juntamente com a importância e motivação da investigação do espalhamento e^+ -átomo. Diferenças entre e^+ -átomo e e^- -atom são discutidas;
- O capítulo 2 apresenta uma descrição matemática detalhada da teoria de

Close Coupling (CCA) para o espalhamento e^+ -átomo. Temos aplicados essa teoria para o sistema e^+ -He no presente trabalho;

- O capítulo 3 apresenta os resultados e discussões de nossa investigação do sistema e^+ -He [9, 10, 11, 12, 13]. Além dos resultados, os aspectos teóricos do espalhamento e as técnicas numéricas adotadas são também discutidas. O atual status experimental do espalhamento e^+ -He é brevemente discutido. Resultados são comparados com outros trabalhos experimentais e teóricos, quando possível;
- O capítulo 4 é a conclusão.

Capítulo 2

Teoria de Close Coupling

A aproximação de close-coupling tem sido um método padrão para o tratamento de espalhamento a baixa energia (elástico e inelástico) de pósitrons e elétrons por muitos anos. Ele é baseado em uma expansão da função de onda total do sistema em termos de uma soma de produtos de auto-estados do hamiltoniano atômico e funções desconhecidas descrevendo o movimento do projétil. Estes coeficientes de expansão desconhecidos são então determinados como uma solução de um conjunto de equações integro-diferenciais acopladas, cujo número dependerá do número de auto-estados incluídos na expansão. Na prática, todavia, somente uma pequena parte dos mais baixos estados são incluídos gerando um conjunto finito de equações acopladas (daí o nome “close-coupling”). Este procedimento básico foi primeiro proposto por Massey e Mohr [14]. Nos anos 50 e 60 a aproximação de close-coupling foi intensamente testada nos espalhamentos do pósitron e elétron do átomo de hidrogênio [15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22]. Os detalhes específicos da teoria para o espalhamento do elétron (pósitron) do hidrogênio foram desenvolvidos por Percival and Seaton [23] e estendidos, no caso de pósitrons, para incluir formação de pósitrons por Smith [24]. A teoria de close-coupling pertinente ao espalhamento de elétrons por sistemas de metais alcalinos foi primeiro apresentada por Salmona e Seaton [26] e posterior-

mente aplicada por Burke e Taylor [27] no lítium e por Salmona [28] e Moores e Norcross [29] no sódio. Para espalhamento de pósitron de baixa energia de metais alcalinos a aproximação de close-coupling tem sido recentemente usada intensamente e com sucesso [30, 31, 32, 33, 34, 35]. Na presente tese, consideraremos a colisão de pósitron com hélio sob o ponto de vista da aproximação do close-coupling. Uma breve derivação das equações relevantes e da seção de choque, baseada no formalismo apresentado abaixo.

A equação de Schrödinger independente do tempo é dada por,

$$(H - E)\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x}) = 0 \quad (2.1)$$

onde $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x})$ é a função de onda total do sistema. Os vetores de posição dos elétrons atômicos e pósitron incidente são denotados por $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$ and $\mathbf{x}$ respectivamente.

No método de close-coupling, a função de onda total $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x})$ é expandida em termos dos sub-sistemas como se segue,

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x}) = \sum_{\tau} \phi_{\tau}(\mathbf{R}) F_{\tau}(\mathbf{x}) + \sum_{\nu} W_{\nu}(\rho) G_{\nu}(\mathbf{S}) \phi^{+}(\mathbf{J}) \quad (2.2)$$

onde $\phi_{\tau}(\mathbf{R})$ e $W_{\nu}(\rho)$ são as autofunções do positrônio (Ps) onde $\rho = |\mathbf{x} - \mathbf{r}_n|$ é a coordenada relativa de $\mathbf{x}$ e $\mathbf{r}$, $\tau = nlm$ são os números quânticos do alvo atômico e ν corresponde aos números quânticos do átomo Ps. $F_{\tau}(\mathbf{x})$ descreve o movimento do pósitron incidente e $G_{\nu}(\mathbf{S})$ descreve o movimento relativo entre o Ps e o íon residual com $\mathbf{S} = (\mathbf{x} + \mathbf{r}_n)/2$, o centro de massa coordenado para o positrônio. $\phi^{+}(\mathbf{J})$ é a função de onda do íon residual no canal final onde $\mathbf{J}$ muda para $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{n-1}$. Aqui assumimos que o elétron de valência do átomo é o único elétron ativo e o íon positivo do átomo está no estado fundamental.

Daí, a equação de Schrödinger fica,

$$(H - E) \left[\sum_{\tau} \phi_{\tau}(\mathbf{R}) F_{\tau}(\mathbf{x}) + \sum_{\nu} W_{\nu}(\rho) G_{\nu}(\mathbf{S}) \phi^{+}(\mathbf{J}) \right] = 0 \quad (2.3)$$

A função de onda do espalhamento deve satisfazer a seguinte condição assintótica,

$$F_{\tau'}(\mathbf{x}) \sim_{x \rightarrow \infty} e^{ik_n \cdot \mathbf{x}} \delta_{\tau\tau'} + \frac{e^{ik_{n'} x}}{x} f_{\tau'\tau}(\theta, \phi) \quad (2.4)$$

e

$$G_{\nu'}(\mathbf{S}) \sim_{S \rightarrow \infty} \frac{e^{ik_{n'} S}}{S} f_{\nu'\nu}(\theta, \phi) \quad (2.5)$$

onde o estado inicial do átomo alvo é denotado por $\tau(\nu)$. A amplitude de espalhamento $f_{\tau'\tau}(f_{\nu'\nu})$ está relacionado às seções transversais do estado $\tau(\nu)$ para o estado $\tau'(\nu')$.

O hamiltoniano total do sistema no canal inicial pode ser como

$$H_i = -\frac{1}{2m} \nabla_x^2 + V_{int}^{prior} + H_a \quad (2.6)$$

e no canal final

$$H_f = -\frac{1}{2\mu} \nabla_S^2 + V_{int}^{post} + H_{ps} \quad (2.7)$$

com,

$$H_a = -\sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i < j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (2.8)$$

onde, N é o número de elétrons

$$H_{ps} = -\frac{1}{2\mu} \nabla_{\rho}^2 - \frac{1}{\rho}, \quad (2.9)$$

$$V_{int}^{prior} = \frac{Z}{x} - \sum_{i=1}^n \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|} \quad (2.10)$$

e

$$V_{int}^{post} = \frac{Z}{x} - \frac{Z}{r_n} - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_i|}. \quad (2.11)$$

As funções de estado ligado normalizado do hélio, $\phi_\tau(\mathbf{R})$ e $W_\nu(\rho)$ satisfazem as seguintes equações

$$H_a \phi_\tau(\mathbf{R}) = \epsilon_\tau \phi_\tau(\mathbf{R}) \quad (2.12)$$

$$H_{ps} W_\nu(\rho) = \epsilon_\nu W_\nu(\rho) \quad (2.13)$$

onde ϵ_τ e ϵ_ν são as energias de ligação de $\phi_\tau(\mathbf{R})$ e $W_\nu(\rho)$ respectivamente.

As equações de close-coupling são dadas pela projeção da equação Schrödinger para $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x})$ em $\phi_\tau(\mathbf{R})$ e $W_\nu(\rho)\phi^+(\mathbf{J})$ e portanto obtemos

$$\int \phi_\tau^*(\mathbf{R}) (E - H_i) \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x}) d\mathbf{R} = 0 \quad (2.14)$$

e

$$\int W_{\nu'}(\rho) \phi^+(\mathbf{J}) (E - H_f) \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x}) d\rho d\mathbf{J} = 0 \quad (2.15)$$

Substituindo a expressão para a função de onda total, $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x})$ e integrando sobre toda espaço de configuração obtem-se (usando a notação T_x para $-\frac{1}{2m} \nabla_x^2$),

$$\begin{aligned} (E - \epsilon_{\tau'} - T_x) F_{\tau'}(x) &= \sum_{\tau} \int \phi_{\tau'}^*(\mathbf{R}) V_{int}^{prior} \phi_{\tau}(\mathbf{R}) d\mathbf{R} F_{\tau}(x) \\ &+ \sum_{\nu} \int \phi_{\tau'}^*(\mathbf{R}) (H_i - E) \sum_{\nu} W_{\nu}(\rho) G_{\nu}(\mathbf{S}) \phi^+(\mathbf{J}) d\mathbf{R} \\ &\equiv \sum_{\tau} V_{\tau\tau'}^i F_{\tau} + \sum_{\nu} W_{\tau'\nu} G_{\nu} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Similarmente para $G_{\nu}(\mathbf{S})$ temos (usando a notação T_S para $-\frac{1}{2\mu} \nabla_S^2$),

$$\begin{aligned} (E - \epsilon_{\nu'} - T_S) G_{\nu'}(S) &= \sum_{\nu} \int W_{\nu'}^*(\rho) \phi^*(\mathbf{J}) V_{int}^{post} W_{\nu}(\rho) \phi^+(\mathbf{J}) d\rho d\mathbf{J} \\ &+ \sum_{\tau} \int W_{\nu'}^*(\rho) \phi^*(\mathbf{J}) (H_f - E) \phi_{\tau}(\mathbf{R}) F_{\tau}(x) d\rho d\mathbf{J} \\ &\equiv \sum_{\nu} V_{\nu\nu'}^f G_{\nu} + \sum_{\tau} W_{\nu'\tau} F_{\tau} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Portanto temos as seguintes equações integro-diferenciais acopladas:

$$(E - \epsilon_{\tau'} - T_x)F_{\tau'}(x) = \sum_{\tau} V_{\tau\tau'}^i F_{\tau} + \sum_{\nu} W_{\tau'\nu} G_{\nu} \quad (2.18)$$

$$(E - \epsilon_{\nu'} - T_S)G_{\nu'}(S) = \sum_{\tau} V_{\nu\nu'}^f G_{\nu} + \sum_{\nu} W_{\nu'\tau} F_{\tau} \quad (2.19)$$

onde V e W denotam respectivamente os operadores potenciais direto (local) e de rearrangement no espaço de Hilbert. O número de equações acopladas para F_{τ} e G_{ν} depende somente do número de estados ligados dos subsistemas levados em conta.

À parte da resolução das equações integro-diferenciais convencionais, pode-se transformar as equações (2.18) e (2.19) em correspondentes equações integrais acopladas. Estas integrais acopladas podem ser escritas no espaço das configurações ou no espaço de momento. Ghosh e colaboradores [36, 37] têm usado equações integrais acopladas no espaço de momento enquanto que Fraser e colaboradores [38] têm obtido equações no espaço das configurações. O formalismo das equações integrais acopladas no espaço de momento é dado abaixo.

As equações para um approach inicial são (2.18) e (2.19). Seja $F_{\tau'}(\mathbf{x})$, $G_{\nu'}(\mathbf{S})$ com $\tau' = 1, 2, \dots, N$ e $\nu' = 1, 2, \dots, \alpha$ um conjunto particular de soluções de (2.18) e (2.19) que correspondem assintoticamente a uma onda plana com momento incidente $\mathbf{k}$ no estado ligado ϕ_{τ} , junto com ondas esféricas em todos canais abertos. A equação de Lippman-Schwinger satifeita é

$$\begin{aligned} |F_{\tau'}\rangle &= \delta_{\tau\tau'}|\mathbf{k}\rangle + \sum_{\tau''=1}^N \frac{1}{E + i\epsilon - \epsilon_{\tau} - T_x} V_{\tau'\tau''} |F_{\tau''}\rangle \\ &+ \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \frac{1}{E + i\epsilon - \epsilon_{\tau'} - T_x} W_{\nu'\tau''} |G_{\nu''}\rangle \\ &= \delta_{\tau\tau'}|\mathbf{k}\rangle + \sum_{\tau''=1}^N \int d\mathbf{k}' |\mathbf{k}'\rangle \frac{1}{E + i\epsilon - E_1'} \langle \mathbf{k}' | V_{\tau'\tau''} | F_{\tau''} \rangle \\ &+ \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \int d\mathbf{k}' |\mathbf{k}'\rangle \frac{1}{E + i\epsilon - E_1'} \langle \mathbf{k}' | W_{\nu'\tau''} | G_{\nu''} \rangle \end{aligned} \quad (2.20)$$

similarmente temos

$$\begin{aligned}
 |G_{\nu''}\rangle &= \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \int dk' |k'\rangle \frac{1}{E + i\epsilon - E'_3} \langle k' | V_{\nu'\nu''} | G_{\nu''} \rangle \\
 &+ \sum_{\tau''=1}^N \int dk' |k'\rangle \frac{1}{E + i\epsilon - E'_3} \langle k' | W_{\nu'\tau''} | F_{\tau''} \rangle
 \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde fazemos uso da relação de fechamento

$$\int dk' |k'\rangle \langle k'| = 1 \quad (2.22)$$

Portanto, as equações integro-diferenciais (2.18) e (2.19) são transformadas em equações integrais acopladas correspondentes no espaço de momento.

Escrevendo as equações (2.20) e (2.21) temos usado as relações de conservação de energia

$$E_1 = T_x + \epsilon_\tau \quad (2.23)$$

$$E_3 = T_S + \epsilon_\nu \quad (2.24)$$

Aqui a notação 1 e 3 denotam os canais direto e de rearrangement, respectivamente. Agora as equações (2.20) e (2.21) podem ser escritas com normalização própria como

$$\begin{aligned}
 \langle k'\tau' | Y_{11} | k\tau \rangle &= \langle k'\tau' | B_{11} | k\tau \rangle \\
 &+ \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\tau''=1}^N \int dk \frac{\langle k'\tau' | B_{11} | k''\tau'' \rangle \langle k''\tau'' | Y_{11} | k\tau \rangle}{E + i\epsilon - E'_1} \\
 &+ \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \int dk \frac{\langle k'\tau' | B_{13} | k''\nu'' \rangle \langle k''\nu'' | Y_{31} | k\tau \rangle}{E + i\epsilon - E'_3}
 \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned}
 \langle k'\nu' | Y_{31} | k\tau \rangle &= \langle k'\nu' | B_{31} | k\tau \rangle \\
 &+ \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\tau''=1}^N \int dk \frac{\langle k'\nu' | B_{31} | k''\tau'' \rangle \langle k''\tau'' | Y_{11} | k\tau \rangle}{E + i\epsilon - E'_1} \\
 &+ \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \int dk \frac{\langle k'\nu' | B_{33} | k''\nu'' \rangle \langle k''\nu'' | Y_{31} | k\tau \rangle}{E + i\epsilon - E'_3}
 \end{aligned} \quad (2.26)$$

onde, $\langle \mathbf{k}'\tau' | Y_{11} | \mathbf{k}\tau \rangle$ é amplitude para transição do estado ligado $|\tau\rangle$ no canal 1 para o estado ligado $\langle \tau' |$ no canal 1 que é dado por

$$\langle \mathbf{k}'\tau' | Y_{11} | \mathbf{k}\tau \rangle = \sum_{\tau''=1}^N \langle \mathbf{k}' | V_{\tau'\tau''} | F_{\tau''} \rangle + \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \langle \mathbf{k}' | W_{\tau'\nu''} | G_{\nu''} \rangle \quad (2.27)$$

Similarmente, $\langle \mathbf{k}'\nu' | Y_{31} | \mathbf{k}\tau \rangle$ é amplitude para a transição de um estado ligado $|\tau\rangle$ no canal 1 para o estado ligado $\langle \nu' |$ no canal 3

$$\langle \mathbf{k}'\nu' | Y_{31} | \mathbf{k}\tau \rangle = \sum_{\tau''=1}^N \langle \mathbf{k}' | W_{\nu'\tau''} | F_{\tau''} \rangle + \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \langle \mathbf{k}' | V_{\nu'\nu''} | G_{\nu''} \rangle. \quad (2.28)$$

As correspondentes amplitudes de Born são denotadas pelos elementos de matriz de B. Assim,

$$\langle \mathbf{k}'\tau' | B_{11} | \mathbf{k}\tau \rangle = \langle \mathbf{k}' | V_{\tau\tau'} | \mathbf{k} \rangle \quad (2.29)$$

$$\langle \mathbf{k}'\nu' | B_{31} | \mathbf{k}\tau \rangle = \langle \mathbf{k}' | W_{\nu'\tau} | \mathbf{k} \rangle \quad (2.30)$$

e posteriormente,

$$\langle \mathbf{k}'\tau' | B_{13} | \mathbf{k}\nu \rangle = \langle \mathbf{k}' | W_{\tau'\nu} | \mathbf{k} \rangle \quad (2.31)$$

$$\langle \mathbf{k}'\nu' | B_{33} | \mathbf{k}\nu \rangle = \langle \mathbf{k}' | W_{\nu'\nu} | \mathbf{k} \rangle \quad (2.32)$$

As equações (2.25) e (2.26) são as equações integrais desejadas na aproximação de close-coupling no espaço de momento tridimensional. Estas equações de close-coupling tridimensionais podem ser reduzidas a um conjunto de equações integrais unidimensionais depois de efetuar a *análise de onda parcial* para as equações integrais

A relação entre a amplitude de transição e a amplitude de espalhamento $f_{\beta\alpha}$ é dada por

$$f_{\beta\alpha}(\mathbf{k}'\tau'; \mathbf{k}\tau) = -\frac{\mu_{\beta}}{2\pi} \langle \mathbf{k}'\tau' | Y_{\beta\alpha} | \mathbf{k}\tau \rangle \quad (2.33)$$

onde μ_β é a massa reduzida do sistema no canal final. Daí temos

$$\begin{aligned}
 f_{11}(\mathbf{k}'\tau'; \mathbf{k}\tau) &= f_{11}^B(\mathbf{k}'\tau'; \mathbf{k}\tau) \\
 &- \frac{1}{4\pi^2\mu} \sum_{\tau''=1}^N \int d\mathbf{k}'' \frac{f_{11}^B(\mathbf{k}'\tau'; \mathbf{k}''\tau'') f_{11}(\mathbf{k}''\tau''; \mathbf{k}\tau)}{E + i\epsilon - E_1''} \\
 &- \frac{1}{4\pi^2\mu} \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \int d\mathbf{k}'' \frac{f_{13}^B(\mathbf{k}'\nu'; \mathbf{k}''\nu'') f_{31}(\mathbf{k}''\nu''; \mathbf{k}\nu)}{E + i\epsilon - E_3''}
 \end{aligned} \quad (2.34)$$

e

$$\begin{aligned}
 f_{31}(\mathbf{k}'\nu'; \mathbf{k}\tau) &= f_{31}^B(\mathbf{k}'\nu'; \mathbf{k}\tau) \\
 &- \frac{1}{4\pi^2\mu} \sum_{\tau''=1}^N \int d\mathbf{k}'' \frac{f_{31}^B(\mathbf{k}'\nu'; \mathbf{k}''\tau'') f_{11}(\mathbf{k}''\tau''; \mathbf{k}\tau)}{E + i\epsilon - E_1''} \\
 &- \frac{1}{4\pi^2\mu} \sum_{\nu''=1}^{\alpha} \int d\mathbf{k}'' \frac{f_{13}^B(\mathbf{k}'\nu'; \mathbf{k}''\nu'') f_{31}(\mathbf{k}''\nu''; \mathbf{k}\nu)}{E + i\epsilon - E_3''}
 \end{aligned} \quad (2.35)$$

As duas equações acima de f_{11} e f_{31} podem ser conveniente escrita como a

$$f_{\beta\alpha}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f_{\beta\alpha}^B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - \frac{1}{4\pi^2\mu_\gamma} \sum_{\gamma} \int d\mathbf{k}'' \frac{f_{\beta,\gamma}^B(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') f_{\gamma,\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k})}{S - E_\gamma''} \quad (2.36)$$

onde $S = E + i$. Aqui $f_{\beta\alpha}$ é amplitude de espalhamento para transição do canal α para o canal β , $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$ são os momentos relativos relevantes nestes canais μ_γ é a massa reduzida no canal γ , $f_{\beta,\gamma}^B$ é amplitude de Born correspondente.

No método de ondas parciais as amplitudes de espalhamento para a transição do estado inicial $|lm\rangle$ ao estado final $\langle l'm'|$ são expandidas em termos dos harmônicos esféricos na representação dos estados acoplados e são expressos como se segue:

$$\begin{aligned}
 f_{\beta\alpha}(n'l'L'\mathbf{k}', nlL\mathbf{k}) &= (kk')^{-1/2} \sum_J \sum_M \sum_{M'_L} \sum_{M_L} \sum_L \sum_{L'} \langle L'l', M_L, m' | JM \rangle Y_{L'M'_L}^*(\hat{\mathbf{k}}'') \\
 &\times T_{\beta\alpha}^J(n'l'L'\mathbf{k}', nlL\mathbf{k}) \langle Ll, M_L m | JM \rangle Y_{LM_L}(\hat{\mathbf{k}})
 \end{aligned} \quad (2.37)$$

A correspondente amplitude de Born pode ser escrita como

$$f_{\beta\alpha}^B(n'l'L'\mathbf{k}', nlL\mathbf{k}) = (kk')^{-1/2} \sum_J \sum_M \sum_{M'_L} \sum_{M_L} \sum_L \sum_{L'} \langle L'l', M_L, m' | JM \rangle Y_{L'M'_L}^*(\hat{\mathbf{k}}'')$$

$$\times B_{\beta\alpha}^J(n'l'L'k', nlLk)\langle Ll, M_L m | JM \rangle Y_{LM_L}(\hat{\mathbf{k}}) \quad (2.38)$$

onde L e M_L são os momentos angulares orbital e a projeção do estado incidente J é o momento angular orbital do sistema com componente z M . J é chamado o *bom número quântico* dos sistemas. $\langle Ll, M_L m | JM \rangle$ é o coeficiente de Clebsch-Gordan usual.

Usando forma de onda parcial de $f_{\beta\alpha}$ e $f_{\beta\alpha}^B$ na equação (2.36), podemos ter

$$T^J(\tau'k', \tau k) = B^J(\tau'k', \tau k) + \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\gamma} \int k'' dk'' \frac{B_{\beta\gamma}^J(\tau'k', \tau''k'') T_{\gamma\alpha}^J(\tau'k', \tau''k'')}{(k''^2 - k_{\gamma}^2 - i\epsilon)} \quad (2.39)$$

Aqui τ representa o número quântico coletivo (n, l, m) , n sendo o número quântico principal.

Tomando as equações acima temos usado as seguintes relações:

$$\int Y_{L'M_L'}(k') Y_{LM_L}(k) dk' = \delta_{L'L} \delta_{M_L'M_L}, \quad (2.40)$$

$$\sum_{M_L''} \langle L''l'', M_L''m'' | J'M \rangle \langle L''l'', M_L''m'' | JM \rangle = \delta_{J'J} \quad (2.41)$$

e

$$\begin{aligned} S - E'' &= E + i\epsilon - E'' \\ &= -\frac{1}{2}(k''^2 - k_{n''}^2 - i\epsilon). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Aqui, os $B_{\beta\alpha}^J$'s são as projeções das ondas parciais do amplitude de espalhamento de Born de primeira ordem para a transição do canal α para β e serão usado como *input* para resolver a equação integral acoplada (2.39) numericamente a fim de obter a amplitude de espalhamento desconhecida $T_{\beta\alpha}^J$. $B_{\beta\alpha}^J$ é a média sobre todos os valores de M e pode ser definido como,

$$\begin{aligned} B_{\beta\alpha}^J(k'\tau'; k\tau) &= \frac{(kk')^{1/2}}{(2J+1)} \sum_M \sum_{M_L'} \sum_{M_L} \sum_m \sum_{m'} \langle L'l', M_L', m' | JM \rangle \langle Ll, M_L m | JM \rangle \\ &\times \int dk dk' Y_{L'M_L'}^*(f\hat{k}') Y_{LM_L}(\hat{\mathbf{k}}) f_{\beta\alpha}^B(\mathbf{k}'\tau'; \mathbf{k}\tau) \end{aligned} \quad (2.43)$$

A equação unidimensional acoplada é então resolvida usando o método de inversão de matrizes.

A seção diferencial de choque no canal direto do estado inicial $\{nlm\}$ ao estado final $\{n'l'm'\}$ é dada por,

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{\text{dir}}}{d\omega} &= \frac{k'}{k} |f_{11}(n'l'm'k'; nlmk)|^2 \\ &= \frac{k'}{k} \left| \sum_J \frac{1}{\sqrt{k'k}} (2J+1) T_{11}^J(n'l'm'k'; nlmk) \right|^2\end{aligned}\quad (2.44)$$

A correspondente seção diferencial de choque no canal de captura é

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{\text{Ps}}}{d\omega} &= \frac{k'}{2k} |f_{21}(n'l'm'k'; nlmk)|^2 \\ &= \frac{k'}{2k} \left| \sum_J \frac{1}{\sqrt{k'k}} (2J+1) T_{21}^J(n'l'm'k'; nlmk) \right|^2\end{aligned}\quad (2.45)$$

As seções transversais totais são dadas por

$$\sigma_{\text{dir}} = \frac{1}{k^2} \sum_J \frac{2J+1}{4\pi} |T_{11}^J(n'l'm'k'; nlmk)|^2 \quad (2.46)$$

$$\sigma_{\text{Ps}} = \frac{1}{2k^2} \sum_J \frac{2J+1}{4\pi} |T_{21}^J(n'l'm'k'; nlmk)|^2 \quad (2.47)$$

O deslocamento de fase do espalhamento para o canal elástico é dado por,

$$\delta = \frac{1}{2} \tan^{-1} \left[\frac{\text{Re}(T_{11}^J)}{2\pi - \text{Im}(T_{11}^J)} \right] \quad (2.48)$$

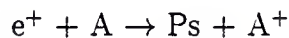
onde T_{11}^J elemento de matriz t on-shell para o espalhamento elástico.

Capítulo 3

Espalhamento Pósitron-Hélio

3.1 Introdução

Por um longo tempo, a física de colisões de pósitron foi teórica e de interesse puramente acadêmico. Todavia, as últimas duas décadas tem testemunhado um significativo progresso na pesquisa experimental de pósitron-átomo principalmente pela descoberta e gradual melhoria na intensidade de feixes de pósitrons monoenergético e como uma consequência, as investigações teóricas tiveram um renovado estímulo. Uma ampla revisão dos desenvolvimentos experimentais recentes tem sido dada por Charlton and Laricchia [39, 40, 41, 42] e Raith [7]. Quando feixes de pósitrons foram desenvolvidos, os feixes existentes até então eram tão lentos que somente a seção total de espalhamento podia ser medida, mas agora algumas seções parciais e diferenciais também podem ser medidas. É mesmo possível produzir feixes de positrônio usando a processo de troca de carga



onde A é algum alvo atômico conveniente, e o espalhamento de positrônio por vários átomos e moléculas está começando a ser investigado experimentalmente [40, 43, 44].

Um grande número de medidas tem sido feitas recentemente em espalhamentos de gás inerte de pósitron, pósitron-hélio sendo um dos sistemas favoritos. Isto serve como estímulo para investigar espalhamento pósitron-hélio a baixas e médias energias. A present tese se preocupa com a investigação quântica teórica do problema de colisão do pósitron pelo átomo de hélio no intervalo de energia baixo e médio. Temos nos restringido a estrutura quântica não relativística que é suficiente no intervalo de energia considerado.

Pósitrons positivamente carregados são sensíveis sondas para alvos atômicos neutros e oferece um teste diferente de nossa habilidade de entender interações atômicas que elétrons. Feixe de positrônio é empregado como uma sonda em diferentes áreas de estudo. Para alinhar o feixe de positrônio o conhecimento de seção de choque diferencial de formação de positrônio em estados excitados em colisões pósitron-átomo é essencial. A situação demanda mais confiança nas previsões teóricas para canais de captura em estados fundamental e excitado a energias baixa e intermediária. Assim, o estudo da formação do pósitron, além da usual excitação do alvo no espalhamento de pósitron por átomos leves, é de interesse para os teóricos. Mas, do ponto de vista teórico, o que realmente faz ser diferente o espalhamento pósitron do espalhamento elétron-átomo é a existência desse canal de formação do pósitron. Embora um canal de rearrangement exista também no espalhamento elétron-átomo, isto é, troca de elétron, há somente um centro natural neste problema — o núcleo atômico. A formação do positrônio é um problema de dois centros, o primeiro sendo o núcleo e o segundo o centro de massa do positrônio. É este problema de dois centros que faz a dificuldade do tratamento teórico e por causa dessa dificuldade o espalhamento pósitron-átomo incluindo o canal de rearrangement tem sido explo-

rado muito menos que o espalhamento elétron-átomo. Todavia, se os ingredientes básicos da dinâmica para a descrição de tal processo seja identificado em um contexto simples, tal com no espalhamento pósitron-hélio (e^+ -He), pode-se estender a análise a contexto mais complexos. O sistema pósitron-hélio é um dos mais simples, onde o seção de choque total de captura para o Ps-átomo é comparável às seções elástica e inelástica. Além do mais, este sistema tem todas as características complicadas de um sistema de muito corpos. Como o hélio é um alvo atômico estável, existem muitas medidas experimentais [45, 46, 47] de excitação e formação do positrônio [48, 49, 50, 51, 52, 53] em espalhamento e^+ -He. Em contraste, por causa de dificuldade em obter um alvo de hidrogênio estável, (pois o átomo de hidrogênio facilmente forma molécula de hidrogênio) a atividade experimental em espalhamentos e^+ -H é limitada. Uma breve descrição da situação contemporânea dos experimentos no sistema pósitron-hélio pode ser bastante apropriada no presente contexto.

O progresso experimental no espalhamento pósitron-átomo tem sido periodica e amplamente revisto por muitos pesquisadores [54, 55, 39, 42, 7] de tempos em tempos. Existe um grande número de grupos [54, 56, 57] que tem medidos seções de choque em espalhamentos e^+ -He. Têm havido muitos experimentos [58, 59, 60, 61] usando vários métodos para medir seções de choque para espalhamento pósitron-átomo, especialmente para e^+ -Ar, e^+ -Ne etc. Todavia, medidas de seção de choque diferencial ainda não estão disponíveis no caso de espalhamento e^+ -He.

Estudos da excitação pelo impacto de e^+ de átomos têm sido, predominantemente, composto por trabalhos teóricos em alvos H e He. Os únicos trabalhos experimentais de átomos em excitação de hélio foram feitos por Coleman e colaboradores [47, 50] e Sueoka e colaboradores [45, 62]. Ambos os grupos têm analisado

o espectro do tempo de vôo (time-of-flight ou TOF) do pósitron espalhado para obter as seções de choque. Aqui, o e^+ guiado por um campo magnético uniforme tipicamente maior que 50G, passa através de uma pequena célula de espalhamento. Desta maneira, e sobre um intervalo restrito da energia de impacto, e^+ espalha-se e a perda de energia e/ou de deflexão angular seria separada do feixe não espalhado por virtude de seu atraso na chegada ao detector. Coleman e Hutton [50] mostraram que em energias ≤ 10 eV acima do primeiro threshold (20.6 eV para 1^1S-2^1S transição), o espectro TOF dos pósitrons espalhados são dominados por um bem definido pico correspondente a menor energia em 20.6 eV com espalhamento de pequenos ângulos na direção positiva. Mostraram então essa característica até o ângulo de espalhamento de 60° e portanto, extraindo a seção de choque integrada, atribuída inteiramente a transição 1^1S-2^1S , até 10 eV acima do threshold. Num refinamento posterior desse método, no qual um elemento adicional retardante foi usado para separar a excitação dos eventos de ionização, Suoeka [62] estendeu o intervalo das energias de impacto até 120 eV. Posteriormente, Suoeka [45] refez medidas usando um novo aparato e reconheceu efeitos do duplo espalhamento de e^+ . Suoeka tem atribuído a seção de choque para uma combinação das transições 1^1S-2^1S e 1^1S-2^1P

O método TOF, todavia, não é capaz de distinguir entre perda de energia e deflexão angular e como uma consequência não pode unicamente identificar transições particulares. Além disso, há um campo magnético dependente da aceitação angular máxima, o qual muda como uma função da energia de impacto, acima da qual qualquer pósitron espalhado inelásticamente se espiralá num raio que pode impedir sua detecção. Comparações com a teoria pode portanto não estar em bom acordo com

todas as regiões de energia.

A seção de choque de formação do positrônio (σ_{Ps}), tem sido medida por muitos grupos. A primeira reportagem direta da determinação da dependência na energia σ_{Ps} para He, até aproximadamente 12 eV acima do threshold, foi obtida em 1980 por Charlton et al [63] da University College of London (UCL) de uma medida de coincidentes 3γ resultante da auto-aniquilação do o-Ps. Três anos depois, após algumas melhorias, ele reportou [64] valores absolutos de σ_{Ps} em todos gases inertes até energias de 150 eV. Contemporaneamente, Fornari et al do grupo Arlington[51] reportou a determinação independente de σ_{Ps} do He até 80 eV. Seus resultados estavam em forte desacordo com os de UCL, sendo muito maior que um fator quatro para certas energias e faltando as estruturas presentes nas medidas de UCL. O estudo de Fornari et al foi posteriormente estendido a altas energias (até 250 eV) por Diana e colaboradores[53], onde algumas evidências de estrutura em σ_{Ps} foram encontradas. Em 1985 Charlton et al[55] mediram novamente σ_{Ps} , retificando os erros sistemáticos presentes em seus experimentos iniciais e encontrou melhor acordo com o grupo de Arlington. A terceira determinação de σ_{Ps} no He foi feita por Fromme et al [52] do grupo Bielefeld em 1986. Eles mediram tanto o número total de íons quanto o de coincidências de íons e^+ , e determinaram tanto σ_{Ps} quanto σ_i (ionização) simultaneamente. Seus resultados apoiaram dos resultados de He de Fornari et al abaixo de 80 eV, mas não confirmaram as estruturas notadas por Diana et al para mais altas energias. Muito recentemente Laricchia e seus colaboradores [49, 44] em UCL mediram σ_{Ps} a baixas energias. Eles investigaram o comportamento próximo aos threshold de seção de choque de formação do Ps e suas conexões com outros canais de espalhamento. A técnica experimental adotada é baseada no número total

de formação de íons. Medidas detalhadas de σ_{Ps} foram feitas pela detecção de íons produzidos por um feixe passando através de uma célula de gás que incorpora um íon extrator[65].

Além dos trabalhos experimentais, há numerosos estudos teóricos do espalhamento pósitron-hélio usando vários métodos teóricos, tais como, a aproximação de de fase aleatória[67], a técnica de trajetória clássica de Monte Carlo(CTMC) [66], aproximação de onda distorcida[68, 69, 70] , o método variacional [71, 72, 73, 74], a aproximação de close-coupling (CCA) [75, 76, 77, 78, 79]. Isso nos permite comparar diferentes tratamentos teóricos com experimentos e avaliar seu sucesso. De todos os esquemas de aproximação mencionados acima, somente o CCA inclui o efeito do acoplamento entre vários estados do alvo. O CCA é um dos métodos *ab initio* que fornece uma estrutura para o estudo do espalhamento pósitron-átomo incluindo os canais de formação Ps. Neste método a função de onda total do sistema é expandida em termos dos auto-estados dos subsistemas ligados. A estrutura da CCA toma os canais elástico, inelástico e de rearrangement de uma maneira unificada e pode, em princípio, ser melhorado pela inclusão no conjunto de base. Na prática, todavia, os mais baixos estados ligados são considerados pela computação real.

Na presente tese, investigamos o espalhamento de pósitron hélio em energia média na estrutura CCA usando diferentes combinações das seguintes funções base: He(1s1s), He(1s2s), He(1s2p), He(1s3s), He(1s3p), Ps(1s), Ps(2s) e Ps(2p) onde Ps representa o positrônio. Temos nos restringido ao intervalo de energia 25-300 eV para o cálculo da seção de choque, embora temos medido o deslocamento de fase abaixo de 25 eV a fim de de testar o modelo. Além da seção de choque elástica, temos calculado seções de choque inelásticas para os estados He(1s2s), He(1s2p),

He(1s3s) e He(1s3p) e seção de choque de captura para os estados Ps(1s), Ps(2s) e Ps(2p).

Assim, a motivação do presente estudo é o processo de formação do positrônio no sistema pósitron-hélio e ver os efeitos do canal de formação Ps no processo elástico e de excitação. Especificamente, estudaremos a seção total da formação de positrônio nos estados fundamental e excitado. Também estudaremos os processos de excitação e elástico na ausência e presença do canal de formação do Ps ou de rearrangement. Outra forte motivação ao estudo é a procura por ressonâncias dos sistemas pósitron-hidrogênio observado por Higgins e Burke [81], Hewitt et al. [82] e Sarkar et al. [83].

3.2 Teoria

No capítulo 2 temos dado os detalhes do modelo de close-coupling e também temos obtido a equação integral para amplitude de espalhamento no espaço de momento. A análise de ondas parciais, auxilia na transformação da equação de onda tridimensional para unidimensional. Aqui não repetimos os mesmos cálculos e damos a expressão final para a amplitude de espalhamento a ser resolvida.

O hamiltoniano para o sistema pósitron-hélio (em unidades atômicas) no canal inicial é dado por

$$H_i = -\frac{1}{2}\nabla_3^2 - H_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - V_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (3.1)$$

onde H_a é o hamiltoniano do hélio alvo e é dado por

$$H_a = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (3.2)$$

and the interaction V_i is

$$V_i = \frac{2}{r_3} - \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}}. \quad (3.3)$$

Aqui, $\mathbf{r}_i (i = 1, 2)$ são as coordenadas dos elétrons atômicos e $\mathbf{r}_3$ é a coordenada do pósitron

A função de onda do átomo de hélio $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ satisfaz a equação de Schrödinger,

$$H_a \psi_{nlm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \epsilon_{nl} \psi_{nlm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.4)$$

onde ϵ_{nl} é a auto-energia dos estados fundamental e excitado do átomo de hélio.

Se o positrônio é formado depois da colisão, o hamiltoniano total no canal final é dado por,

$$H_f = -\frac{1}{2\mu} \nabla_{R_{23}}^2 + H_{\text{He}^+} + H_{\text{Ps}}(\mathbf{r}_{23}) + V_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \quad (3.5)$$

com

$$H_{\text{He}^+}(\mathbf{r}_1) = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{2}{r_1}, \quad (3.6)$$

$$H_{\text{Ps}}(\mathbf{r}_{23}) = -\frac{1}{2\mu} \nabla_{\text{Ps}}^2 - \frac{1}{r_{23}}, \quad (3.7)$$

e

$$V_f = \frac{2}{r_3} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{13}} \quad (3.8)$$

onde $R_{23} = \frac{\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3}{2}$, $-\frac{1}{2\mu} \nabla_{R_{23}}^2$ é a energia cinética do positrônio com respeito ao centro de massa do sistema, H_{He^+} é o hamiltoniano do íon hélio e H_{Ps} é o hamiltoniano do positrônio tendo coordenada r_{23} . O hamiltoniano do canal final toma esta forma particular o elétron do alvo com coordenada $\mathbf{r}_2$ é capturado pelo pósitron. Todavia, o positrônio pode ser formado com igual probabilidade capturando o outro elétron com coordenada $\mathbf{r}_1$.

As funções de onda do íon do hélio e do positrônio satisfazem as respectivas equações de Schrödinger,

$$H_{\text{He}^+}(\mathbf{r}_1)\phi_{\text{He}^+}(\mathbf{r}_1) = \epsilon_{nl}^+(\mathbf{r}_1)\phi_{\text{He}^+}(\mathbf{r}_1) \quad (3.9)$$

e

$$H_{\text{Ps}}(\mathbf{r}_{23})\eta(\mathbf{r}_{23}) = \epsilon_{\nu L}(\mathbf{r}_1)\eta(\mathbf{r}_{23}) \quad (3.10)$$

No esquema CCA, a função de onda total para o sistema pósitron-hélio é escrita como

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \sum_{\nu} \psi_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) F_{\nu}(\mathbf{r}_3) + (1 + P_{12}) \sum_{\kappa} \Phi_{1s}^+(\mathbf{r}_1) \eta_{\kappa}(r_{23}) G_{\kappa}(\mathbf{R}_{23}) \quad (3.11)$$

com $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, $\mathbf{R}_{ij} = |\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j|/2$, Aqui, $\psi_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ e $\eta_{\kappa}(\mathbf{r}_{ij})$ são os auto-estados ν th e κ th dos átomos de hélio e Ps, respectivamente. A função de onda do estado fundamental do íon hélio é $\phi_{1s}^+(\mathbf{r}_i)$, ($i = 1, 2$); $F_{\nu}(\mathbf{r}_3)$ descreve o movimento do pósitron incidente e $G_{\nu}(\mathbf{R}_{ij})$ descreve o movimento relativo entre o átomo Ps e o íon hélio. P_{12} é o operador de troca de elétron.

A função de onda $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ satisfaz a equação de Schrödinger,

$$(H - E)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = 0 \quad (3.12)$$

onde E é a energia total do sistema.

A equação integral acoplada unidimensional da amplitude de espalhamento é dada por,

$$\begin{aligned} T_{11}^J(\tau'k'; \tau k) &= B_{11}^J(\tau'k'; \tau k) - \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\nu} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{\nu}^2 - i\epsilon} B_{11}^J(\tau'k'; \tau''k'') T_{11}^J(\tau''k''; \tau k) \\ &- \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\kappa} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{\kappa}^2 - i\epsilon} B_{12}^J(\tau'k'; \omega''k'') T_{21}^J(\omega''k''; \tau k), \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned}
T_{21}^J(\omega'k'; \tau k) &= B_{21}^J(\omega'k'; \tau k) - \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\kappa} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{\kappa}^2 - i\epsilon} B_{22}^J(\omega'k'; \omega''k'') T_{21}^J(\omega''k''; \tau k) \\
&- \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\nu} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{\nu}^2 - i\epsilon} B_{21}^J(\omega'k'; \tau''k'') T_{11}^J(\tau''k''; \tau k).
\end{aligned} \quad (3.14)$$

Aqui $\tau(nlL)$ representa todos os números quânticos no canal direto e $\omega(\nu lL)$ o mesmo para o canal de rearrangement. As equações (3.13) e (3.14) com a presente expansão na base dos oito estados $\{\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s, 2p)\}$ vão gerar até onze equações integrais acopladas. Um exemplo da forma explícita das equações são dadas no apêndice 1. Para o bom número quântico $J = 0$ temos que resolver as oito equações integrais acopladas e para valores diferentes de zero de J temos que resolver onze equações.

Os elementos de matriz de Born para os canais direto (elástico e excitação) e de rearrangement (formação de positrônio) para o sistema e^+ -He são respectivamente dados por,

$$\begin{aligned}
f_{11}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) &= -\frac{1}{2\pi} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3} \Psi_{nlm}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \left(\frac{2}{r_3} - \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}} \right) \\
&\times \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3
\end{aligned} \quad (3.15)$$

e

$$\begin{aligned}
f_{21}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) &= -\frac{1}{\pi} \int e^{i\rho \cdot \mathbf{r}_3} e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_2} \omega^*(\mathbf{r}_{23}) \phi_{nlm}^*(\mathbf{r}_1) \left(\frac{2}{r_3} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{13}} \right) \\
&\times \Psi_{nlm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3
\end{aligned} \quad (3.16)$$

Nas equações acima $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ e $\rho = \mathbf{k}_i - \frac{1}{2}\mathbf{k}_f$.

3.2.1 Função de onda do hélio:

No presente cálculo as seguintes funções de onda do hélio têm sido usadas:

$$\phi_{1s1s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = u_{1s}(\mathbf{r}_1) u_{1s}(\mathbf{r}_2), \quad (3.17)$$

onde o orbital atômico u_{1s} é dado por

$$u_{1s}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^2 a_i \exp(\lambda_i r) Y_{00}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.18)$$

com $\lambda_1 = 1.41$, $\lambda_2 = 2.61$, $a_1 = 2.60505$ and $a_2 = 2.08144$;

$$\phi_{1s2s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N[u_{1s}^+(\mathbf{r}_1)v_{2s}(\mathbf{r}_2) + u_{1s}^+(\mathbf{r}_2)v_{2s}(\mathbf{r}_1)], \quad (3.19)$$

onde,

$$u_{1s}^+(\mathbf{r}) = \left(\frac{z^3}{\pi}\right)^{1/2} \exp(-Zr), \quad Z = 2.0 \quad (3.20)$$

e

$$v_{2s}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^2 b_i r^{i-1} \exp(\beta_i r) Y_{00}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.21)$$

com $b_1 = 1.0$, $b_2 = -0.432784$, $\beta_1 = 0.865$, $\beta_2 = 0.522$ e $N = 0.1966184$;

$$\phi_{1s2p}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N[u_{1s}^+(\mathbf{r}_1)v_{2p}(\mathbf{r}_2) + u_{1s}^+(\mathbf{r}_2)v_{2p}(\mathbf{r}_1)], \quad (3.22)$$

onde,

$$v_{2p}(\mathbf{r}) = r \exp\left(\frac{1}{2}Z_0 r\right) Y_{1m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.23)$$

com $Z_0 = 0.97$ and $N' = (Z_0^5/6\pi)^{1/2}$;

$$\phi_{1s3s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{N}{\sqrt{2}} [u_{1s}^+(\mathbf{r}_1)v_{3s}(\mathbf{r}_2) + u_{1s}^+(\mathbf{r}_2)v_{3s}(\mathbf{r}_1)], \quad (3.24)$$

$$v_{3s}(\mathbf{r}) = (c_1 - c_2 r + c_3 r^2) \exp(\alpha r) Y_{00}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.25)$$

com $c_1 = 0.2998203$, $c_2 = 0.2631616$, $c_3 = 0.03434894$, $\alpha = 0.360$ e $N = 0.9994285$;

$$\phi_{1s3p}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N[u_{1s}^+(\mathbf{r}_1)v_{3p}(\mathbf{r}_2) + u_{1s}^+(\mathbf{r}_2)v_{3p}(\mathbf{r}_1)], \quad (3.26)$$

onde,

$$v_{3p}(\mathbf{r}) = (d_1 - d_2 r) r \exp(\xi r) Y_{1m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.27)$$

com $b_1 = 0.1160708$, $b_2 = 0.01875705$ and $\xi = 0.326$.

3.2.2 Função de onda do positrônio:

As funções de onda positrônica exatas usadas nos cálculos são as seguintes:

$$\eta_{1s}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \exp(-\alpha\rho) \quad (3.28)$$

com $\alpha = 0.5$;

$$\eta_{2s}(\rho) = \left(1 + \frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \alpha}\right) \frac{1}{\sqrt{8}} c_{Ps} \exp(-\alpha\rho) \quad (3.29)$$

com $\alpha = 0.25$ and $c_{Ps} = 1/\sqrt{8\pi}$;

$$\eta_{2p}(\rho) = \frac{1}{16\sqrt{3}} \rho \exp(-\alpha\rho) Y_{1m}(\hat{\rho}) \quad (3.30)$$

com $\alpha = 0.25$.

3.3 Técnica Numérica:

As equações integrais acopladas do espalhamento tipo Lippman-Schwinger da CCA são

$$T_{\beta\alpha}^J(k', k) = B_{\beta\alpha}^J(k', k) - \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\nu} \int k'' dk'' \frac{B_{\beta\nu}^J(k', k'') T_{\nu\alpha}^J(k'', k)}{k''^2 - k_{\nu}^2 - i\epsilon}, \quad (3.31)$$

onde $T_{\beta\alpha}^J(k', k)$ é a amplitude de espalhamento de onda parcial para a transição do canal α para β , $B_{\beta\alpha}^J(k', k)$ é a projeção de onda parcial do termo de Born da CCA, e J o momento angular total. A resolução desta equação requer a expressão para B^J 's para diferentes transições.

Para resolver o termo de pólo na equação (3.31) usamos a seguinte identidade:

$$\frac{1}{k''^2 - k_{\nu}^2 - i\epsilon} = \frac{\mathcal{P}}{k''^2 - k_{\nu}^2} + i\pi\delta(k''^2 - k_{\nu}^2) \quad (3.32)$$

onde o símbolo $\mathcal{P}$ denota que a prescrição do valor principal é para ser usada na resolução da integral singular sobre a função de Green do espaço de momento. A

equação (3.32) separa a função livre de Green nas suas partes real e imaginária. Usando o método da quadratura de Gauss convertemos as integrais acopladas em um conjunto de equações algébricas simultâneas que têm sido resolvida por inversão de matriz. Para calcular o termo do valor principal quebramos a integral como se segue

$$\int_0^\infty = \int_0^{2k_\nu} + \int_{2k_\nu}^\infty \quad (3.33)$$

e tomamos os pontos de integração simetricamente dos lados da singularidade.

Pelo acréscimo do número de pontos gaussianos temos testado a convergência da amplitude. O uso de números pares de pontos gaussianos no intervalo $0 - 2k_\nu$ ratifica o fato que o limite tem sido apropriadamente tomado. Em nossos cálculos reais, temos tomado 36 e 14 pontos para o intervalo $0 - 2k_\nu$ e $2k_\nu - \infty$, respectivamente.

Temos desenvolvido o código em Fortran que pode funcionar com qualquer conjunto de bases contendo de um até oito estados nas bases de expansão e é executável em diferentes regiões de energia (abaixo do threshold de formação de Ps, região de gap de Öre e acima do threshold de excitação). Temos usado o programa para a região de energia de 0-300 eV. As funções de onda do hélio usadas nos cálculos tomadas da Ref. [85]. Das diferentes funções de onda do estado fundamental apresentadas temos usada a dada pelo equação (17). Funções de onda analíticas exatas foram usadas para os estados de Ps. As formas explícitas das funções de onda forma anteriormente mencionadas. Com estas funções de onda o threshold de formação do Ps(1s) e Ps(2s,2p) no presente modelo atinge 16.64 eV e 21.74 eV, respectivamente. Os thresholds de excitação inelástica estão em 19.48 eV [He(1s2s)], 20.11 eV [He(1s2p)], 21.78 eV [He(1s3s)], and 21.95 eV [He(1s3p)].

3.4 Resultados e Discussões

Nosso código numérico permite investigar a elástico, excitação do alvo e formação do positrônio nos estados fundamental e excitado ($n=2$ e 3) no espalhamento do pósitron-hélio. Usamos aqui um conjunto de bases de oito estados com cinco estados do alvo e três do positrônio. Mais especificamente estudamos o sistema e^+ -He numa ordem sistemática gradualmente crescendo o número de estados no conjunto das bases. Os diferentes conjuntos de bases são os seguintes:

- (A) $\text{He}(1s1s)$
- (B) $\text{He}(1s1s, 1s2s)$
- (C) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p)$
- (D) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s)$
- (E) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p)$
- (F) $\text{He}(1s1s) + \text{Ps}(1s)$
- (G) $\text{He}(1s1s) + \text{Ps}(1s, 2s)$
- (H) $\text{He}(1s1s, 1s2s) + \text{Ps}(1s)$
- (I) $\text{He}(1s1s, 1s2s) + \text{Ps}(1s, 2s)$
- (J) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p) + \text{Ps}(1s)$
- (K) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p) + \text{Ps}(1s, 2s)$
- (L) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s)$
- (M) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s)$
- (N) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s, 2p)$

As razões principais para a realização dos cálculos numéricos com estes conjuntos

de bases são duas. A primeira é que se pode testar a convergência do esquema CCA com o acréscimo do número de estados das bases no conjunto de bases pela comparação dos deslocamentos de fase a baixas energias com os deslocamentos de fase variacionais exatas. Pode-se também estudar a importância dos vários estados na obtenção do resultado convergida. A segunda é que se pode estudar o efeito da inclusão do canal Ps na seção de choque e também em outros canais do alvo. Apresentamos os resultados de nosso estudo nas subseções seguintes.

3.4.1 Deslocamento de fase abaixo do threshold de formação de Ps

Como o estudo dos deslocamentos de fase do espalhamento elástico a baixa energia fornece um dos mais elaborados teste para o modelo, apresentamos nas figs. 1-3 os deslocamentos de fase elásticos de $e^+ + \text{He}$ em ondas S, P e D para diferentes conjuntos de bases juntamente com os resultados variacionais para comparação. Vê-se que a convergência é lenta na CCA. Todavia, a inclusão dos canais de formação de Ps aumenta a convergência. A tendência geral dos deslocamentos de fase da CCA do espalhamento elástico de $e^+ - \text{He}$ é bem parecido ao do espalhamento $e^+ - \text{H}$ embora os detalhes quantitativos sejam diferentes nos dois casos. Na fig.1 a curva V é o deslocamento de fase variacional reportado por Campeneu e Humberston [86] abaixo do mais baixo threshold do sistema $e^+ - \text{He}$. As quatro curvas restantes correspondem ao deslocamento de fase da CCA com os conjuntos de bases (C) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p)$ (linha tracejada), (H) $\text{He}(1s1s, 1s2s) + \text{Ps}(1s)$ (linha tracejada e pontilhada), (K) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p) + \text{Ps}(1s, 2s)$ (linha pontilhada) e (N) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s, 2p)$ (linha sólida). Os deslocamentos de fase variacionais são positivos para as energias mais baixas. Os deslocamentos de fase

da CCA são negativos com todos os conjuntos de bases, com exceção do eight-state final (N) que é positiva em baixas temperaturas e tem a mesma natureza qualitativa do variacional. Da figura 1 vemos que, com a acréscimo do número de estados no conjunto de base, os deslocamentos de fase em onda S são menos negativos, algo consistente com o cálculo variacional.

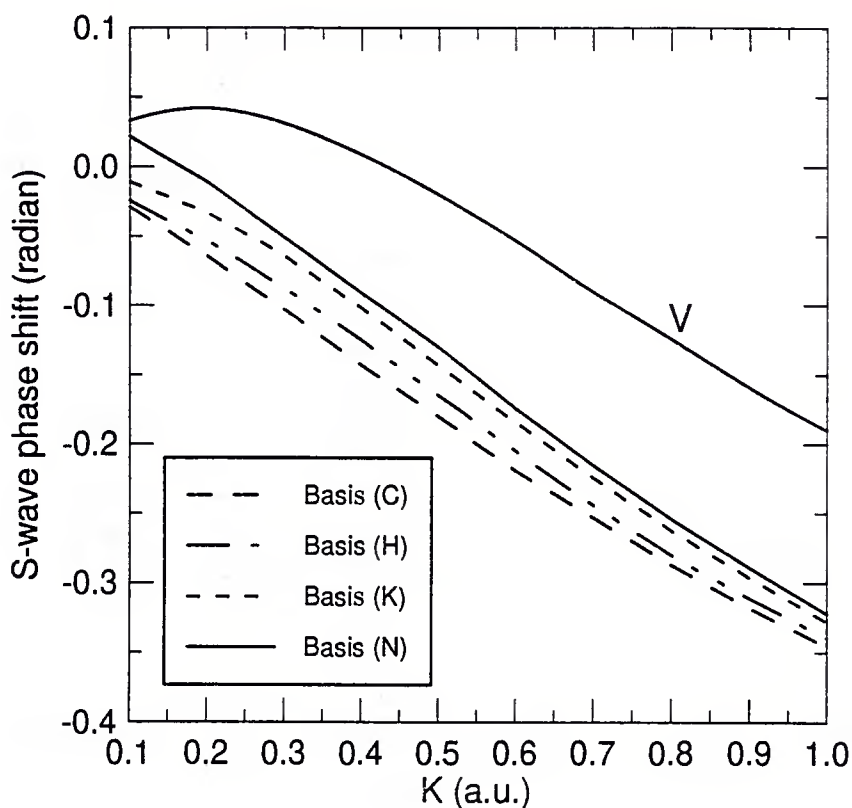


Fig. 1 Deslocamento de fase de espalhamento elástico em onda S em várias energias. A curva V é o cálculo variacional de Campeneu e Humberston [86].

No caso de ondas P e D do espalhamento elástico e^+ -He elastic os deslocamentos de fase variacionais [87, 86] são positivas em todas as energias abaixo do threshold da formação de Ps como pode ser visto nas figs 2-3. Nesta figuras, V é o deslocamento

de fase variacional e as outras curvas são etiquetadas pelos vários conjuntos de bases CCA usados no presente cálculo. O deslocamento de fase da CCA de novo converge lentamente com o número de funções.

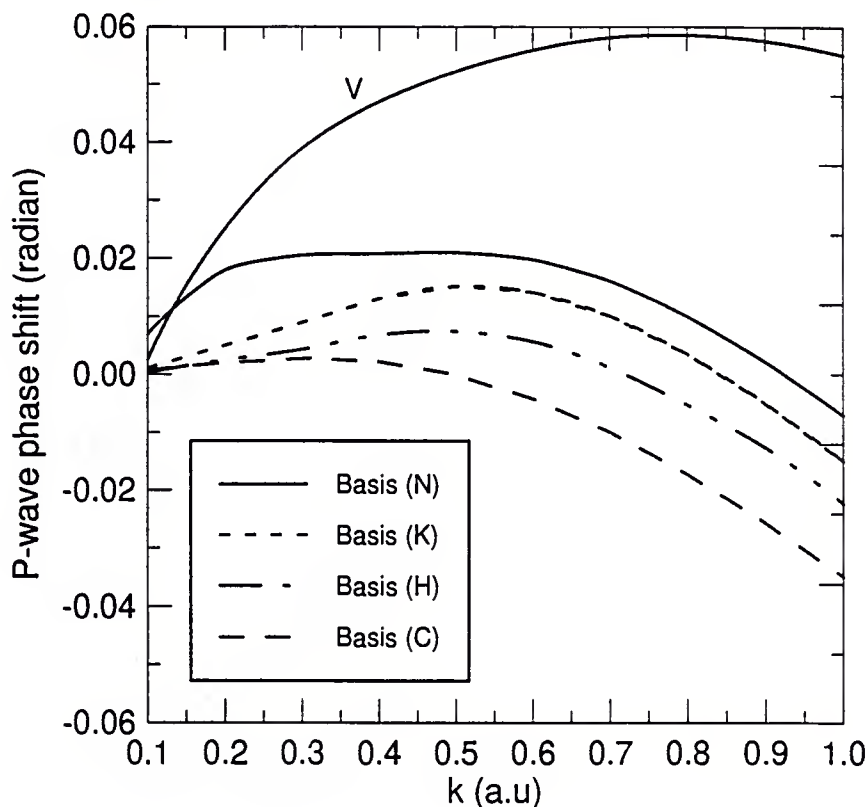


Fig. 2 Deslocamento de fase de espalhamento elástico em onda P em várias energias. A curva V é o cálculo variacional de Campeneu e Humberston [87, 86].

Das figs. 1-3 vemos que entre os estados do alvo o $\text{He}(1s2p)$ tem um maior efeito de convergência. O presente estudo é consistente com trabalhos em espalhamento $e^+ - \text{H}$ nos quais, em vez de incluir muitos estados do alvo de onda S no cálculo da CCA, é melhor tomar os estados excitados do alvo de diferentes momentos angulares, se um resultados mais convergente é desejado. Geralmente acredita-se que os estado do alvo, em onda P, são necessários para efeitos de polarização [88]. Para evitar

confusões graficamos apenas poucas curvas selecionadas nas figuras 1-3, somente para mostrar a tendência geral. Todavia, valores numéricos de deslocamentos de ondas S, P e D para a maioria dos conjuntos de bases são dados na forma de um apêndice para futura referência.

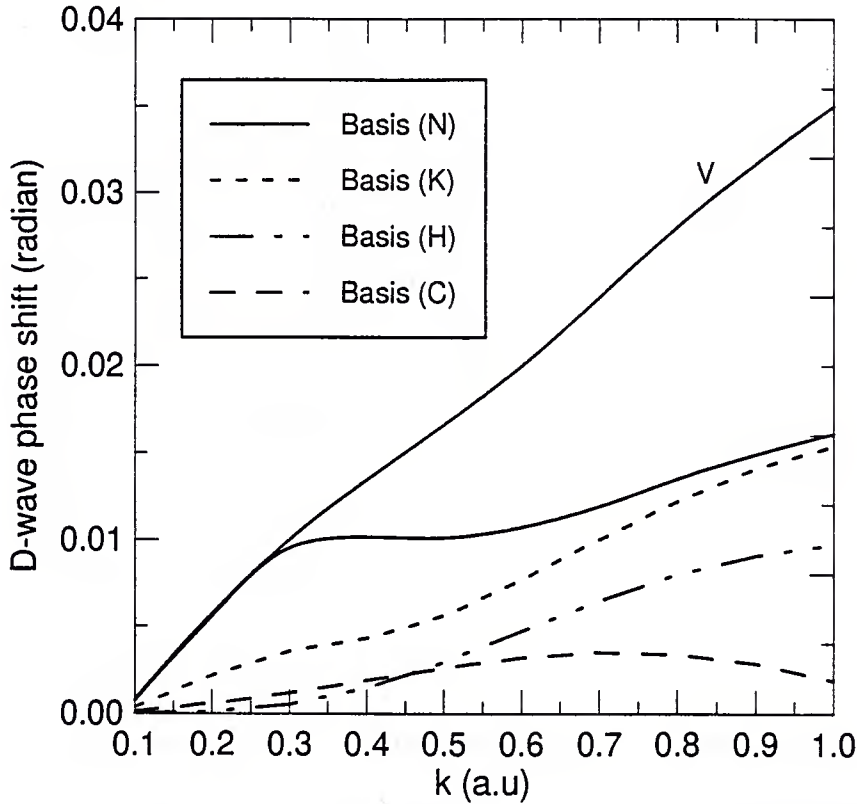


Fig. 3 Deslocamento de fase de espalhamento elástico em onda D em várias energias. A curva V é o cálculo variacional de Campeneu e Humberston [87, 86].

3.4.2 Ressonância:

Ressonância a baixas energias é sempre um importante características em teoria de espalhamento. O interesse no fenômeno de ressonância existe desde o início das pesquisas em teoria de espalhamento atômico. A CCA é segura para prever ressonâncias, no espalhamento elétron-átomo e pósitron-átomo. Burke et al em

1969[89] aplicou o cálculo de close-coupling em cinco estados no sistema e-He usando todos os cinco estados do hélio para $n = 1$ e $n = 2$ e previu ressonância para o deslocamento de fase em onda S para o estado fundamental do espalhamento elástico a energia incidente de 19.3 eV. Posteriormente, ressonâncias em espalhamento de e^+ -H abaixo do threshold $n=2$ foi prevista por Seiler et al[90] e Wakid [91] usando o método algébrico de close-clouping. Isto foi confirmado por Basu et al [92] pois acharam ressonâncias abaixo do primeiro threshold de excitação em deslocamento de fase de espalhamento elástico de e^+ -H em 10.2 eV. Recentemente, ressonâncias foram previstas em espalhamento elástico em 19.29 eV [79]. Sendo encorajado por todos estes desenvolvimentos recentes, temos olhado para ressonâncias em outros canais de sistemas e^+ -He. Consideramos as diferentes combinações das seguintes funções de base em nosso esquema CCA; He(1s1s), He(1s2s), He(1s2p), Ps(1s) e Ps(2s), como mencionado especificamente.

Fizemos um estudo cuidadoso das seção de choque em energias médias em ondas parciais mais baixas (S , P , e D) e encontramos somente ressonância visível em onda S em 30 eV de largura 2 eV nas seções de Ps(1s) e Ps(2s) com os seguintes conjuntos de bases:(J) He(1s1s, 1s2s, 1s2p), Ps(1s) and (K) He(1s1s, 1s2s, 1s2p), Ps(1s,2s). A ressonância foi também encontrada em seções de choque inelástica em He(1s2s) e He(1s2p) na mesma energia com a mesma largura para os dois conjuntos de bases acima. Todavia, a ressonância estava ausente no cálculo da CCA com conjunto de base (C) He(1s1s, 1s2s, 1s2p) que não inclui os estados de Ps. Os estados de Ps simulam parte da porção negligenciada do espaço de Hilbert em um esquema CCA de poucos estados e são necessários para a construção do mecanismo para a formação da ressonância. Ressonância estrutural foi também encontrada em seções

de choque de captura perto de 30 eV com os seguintes dois conjuntos de bases (F) He(1s1s), Ps(1s) e (G) He(1s1s), Ps(1s,2s). Mas estas ressonâncias são muito mais largas comparados aos obtidos com (J) e (K). Isso sugere que a inclusão do estado He(2p) na base CCA, em adição aos estados Ps, seja fundamental para uma correta descrição.

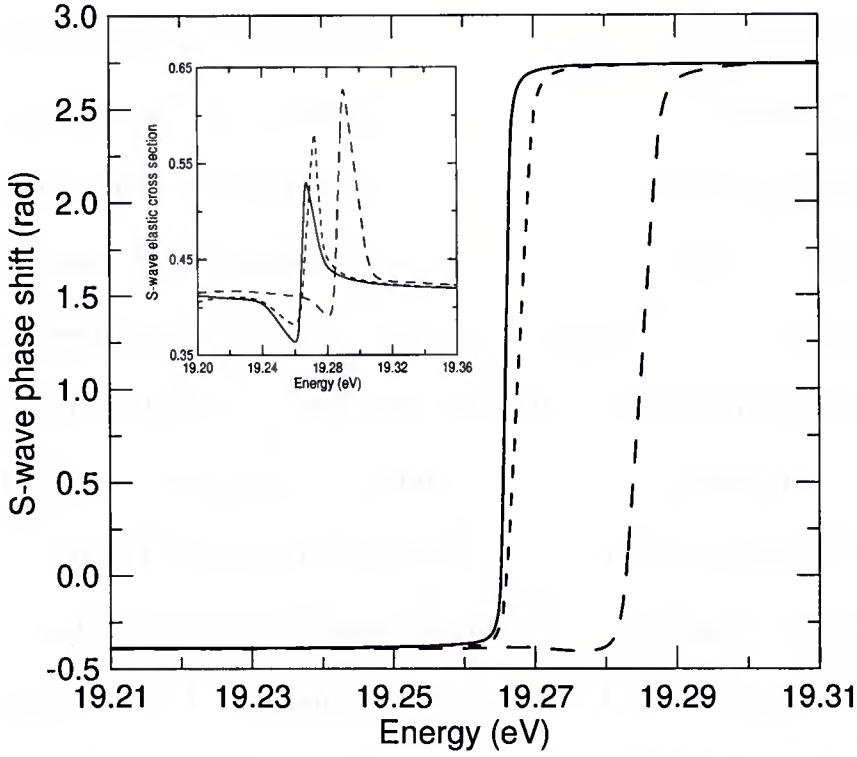


Fig. 4 Deslocamentos de fase elástico me onda S (em radiano) para bases (C) de três estados (linha tracejada), bases de quatro estados (D) (linha pontilhada) e bases de cinco estados (E) (linha sólida). Seções de choque elásticas em onda S - em unidades de πa_0^2 - são dadas no gráfico menor.

Higgins and Burke [81] reportaram ressonância similar na seção de choque de formação do Ps(1s) do espalhamento pósitron-hidrogênio usando o método de matriz R . Esse ressonância foi confirmada posteriormente por Hewitt et al. [82] Sarkar et al. [83] usando o approach CCA. À despeito da aparente semelhança entra a presente ressonância e a ressonância acima no espalhamento pósitron-hidrogênio, existem

diferenças óbvias. A ressonância do pósitron-hidrogênio é muito mais larga do que a presente no espalhamento pósitron-hélio. A ressonância no pósitron-hidrogênio foi observada aparentemente apenas na seção de formação do $\text{Ps}(1s)$. Também, sua posição e largura no approach CCA muda constantemente com o crescimento das funções de base [83]. A ressonância se torna mais larga e menos pronunciada quando o número de funções de base crescem [83]. Isto gera algumas dúvidas sobre sua existência nos cálculos mais convergentes [93]. A presente ressonância em 30 eV no pósitron-hélio é muito mais aguda e é observada nos canais de rearrangement na mesma energia para dois conjuntos de funções de base (J) e (K), No presente caso a posição da ressonância é razoavelmente fixa, independente do número de auto-estados no conjunto de base. Para posterior verificação desta idéia, adicionamos estados de $\text{He}(1s3s)$ e $\text{He}(1s3p)$ nos conjuntos de base e olhamos para as mesmas ressonâncias. Embora a inclusão dos estados $n = 3$ reduza as seções de choque da onda S, a natureza das ressonâncias permanece constante. Isso sugere que o presente esquema CCA representa corretamente a base física da ressonância e que a presente ressonância não é um artefato do cálculo CCA. Temos estudado as ressonâncias em espalhamentos elásticos exatamente com o mesmo espírito.

Temos estudado as ressonâncias no espalhamento elástico com o mesmo espírito do trabalho de Kahali [79], todavia, com um conjunto mais largo de base. Além de achar a mesma ressonância em 19.29 eV com conjunto de base (C) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p)$ também encontramos ressonâncias no deslocamento elástico de fase com base de quatro estados (D) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s)$ e bases de cinco estados (E). $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p)$ em 19.27 eV e 19.265 eV, respectivamente. Portanto, embora a posição de ressonância no espalhamento elástico mude gradualmente na

direção da mais baixa energia com o aumento de número de estados na base, o deslocamento total é apenas 0.025 eV. Assim, a ressonância é praticamente fixa. Já verificamos que as ressonâncias são obtidas apenas quando se inclui o(s) estado(s) p na base. Todavia, nenhuma ressonância no canal elástico, é observada quando o(s) estado(s) do átomo Ps é incluído. Isto é provavelmente devido à não-ortogonalidade entre o estado inicial e final do átomo. Isso também tem sido detectado no espalhamento e^+H por Basu e Ghosh [80]. Os deslocamentos de fase elásticos para as bases (C), (D) e (E) a baixas energias, mostrando saltos nas respectivas energias de ressonância, são demonstrados na fig. 4.

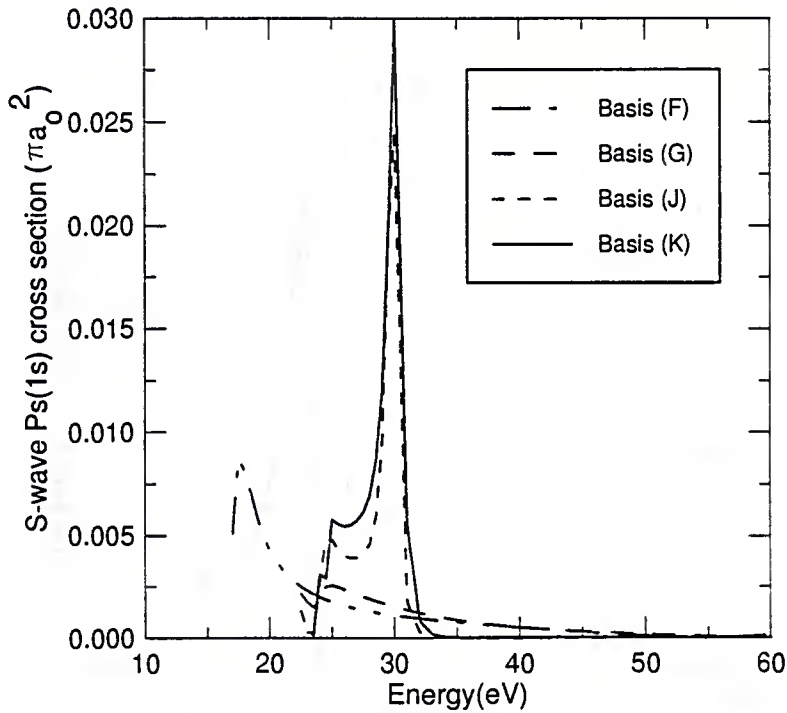


Fig. 5 Seção de choque de onda S em unidades de πa_0^2 para estado Ps(1s) com diferentes estados de bases no approach CCA.

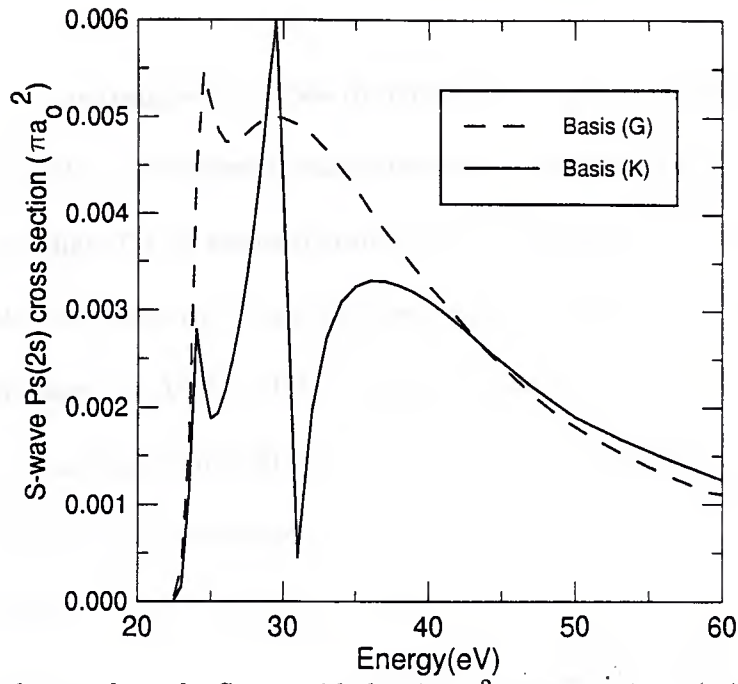


Fig. 6 Seção de choque de onda S em unidades de πa_0^2 para estado $\text{Ps}(2s)$ com diferentes estados de bases no approach CCA.

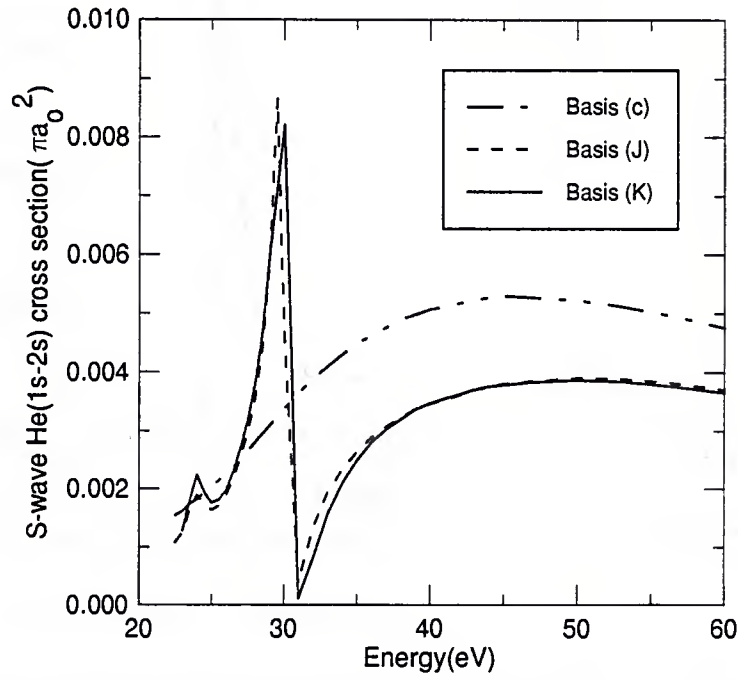


Fig. 7 Seção de choque de excitação de onda S em unidades de πa_0^2 para estado $\text{He}(1s2s)$ com diferentes estados de bases no approach CCA.

Nas figs 5 e 6, mostramos as seções de choque de captura de onda S para os estados $Ps(1s)$ e $Ps(2s)$. As seções inelásticas para os estados $He(1s2s)$ e $He(1s2p)$ são mostrados nas figs 7 e 8 respectivamente. Destas figuras, encontramos uma ressonância aguda em torno de 30 eV de largura 2 eV em todos os quatro canais para conjuntos de bases CCA (J) e (K). Não há nenhuma ressonância com conjuntos (F) e (G), visto que ambos estados $He(1s2p)$ e Ps necessitam do approach CCA para uma correta reprodução da ressonância.

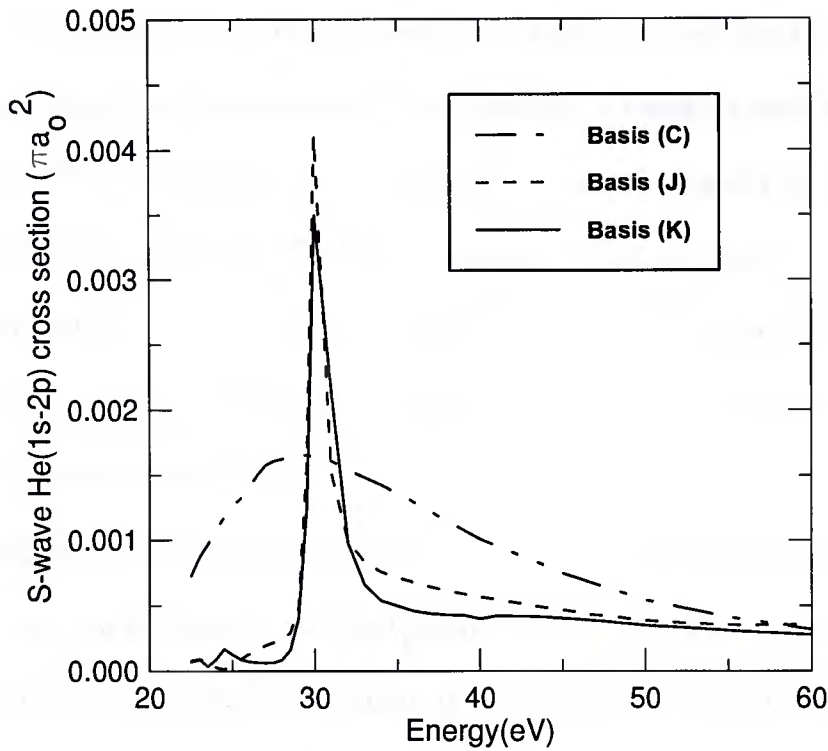


Fig. 8 Seção de choque de excitação de onda S em unidades de πa_0^2 para estado $He(1s2p)$ com diferentes estados de bases no approach CCA.

Atualmente o mecanismo físico para a formação desta ressonância de canal acoplado não é claro. Para uma correta representação da ressonância, ambos estados $He(1s2p)$ e Ps devem ser usados. Os estados p dos átomos alvos formam o potencial de polarização de longo alcance no e^+-He . O acoplamento entre os estados p do alvo e do átomo Ps no esquema CCA aparentemente constrói um potencial

efetivo multicanal de longo alcance no sistema e^+ -He com repulsão de longo alcance e atração de curto alcance. Tal potencial deveria ser responsável pela ressonância. Um futuro trabalho teórico pode confirmar se esta sugestão está correta.

3.4.3 Seção de Choque Diferencial:

Para alinhar feixes Ps, que são usados intensivamente em diferentes ramos da física, o conhecimento das seções de choque diferencial da formação de Ps em estados excitados no espalhamento e^+ -átomo é essencial. Tendo isso em mente, realizamos um detalhado estudo a do espalhamento pósitron-hélio a energia média na estrutura do eight-state CCA, incluindo dois elétrons ativos e usando funções de onda realísticas para os estados dos átomos de hélio e positrônio para energias do positrônio incidente entre 40 eV e 200 eV. Os oito estados incluídos no presente estudo CCA são os seguintes: He(1s1s), He(1s2s), He(1s2p), He(1s3s), He(1s3p), Ps(1s), Ps(2s) e Ps(2p). Muitos dos estudos teóricos deste sistema somente apresentaram resultados para o ângulo integrado das seções de choque parcial e diferente canais inelásticos do alvo. Aqui, apresentamos resultados para diferentes seções de choque diferencial e parâmetro de coerência para os canais de rearrangement, elástico e inelástico [10]. Para um entendimento detalhado da transição para um estado atômico não s, por exemplo, o estado do He(1s2p), em adição a seção de choque diferencial, um estudo dos parâmetros de coerência são necessários.

Para a obtenção da convergência da seção do ângulo integrado, doze (quinze) estados de momento angular J foram necessários para energias até 80 eV (200 eV). Para a seção diferencial e parâmetros λ e χ foi mais difícil obter convergência. Para espalhamento elástico e rearrangement para estado Ps(1s), quinze momentos

angulares foram necessários para obter a convergência. Para transições de estados $\text{He}(1s2s)$, $\text{He}(1s2p)$, $\text{He}(1s3s)$, $\text{He}(1s3p)$ do hélio e estados $\text{Ps}(2s)$ e $\text{Ps}(2p)$ do positrônio, trinta estados de momento angular foram empregados. A contribuição das mais altas ondas parciais não incluídos nos cálculos dinâmicos foram aproximados pelos respectivos termos de Born e adicionados ao cálculos dinâmicos.

A fim de mostrar a tendência geral do resultado, realizamos cálculos nas seguintes energias do pósitron incidente: 40 eV, 60 eV, 80 eV, 100 eV, e 200 eV.

Canal Direto:

As seções de choque diferencial para o espalhamento elástico do hélio pelo pósitron obtido pelo esquema eight-state CCA são plotadas na fig. 9.

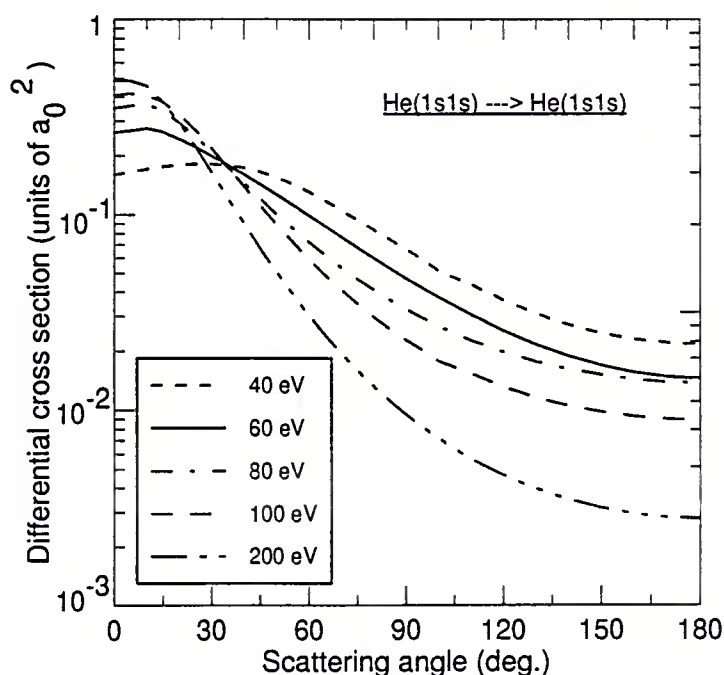


Fig. 9 Seção de choque de diferencial em unidades de a_0^2 para estado $\text{He}(1s1s)$ no espalhamento pósitron-hélio empregando o esquema de oito estados de CCA.

Depois, apresentamos os resultados para diferentes seções inelásticas.

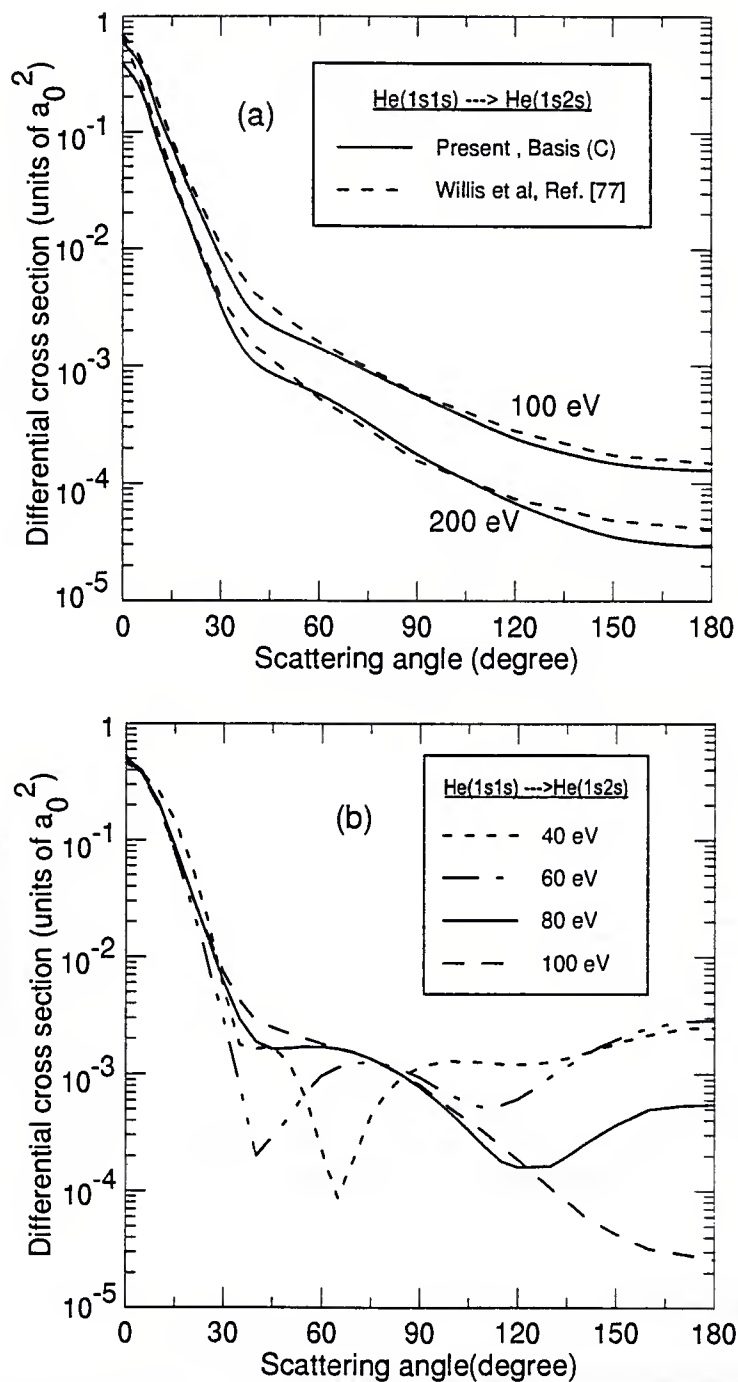


Fig. 10 Seção diferencial (em unidades de a_0^2) para excitação do estado $\text{He}(1s2s)$ no espalhamento pósitron-hélio empregando o esquema CCA . **Fig (a)** é para o conjunto CCA (C) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p)$ e **Fig (b)** é para o conjunto CCA (C) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s, 2p)$.

Têm sido feito cálculos prévios para transições inelásticas para o estado $\text{He}(1s2s)$ empregando o esquema three-state CCA com os seguintes estados $\text{He}(1s1s)$, $\text{He}(1s2s)$, $\text{He}(1s2p)$ [78]. Daí, encontramos ser apropriados para comparar nossos resultados com da ref.[78] empregando os mesmo três estados do hélio, mostrado na fig. 10(a). O acordo entre os dois cálculos em 100 e 200 eV é muito satisfatório. Na fig. 10(b) apresentamos os resultados do presente CCA de oito estados para transições inelásticas para o estado $\text{He}(1s2s)$.

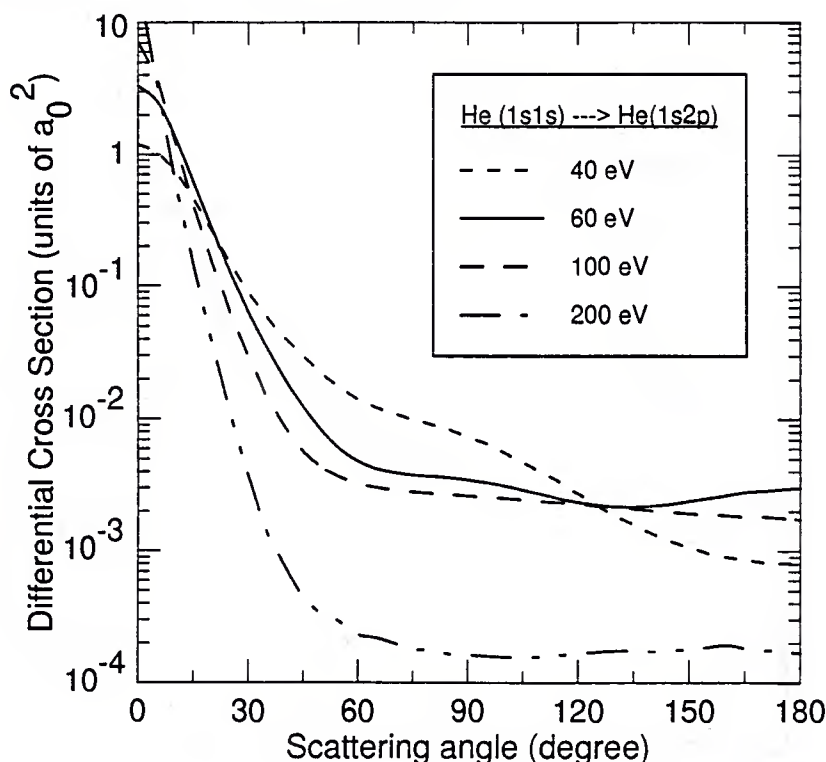


Fig. 11 Seção diferencial (em unidades de a_0^2) para excitação do estado $\text{He}(1s2^1p)$ no espalhamento pósitron-hélio empregando o esquema CCA. As curvas são etiquetadas pela energia do pósitron incidente.

Na fig. 11 plotamos a seção de choque diferencial para excitação do estado $\text{He}(1s2^1p)$ num espalhamento pósitron-hélio empregando o presente eight-state CCA. Encontramos que, em geral, os resultados de três estados são diferentes dos

de oito. Isto mostra que a necessidade de estados do positrônio para obtenção da convergência das seções de choque do espalhamento elástico e inelástico do pósitron-hélio.

Canal de Rearrangement:

Finalmente, apresentamos a seção diferencial de captura para os estados $\text{Ps}(1s)$, $\text{Ps}(2s)$ e $\text{Ps}(2p)$ no espalhamento positrônio-hélio usando o presente esquema CCA de oito estados na fig. 12, 13 e 14, respectivamente.

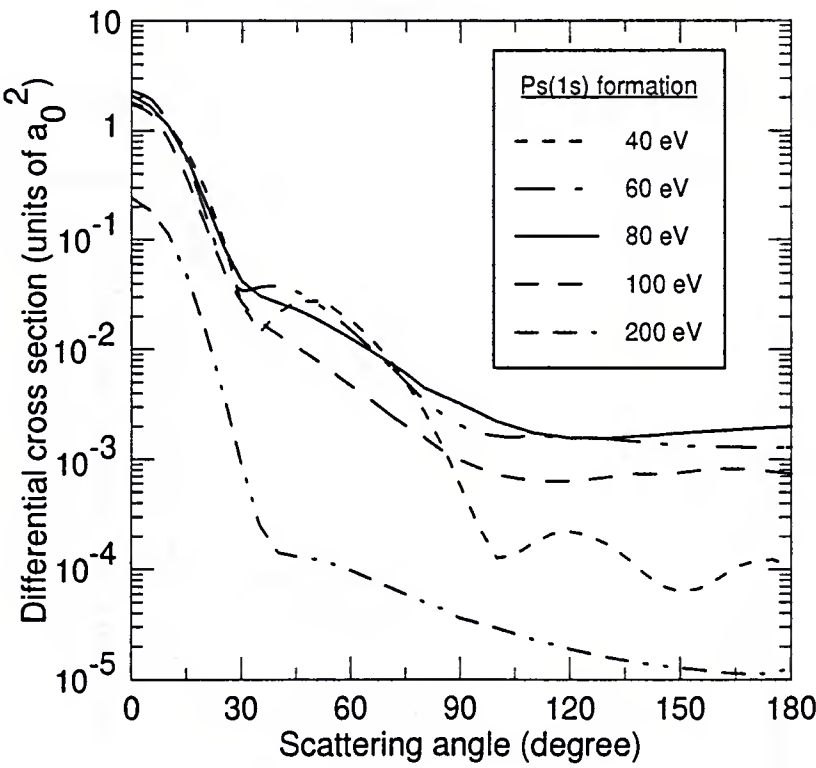


Fig. 12 Seção diferencial (em unidades de a_0^2) para transição de rearrangement ao estados $\text{Ps}(1s)$ no espalhamento pósitron-hélio empregando o esquema CCA.

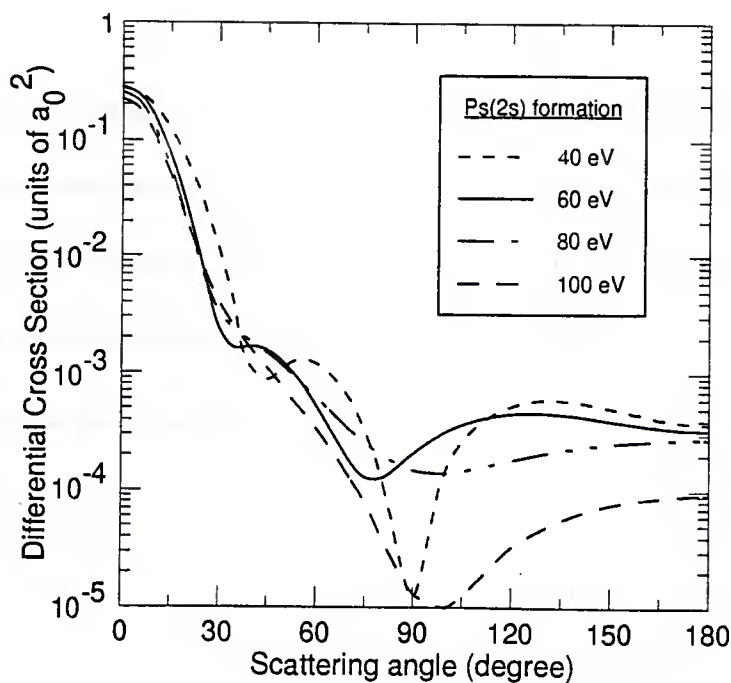


Fig. 13 Seção diferencial (em unidades de a_0^2) para transição de rearrangement ao estados Ps(2s) no espalhamento pósitron-hélio empregando o esquema CCA.

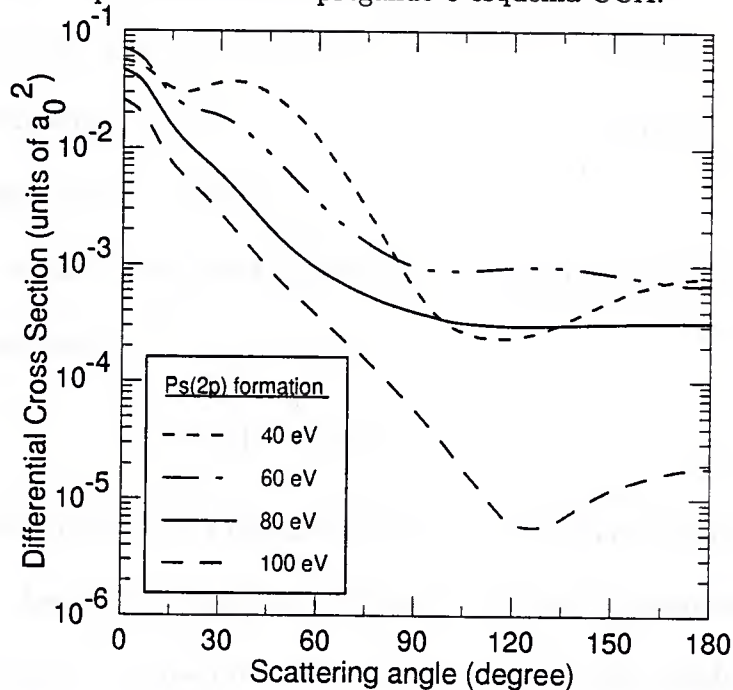


Fig. 14 Seção diferencial (em unidades de a_0^2) para transição de rearrangement ao estados Ps(2p) no espalhamento pósitron-hélio empregando o esquema CCA.

A altas energias a seção diferencial para espalhamento pósitron hélio elástico e inelástico devem ser similares ao do sistema elétron-hélio, onde o efeito da troca deve ser pequeno. Para comparação de nossos resultados com os das refs. [78, 94, 95], encontramos que esta tendência geral existe no presente cálculo.

3.4.4 Parâmetros de coincidência:

Também temos estudado os parâmetros de coincidência λ e χ pois são igualmente importantes para uma completa determinação do espalhamento. Enquanto a seção de choque diferencial é a medida da probabilidade do espalhamento em direções diferentes, a coincidência de parâmetros adimensionais descreve o estado dos átomo depois da colisão. Têm sido feitos cálculos de parâmetro de coerência para excitação para o estado $\text{He}(1s2p)$ do átomo de hélio no espalhamento elétron-átomo e pósitron-átomo, respectivamente [78, 94, 95]. Calculamos λ e χ seguindo Eminyan et. al. [95] para a transição para o estado $\text{He}(1snp)$.

Neste caso, o estado final é uma superposição de estados coerentes dos subníveis magnéticos degenerados:

$$|\Psi\rangle = a_1|11\rangle + a_0|10\rangle + a_{-1}|1-1\rangle, \quad (3.34)$$

onde a amplitude $a_{\mathcal{M}}$ descreve a excitação para o subnível particular $|J=1, \mathcal{M}\rangle$ do estado $\text{He}(1s2p)$. Assumindo simetria azimutal do processo de espalhamento, tem-se $a_1 = -a_{-1}$. A seção de choque diferencial para a excitação do estado $\text{He}(1s2p)$ é a soma das três possibilidades e é dada por

$$\sigma_{\text{diff}} = \sum_{\mathcal{M}=-1}^1 |a_{\mathcal{M}}|^2 = 2|a_1|^2 + |a_0|^2, \quad (3.35)$$

onde $|a_{\mathcal{M}}|^2$ é a seção de choque diferencial para excitação do estado de momento angular de projeção $\mathcal{M}$.

As amplitudes $a_{\mathcal{M}}$, $\mathcal{M} = -1, 0, 1$, são os outputs do cálculo dinâmico de CCA. Em geral, estas amplitudes são complexas. A seção de choque diferencial (3.35) não fornece todas as informações detalhadas destas amplitudes. Dois mais parâmetros λ e χ tem sido introduzidos para esta proposta. Estes parâmetros adimensionais, em adição à seção diferencial, fornece uma melhor descrição do estado final do espalhamento. O parâmetro χ fornece a fase relativa entre a_1 e a_0 e é definido por [94, 95]

$$\frac{a_1}{a_0} = \left| \frac{a_1}{a_0} \right| \exp(i\chi). \quad (3.36)$$

O parâmetro λ é definido por

$$\lambda = \frac{|a_0|^2}{2|a_1|^2 + |a_0|^2}. \quad (3.37)$$

Assim, uma medida de σ_{diff} , λ e χ constitue uma determinação do espalhamento.

Parâmetro de orientação (λ) para excitação para o estado $\text{He}(1s2p)$ no espalhamento pósitron-hélio a energias do pósitrons incidentes de 40 e 80 eV empregando os esquemas CCA de três e oito estados da fig. 2. As curvas são etiquetadas pela energia do pósitron incidente; 3st – CCA de três estados, 8st – CCA de oito estados, 80w – CCA de três estados de ref. [78].

Nas figs 15 e 16 plotamos os parâmetros λ e χ , respectivamente, para transição do estado $\text{He}(1s2^1p)$ empregando a CCA de oito estados bom como a CCA de três estados empregando os seguintes estados: $\text{He}(1s1s)$, $\text{He}(1s2^1s)$ and $\text{He}(1s2^1p)$. Para comparação apresentamos também os resultados do cálculo da CCA de três estados da ref. [78]. O presente resultado está em razoável acordo com o da ref.[78].

A natureza do parâmetro de alinhamento, χ de acordo com nosso esquema de CCA de três estados, em 80 eV há um bom acordo com a ref.[78] apenas até $\theta = 30^\circ$.

Também temos um máximo grande em 30° como na ref.[78], todavia, com um valor levemente mais alto. Mas, acima de 30° , nosso parâmetro χ varia continuamente dando uma onda como estrutura enquanto que, na ref. [78], é constante. Com a inclusão dos canais de formação de PS (CCA de oito estados), a discrepância entre os resultados presentes e da ref. [78] cresce, especialmente para ângulos maiores.

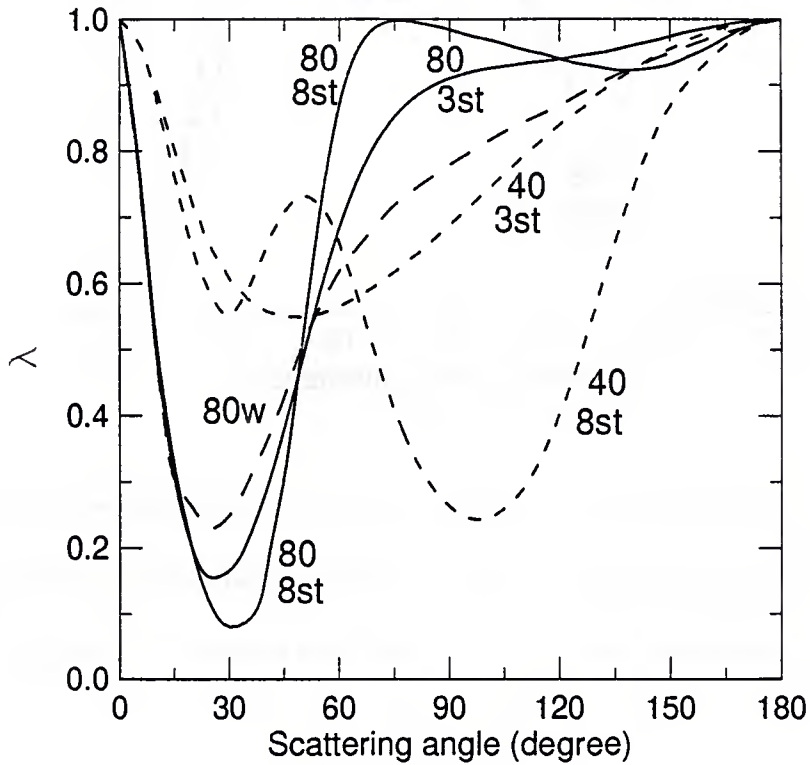


Fig. 15 Parâmetro de orientação (χ) para excitação para o estado $\text{He}(1s2^1p)$ no espalhamento pósitron-hélio a energias do pósitrons incidentes de 40 e 80 eV empregando os esquemas CCA de três e oito estados da fig. 2. As curvas são etiquetadas pela energia do pósitron incidente; 3st – CCA de três estados, 8st – CCA de oito estados, 80w – CCA de três estados de ref. [78].

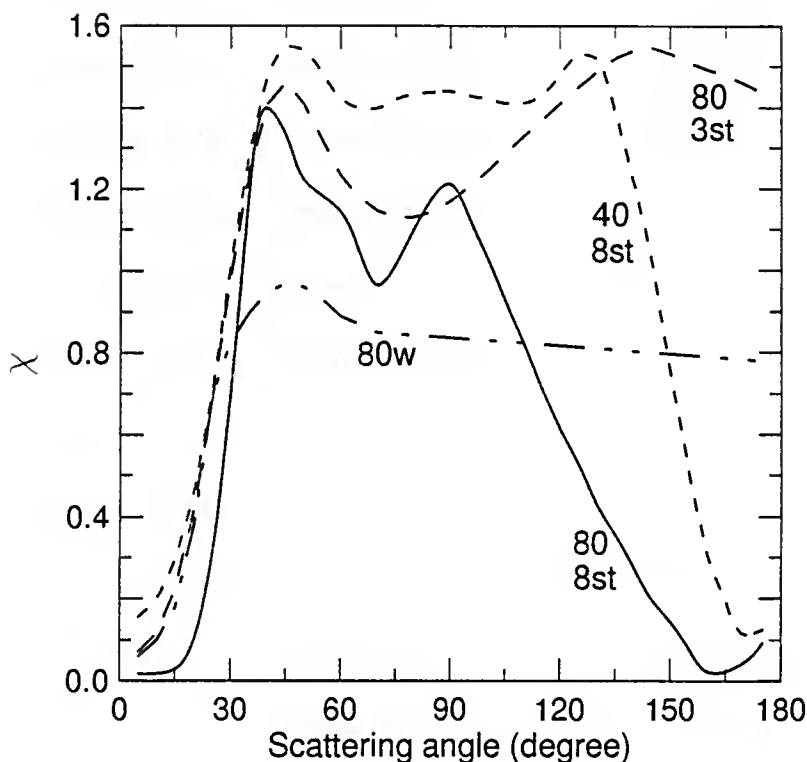


Fig. 16 Parâmetro de alinhamento (χ) para excitação para o estado He(1s2p) no espalhamento pósitron-hélio a energias do pósitrons incidentes de 40 e 80 eV empregando os esquemas CCA de três e oito estados com bases (C) e (N) respectivamente. Para notação, ver a fig. 15.

3.4.5 Seção de Choque Total:

Formação do Positrônio:

Na presente seção usamos a aproximação de close coupling (CCA) para o estudo da formação de Ps no espalhamento e^+ -He. Isso nos dá uma oportunidade de ver o quão bem um esquema pode descrever a formação Ps. No espalhamento e^+ -He, como threshold de formação é o mais baixo dos threshold inelástico e de rearrangement e a formação de Ps é um processo de grande significância, as negligências deste canal em qualquer modelo físico devem ser consideradas inadequadas. Recentemente, tem

sido feito um estudo teórico [73] da formação de Ps em espalhamento e^+ -He usando o método variacional Kohn na região de gap de Öre (energias entre o mais baixo threshold de formação de Ps e o mais baixo threshold inelástico). Embora esse estudo seja acurado e preciso, o escopo de tal estudo variacional é limitado. Por causa das complicações técnicas, não é possível estendê-lo a altas energias onde outros canais físicos estão abertos. Em comparação, o approach CCA inclui o efeito do acoplamento dinâmicos entre os diferentes canais inelásticos e de rearrangement e pode ser estendido a altas energias. A CCA fornece uma estrutura prática para o tratamento do espalhamento elétron-átomo ou pósitron-átomo e trabalhos com todos os canais de uma forma unificada. Pode se usá-la no espalhamento pósitron-átomo para átomos menores e maiores [96, 34, 97] e se pode, em princípio, incluir mais funções no conjunto da base.

Realizamos um estudo detalhado da formação de Ps em ondas parciais diferenciadas incluindo dos elétrons dinamicamente ativos e usando funções de onda realísticas para os estados do hélio e do positrônio para energia do pósitron incidente entre 17 eV e 200 eV [11].

O sistema e^+ -He é um dos sistemas mais simples, onde a seção de choque de captura para os estados de Ps é comparável as seções de choque elástica e inelástica. Daí, uma descrição dinâmica ab initio de formação de Ps neste sistema usando funções de onda realísticas é mais bem vinda. Todavia, por causa da natureza bicentrada do estado final no canal de formação e da presença de dois elétrons ativos, a descrição teórica da formação de Ps no espalhamento e^+ -He fica difícil. Isto porque, muito dos cálculos de CCA para este sistema vem negligenciando os estados de formação Ps [78] ou tratando de forma aproximada pelo emprego simplificado

das funções de onda[76].

Para a obtenção da convergência da seção de choque do ângulo integrado, dose (quinze) estados de momento angular J são necessários para energias até 80 eV (200 eV). Para o rearrangement para o estado Ps(1s), quinze estados de momento angular são necessários para obter convergência. Para transições do estados Ps(2s) e Ps(2p) do positrônio, trinta estados de momento angular foram empregados. As contribuições das mais altas ondas parciais não incluem, no cálculo dinâmico da CCA, foram aproximadas pelos respectivos termos de Born e adicionados aos resultados dos cálculos dinâmicos.

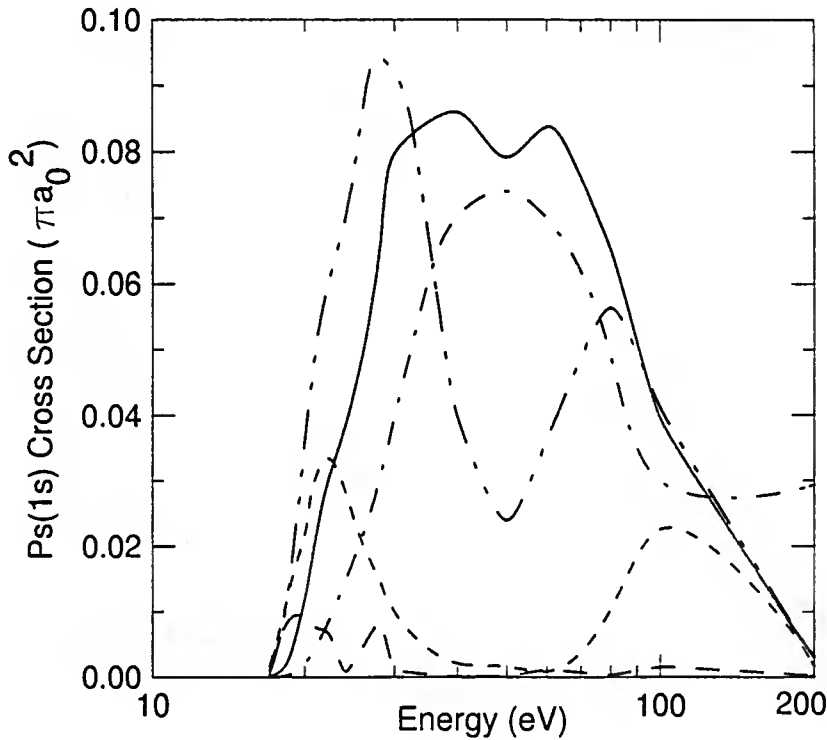


Fig. 17 Seção de choque do ângulo integrado de formação de Ps (em unidades de πa_0^2) para estado Ps(1s) em cinco ondas parciais mais baixas $J = 0$ (linha tracejada), $J = 1$ (linha pontilhada), $J = 2$ (linha tracejada e duplo pontilhada), $J = 3$ (linha sólida), $J = 4$ (linha tracejada-pontilhada) em diferentes energias de pósitron incidente.

Primeiro, mostramos os resultados das seções de ângulo integrado de formação de Ps para estados de Ps(1s), Ps(2s), e Ps(2p) nas baixas ondas parciais para energia do pósitron incidente até 200 eV nas figs 17, 18 e 19, respectivamente. Somente acima dos respectivos thresholds, as seções de Ps(1s) e Ps(2s) são dominadas pelas ondas parciais $J = 0, 1$, e 2. Em altas energias, outras ondas parciais se tornam importantes. Todavia, a seção de choque do Ps(2p) é dominada pelas ondas parciais $J = 1$ e 2. Em todos os casos a contribuição da onda parcial $J = 0$ é a menor da média às altas energias. .

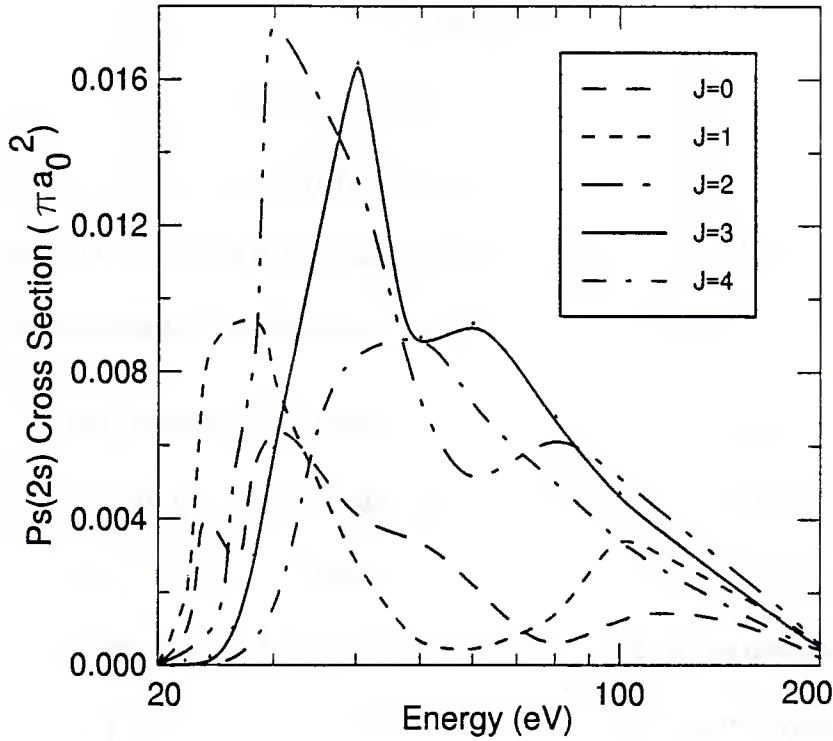


Fig. 18 Seção de choque do ângulo integrado de formação de Ps (em unidades de πa_0^2) para estado Ps(2s) em cinco ondas parciais mais baixas $J = 0$ (linha tracejada), $J = 1$ (linha pontilhada), $J = 2$ (linha tracejada e duplo pontilhada), $J = 3$ (linha sólida), $J = 4$ (linha tracejada-pontilhada) em diferentes energias de pósitron incidente.

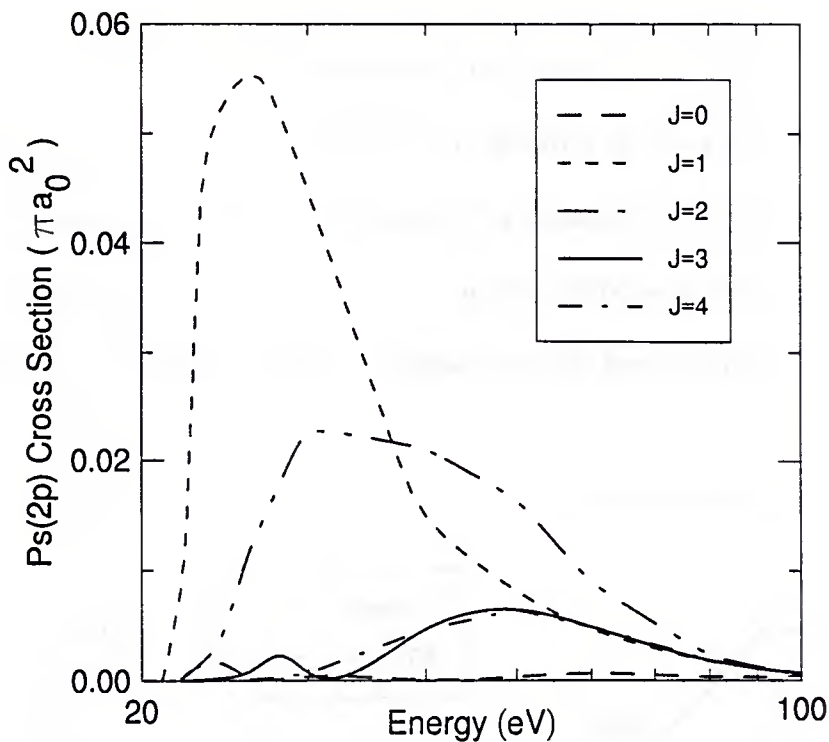


Fig. 19 Seção de choque do ângulo integrado de formação de Ps (em unidades de πa_0^2) para estado Ps(2s) em cinco ondas parciais mais baixas $J = 0$ (linha tracejada), $J = 1$ (linha pontilhada), $J = 2$ (linha tracejada e duplo pontilhada), $J = 3$ (linha sólida), $J = 4$ (linha tracejada-pontilhada) em diferentes energias do pósitron incidente.

Na fig. 20, comparamos a presente seção de choque de formação de Ps(1s) na região do gap de Ore com cálculo variacional kohn de Van Reeth e Humberston (VH). Eles calcularam a seção de choque de formação de Ps(1s) para ondas $J = 0, 1$, e 2 . Afim de calcular a seção de choque total de formação de Ps(1s), fizeram os cálculos pela seção de Born para $J > 2$, enquanto que temos incluído a contribuição das altas ondas parciais pelo approach CCA. Os thresholds de espalhamento de cálculos de VH foram fitados para seus valores experimentais. Como o threshold de Ps(1s) dos modelos são levemente diferentes, para uma comparação do presente cálculo com o de VH, temos usado na fig. 20 a energia do pósitron E_1 em excesso da energia de threshold de formação de Ps. Para $J = 0$ e 1 , a presente

seção é levemente mais que de VH, enquanto que para $J = 2$, a presente seção de choque é levemente menor que da ref. [73]. VH acredita que suas seções de choque tem convergido dentro de 20% do valor exato. As presentes seções de onda parcial estão em acordo com a acuracidade de VH. O acordo entre as seções transversais de formação de Ps(1s) em ondas parciais somadas é muito bom, como se pode ver na fig. 20.

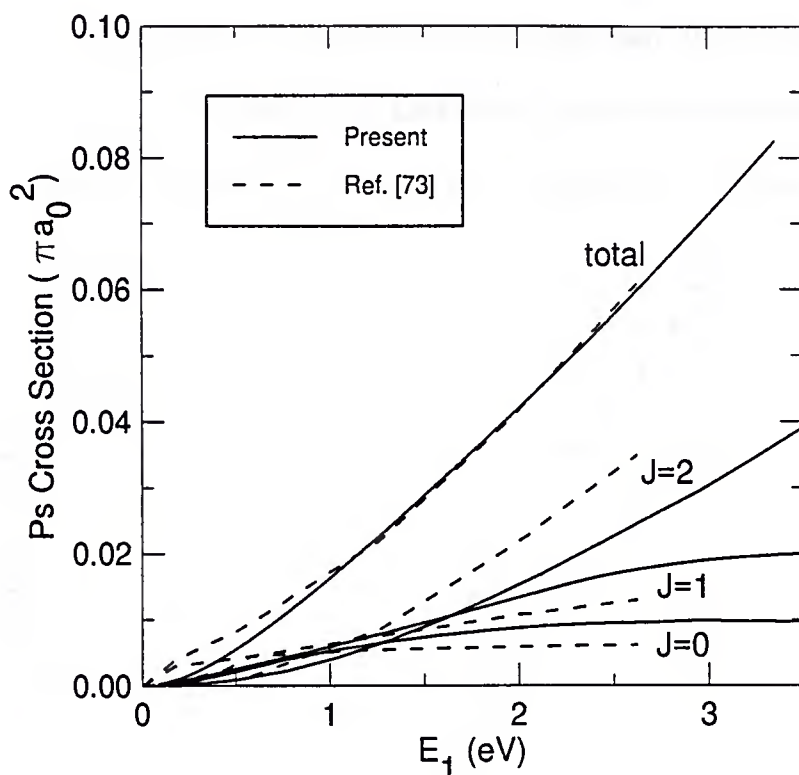


Fig. 20 Ondas parciais (para $J = 0, 1$, e 2) seções de choque de formação de Ps em ondas parciais somadas (em unidades de πa_0^2) na região do gap de Ore: cálculo presente (linha sólida), cálculo variacional Kohn da ref. [73] (linha tracejada). A energia do pósitron E_1 está em excesso da energia de formação de Ps(1s)

Depois comparamos as seções de choque presentes com os experimentos. Usamos somente os novos resultados experimentais das [48, 49], que supostamente são mais apurados que experimentos mais antigos da ref. [50, 51, 52, 53]. Na fig. 21 apre-

sentamos a seção de formação de Ps(1s) entre os threshold para formação de Ps(1s) e Ps(2s,2p). Nesta região de energia, devido a existência de diferentes thresholds inelástico em energias na vizinhança, convergência numérica é difícil de se obter. A presente curva comportada da fig. 21 assegura a boa convergência obtida em nossos cálculos. Na fig. empregamos a energia do pósitron incidente (E_1) acima do threshold de formação de Ps para comparação com os cálculos de VH [73], bem como com o experimento [49]. A seção de choque está de acordo com de VH, embora haja alguma discrepância com o experimento. Essa discrepância no presente esquema de CCA pode ser atribuída a natureza truncada do conjunto CCA de base.

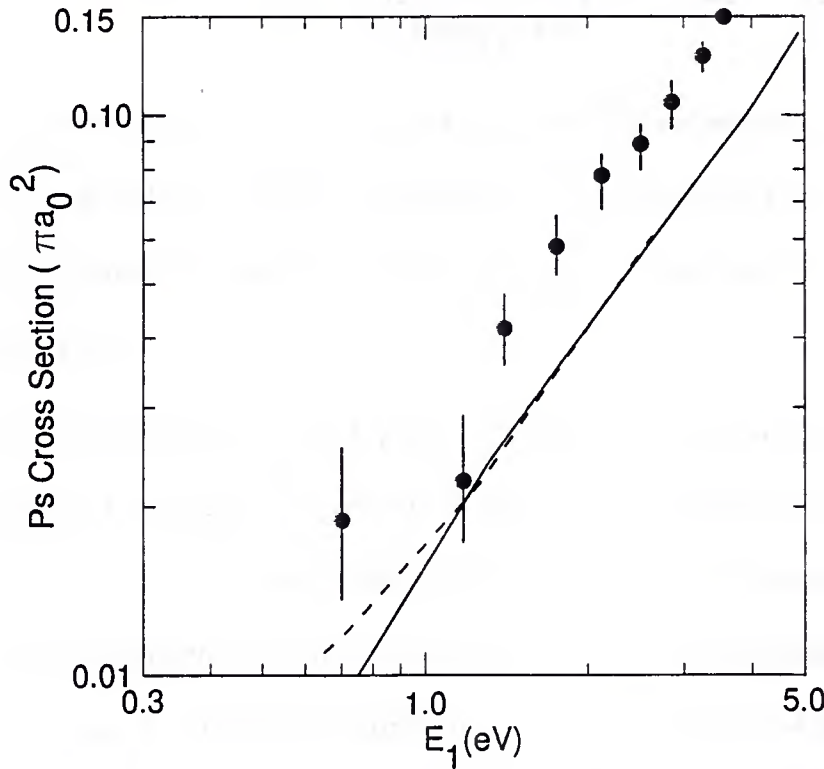


Fig. 21 Seções de choque (para $J = 0, 1$, e 2) de formação de Ps em ondas parciais somadas (em unidades de πa_0^2) para energias abaixo do threshold de Ps(2s,2p): cálculo presente (linha sólida), cálculo variacional Kohn da ref. [73] (linha tracejada). A energia do pósitron E_1 está em excesso da energia de formação de Ps(1s)

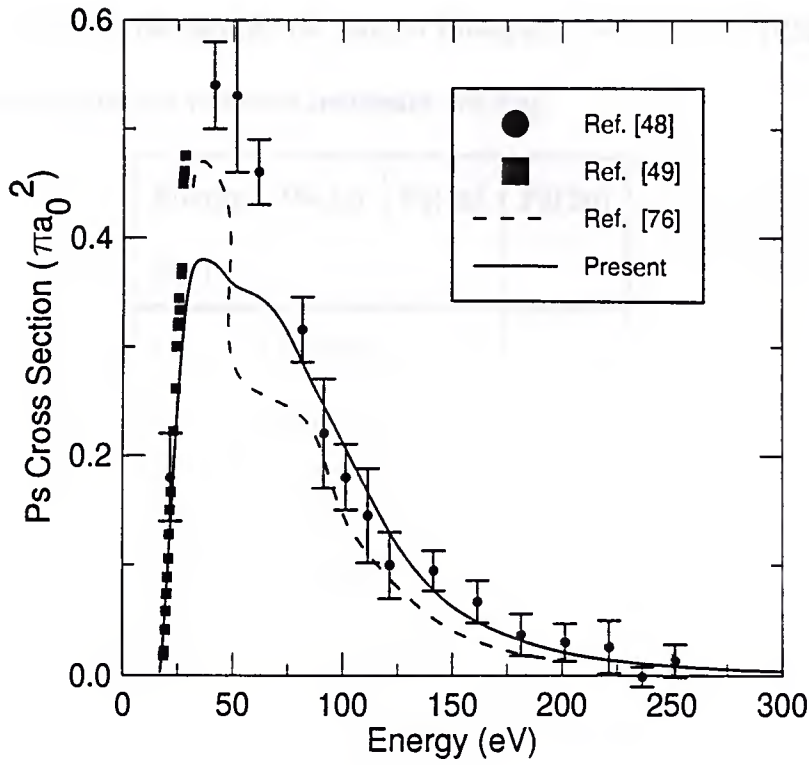


Fig. 22 Seções de choque de formação de Ps em ondas parciais somadas (em unidades de πa_0^2) para energias abaixo de 250 eV: cálculo presente (linha sólida), cálculo variacional Kohn da ref. [73] (linha tracejada). A energia do pósitron E_1 está em excesso da energia de formação de Ps(1s).

Na figura 22, mostramos a seção total de formação para energia do pósitron incidente até 250 eV. Comparamos os presentes cálculos com resultados experimentais das refs.[48] e [49] bem como com o cálculo da CCA da ref. [76]. O acordo do cálculo presente com o experimento é bom, exceto próximo do pico de formação de Ps. O cálculo da CCA da ref. [76] também apresenta problemas similares na mesma região de energia. Os cálculos de Born de [75] são também largos nas energias médias.

Na tabela 1 apresentamos as seções de choque de formação do positrônio para os estados fundamental de excitado usando o conjunto de base da (N) CCA de oito estados.

TABELA 1. Seção de choque do ângulo integrado de Ps(1s), Ps(2s) e Ps(2p) para diferentes energias do pósitron incidente em πa_0^2

Energy (eV)	Ps(1s)	Ps(2s)	Ps(2p)
17	0.0032		
18	0.0240		
19	0.0520		
20	0.0826		
22	0.1375	0.0021	0.0089
24	0.1535	0.0136	0.0563
26	0.1966	0.0184	0.0686
28	0.2277	0.0271	0.0763
30	0.2453	0.0335	0.0732
40	0.2604	0.0496	0.0672
50	0.2623	0.0406	0.0533
60	0.2787	0.0327	0.0349
80	0.2503	0.0271	0.0131
100	0.1821	0.0233	0.0055
150	0.0520	0.0085	0.0008
200	0.0181	0.0032	0.0002

Efeito dos canais diretos na formação de Ps:

Na seção anterior, estudamos exclusivamente a formação do positrônio (Ps) no espalhamento e^+ -He usando a aproximação de close coupling. A motivação do trabalho

nesta seção é estudar o espalhamento elástico e inelásticos do hélio pelo pósitron usando a CCA. Também incluímos os canais de formação de Ps na presente descrição para ver o efeito deste canais no espalhamento elástico e inelástico do hélio. Neste caso, como o threshold de rearrangement e como a formação de Ps é um processo significante de competição, negligências podem ser inadequadas.

Aqui apresentamos resultados para os três conjuntos de bases:

(C) CCA de três estados: $\text{He}(1s, 2s, 2p)$

(E) CCA de cinco estados: $\text{He}(1s, 2s, 2p, 3s, 3p)$

(N) CCA de oito estados: $\text{He}(1s, 2s, 2p, 3s, 3p) + \text{Ps}(1s, 2s, 2p)$

A seção de choque elástica integrada para o espalhamento $e^+\text{-He}$ obtida nos presentes cálculos da CCA são mostradas na fig. 23. Comparamos essas seções de choque com os cálculos de CCA de três estados de Willis et al [78] e de oito estados de Hewitt et al [76]. Apresentamos resultados de CCA de três estados para bases (C) em muito bom acordo com os de Willis et al. Todavia, no presente modelo de CCA de oito estados (N), a adição de canais de formação de Ps diminui a seção de choque transversal elástica por 2 – 3 %. As mudanças na seção de choque elástica devida a adição dos estados do $\text{He}(3s)$ e $\text{He}(3p)$ no conjunto de base é quase negligenciável. Assim, não plotamos os resultados da CCA de cinco estados separadamente.

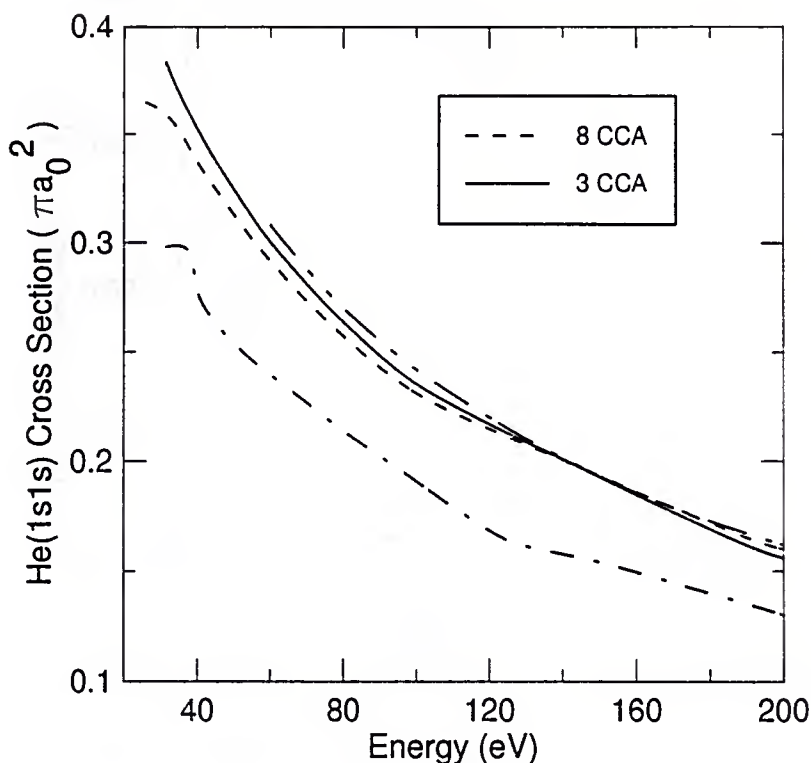


Fig. 23 Seção de choque do ângulo integrado (em unidades de πa_0^2) para diferentes modelos: CCA de oito estados [76] (linha pontilhada-tracejada), cálculo de CCA de três estados [98] (linha tracejada e triplo pontilhada), em diferentes energias do pósitron incidente. As legendas para as curvas do presente cálculo são dados na figura.

Mostramos os resultados das seções de choque para a transição dos estados $\text{He}(1s2s)$, e $\text{He}(1s2p)$ nas cinco mais baixas ondas parciais para energias do pósitron incidente até 200 eV nas figs. 24 e 25, respectivamente. Na região de energia média, as seções de choque do $\text{He}(1s2s)$ e $\text{He}(1s2p)$ são dominadas pelas ondas parciais $J = 2, 3$ e 4. Em energias mais altas, outras ondas parciais se tornam importantes. Para a excitação do $\text{He}(1s2p)$ a contribuição da onda parcial $J = 0$ é a menor de todas as energias.

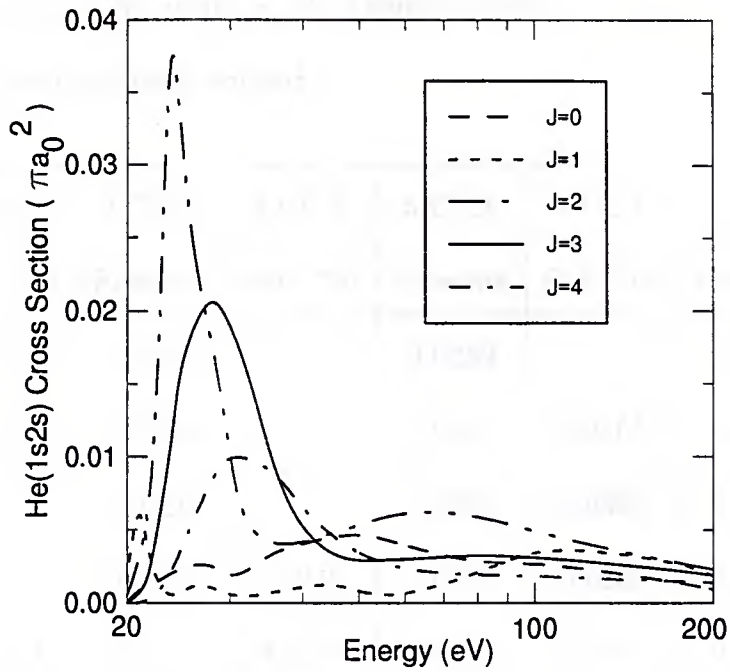


Fig. 24 Seção de choque de excitação do He(1s2s) (em unidades de πa_0^2) nas cinco menores ondas parciais em diferentes energias do pósitron incidente.

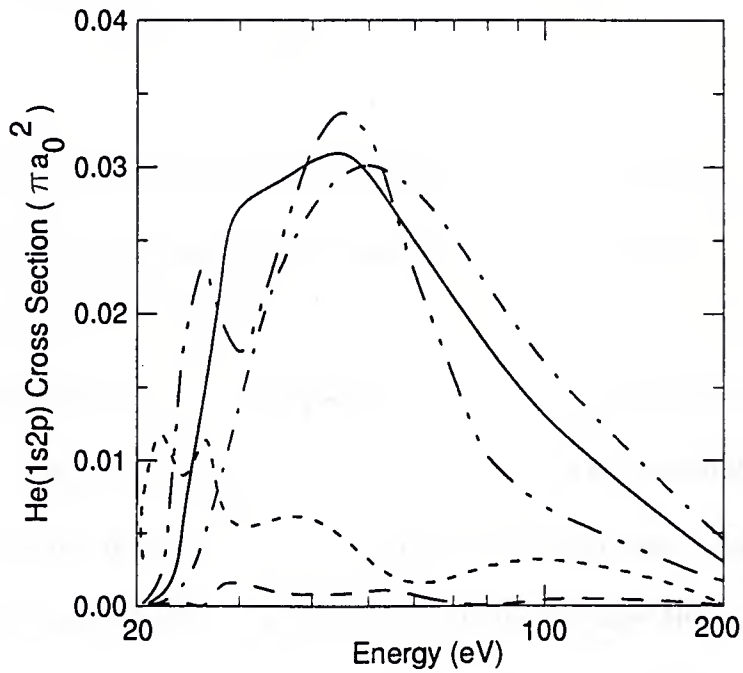


Fig. 25 Seção de choque de excitação do He(1s2p) (em unidades de πa_0^2) nas cinco menores ondas parciais em diferentes energias do pósitron incidente.

TABELA 2. Seção de excitação do ângulo integrado He(1s2s) para diferentes energias do pósitron incidente em πa_0^2

Energia eV	DWA Ref. [99]	3 CCA Presente	3 CCA Ref. [78]	5 CCA Presente	5 CCA Ref. [98]	8 CCA Presente	8 CCA Ref. [76]
31.3		0.0233		0.0259		0.0422	
40	0.0128	0.0306		0.0316	0.0365	0.0286	0.0449
50		0.0320		0.0326	0.0385	0.0241	
60	0.0157	0.0306	0.0349	0.0311	0.0369	0.0221	
80	0.0153	0.0261	0.0309	0.0265	0.0317	0.0209	0.0310
100	0.0142	0.0218	0.0267	0.0225	0.0268	0.0199	0.0240
150	0.0113	0.0154	0.0188	0.0156	0.0187	0.0134	0.0215
200		0.0118	0.0143	0.0116	0.0141	0.0107	0.0161

Nas Tabelas 2 e 3 reportamos as seções de choque de ângulo integrado para He(1s2s) e He(1s2p) do cálculo de CCA para conjunto de base (C), (E) e (N) mencionado anteriormente e resultados de outros estudos teóricos. As seções obtidas com estes conjuntos de base são comparadas com os cálculos de onda distorcida de Parcell et al [99, 100], e cálculos de CCA de três e cinco estados de Willis et al [78, 98] com mesmo conjunto de bases como (A) e (B), respectivamente, e com o cálculo de CCA de oito estados de Hewitt et al [76] com conjunto de bases He(1s,2s, $\bar{k}s$,2p, $\bar{k}p$) + Ps(1s,2s,2p). Seções de choque para transição dos estados He(1s3s) e He(1s3p) são muito menores e não serão discutidos. Também, não há dados experimentais para estas transições. Os resultados de cinco estado de Willis et al [98] difere de 10-20 % dos resultados presente de CCA de cinco estados no caso do excitação do He(1s2s),

enquanto que, para excitação do He(1s2p) a diferença está em torno de 7%. Então, os resultados presentes para excitação do He(1s2p) estão em melhor acordo com os de Willis et al.

TABELA 3. Seção de excitação do ângulo integrado He(1s2p) para diferentes energias do pósitron incidente em πa_0^2

Energy eV	DWA Ref. [100]	3 CCA Present	3 CCA Ref. [78]	5 CCA Present	5 CCA Ref. [98]	8 CCA Present	8 CCA Ref. [76]
31.3		0.0469		0.0544		0.0816	
40	0.0612	0.0866		0.0944	0.0885	0.1330	0.1240
50	0.0886	0.1170		.1235	0.118	0.1605	
60	0.105	0.1324	0.128	0.1396	0.134	0.1621	
80	0.119	0.1430	0.139	0.1467	0.144	0.1565	0.195
100	0.121	0.1429	0.139	0.1457	0.143	0.1524	0.185
150	0.108	0.124	0.123	0.1246	0.126	0.1247	0.158
200		0.1089	0.109	0.1091	0.109	0.1077	0.135

Na fig. 26 mostramos a seção de choque total de excitação para energias do pósitron incidente até 100 eV para diferentes modelos. Comparamos os presentes cálculos com os pontos experimentais da ref. [45, 46], cálculo de onda distorcida da ref. [99, 100] e cálculos de CCA da refs.[76, 78, 98]. Na fig. 27 exibimos as seções de excitação para as bases (C) e (E) no regime de baixas energias para comparar com os experimentos das refs. [45, 47]. O acordo dos cálculos presente com os experimentos é bom com exceção de altas energias (> 60 eV). O cálculo de onda distorcida, como esperado, é bom para altas energia. Os cálculos de Willis et

al. estão em bom acordo com os presentes cálculos de CCA de três e cinco estados.

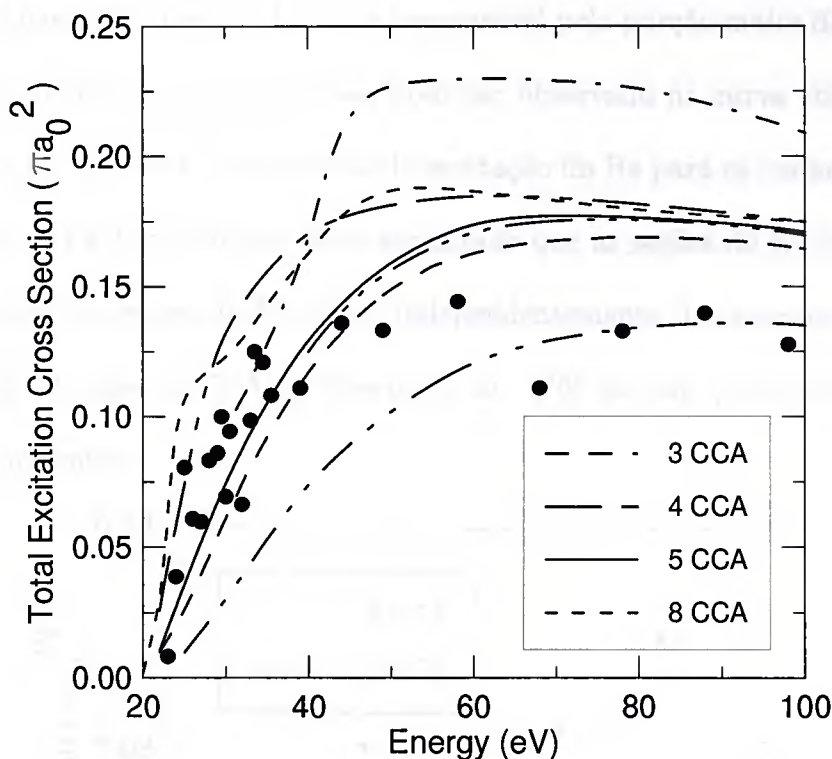


Fig. 26 Seção de choque total de excitação em ondas parciais somadas (em unidades de πa_0^2) do He para diferentes modelos: CCA de oito estados [76] (linha pontilhada-tracejada), cálculo de onda distorcida da ref. [99, 100] (linha tracejada e duplo pontilhada), cálculo de CCA de cinco estados [98] (linha tracejada e triplo pontilhada), pontos experimentais da ref. [45] (círculos sólidos), em diferentes energias do pósitron incidente. As legendas para as curvas do presente cálculo são dados na figura.

Todavia, a inclusão dos canais de formação de Ps tem um significativo efeito nas seções de excitação total como pode ser visto na fig. 26; a baixas energias (abaixo de 80 eV) as seções de choque total de excitação do He mudam por 10–30 % enquanto acima de 80 eV as mudanças permanecem extremamente pequenas. Das tabelas 1 e 2 encontramos que a inclusão dos canais de formação de Ps nos conjuntos de bases reduzem a as seções do He(1s2s) acima de 40 eV enquanto que o acréscimo da

seção do $\text{He}(1s2p)$ em todas as energias. Entre os três estados de Ps incluídos no conjunto de base (N), o estado $\text{Ps}(1s)$ é responsável pela porção maior das mudanças na seção de choque de excitação. Isso pode ser observado na curva etiquetada por “4 CCA” na fig. 26 que é a seção total de excitação do He para os conjuntos de base $\text{He}(1s,2s,2p) + \text{Ps}(1s)$. Todavia, deve ser notado que as seções do $\text{He}(1s2p)$ sempre dominam sobre as seções do $\text{He}(1s2s)$, independentemente das energias incidentes. As seções de choque de CCA de Hewitt et al. [76] são um pouco diferentes dos resultados presentes.

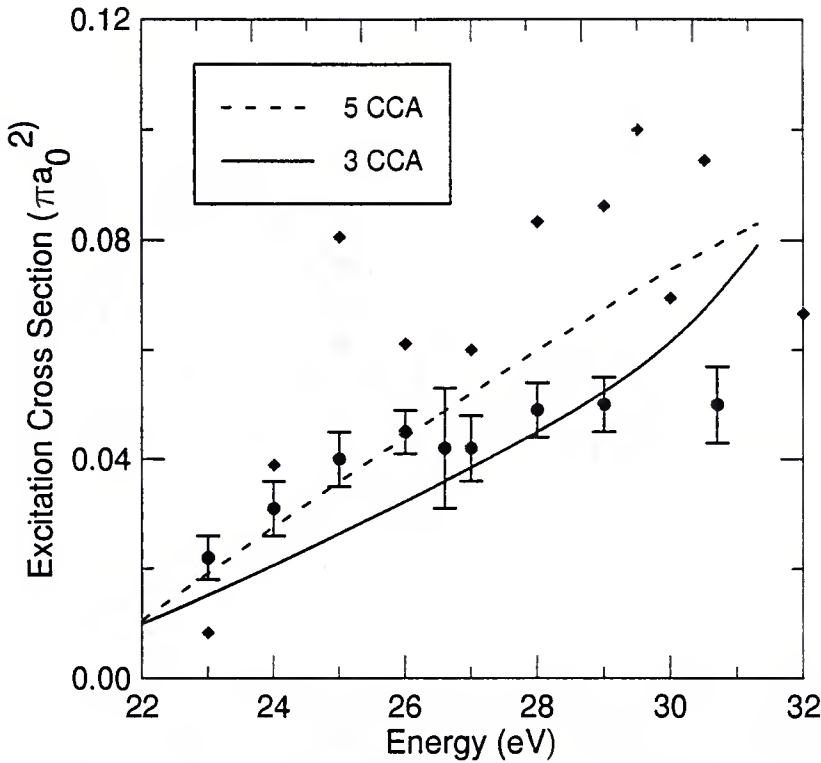


Fig. 27 Seção de choque total em ondas parciais somadas (em unidades de πa_0^2) em baixas energias: quadrados sólidos, ref. [49]; círculos sólidos, ref. [51]. As legendas das curvas são dos cálculos presente são dadas na figura.

Para ter uma melhor idéia sobre os processos de excitação, exibimos a partição da seção na fig. 28. Aqui, usamos as seções elástica e de excitação para diferentes estado para os conjuntos de bases (N). A curva mais baixa, etiquetada por 1, é a

seção elástica pura. As curvas 2 e 3 denotam a soma das seções elástica e de excitação para He(1s2s) e a soma de elástica e He(1s2s)+He(1s2p), respectivamente. Desde que a contribuição de dos estados He(3s) e He(3p) para a seção total de excitação é muito pequena, não plotaremos separadamente. Assim, nas curvas 4 plotamos a soma da elástica total e excitação total, que incluye excitações dos níveis $n=2$ e 3 do He. A dominância da contribuição do estado He(2p) é evidente na figura. A seções de excitação presentes estão em bom acordo com os pontos experimentais do trabalho de Campeanu et al [101].

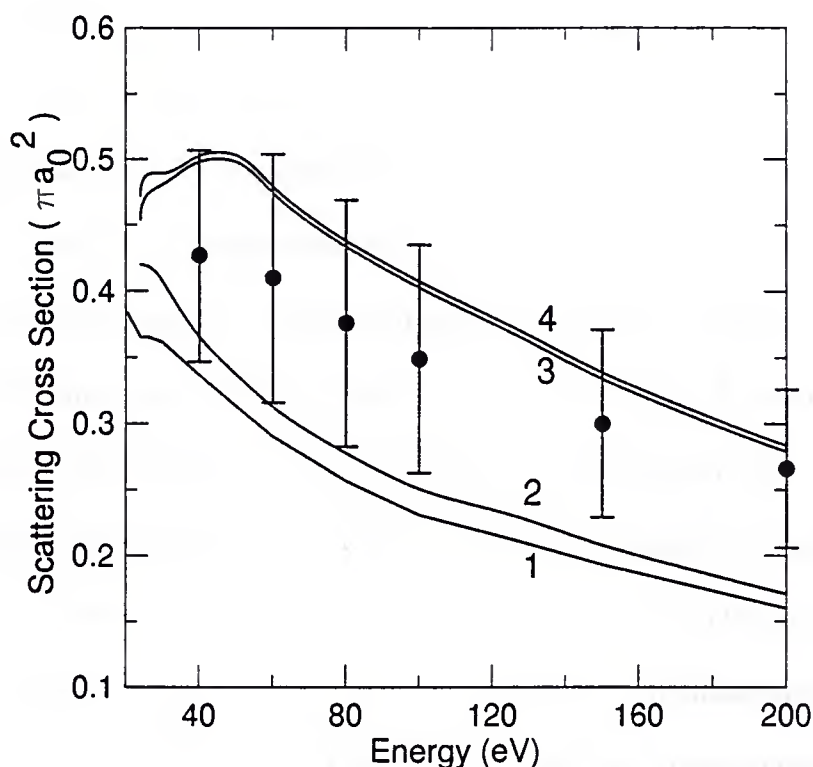


Fig. 28 Seção de choque total elástica e de excitação do ângulo integrado (em unidade de πa_0^2) para diferentes energias incidentes usando o esquema de CCA de oito estado. A linha etiquetada por 1 é a seção de choque total elástica. As linhas 2, 3 e 4 são para a excitação elástica mais He(1s2s), total elástica mais He(1s2s,1s2p) excitation e elástica mais excitação. Os pontos experimentais estão na tabela 2 da ref. [101]

Capítulo 4

Conclusão

Na presente tese temos investigado o espalhamento e^+ -He usando a versão bicanal da aproximação close coupling no espaço de momento (CCA) de 0 a 300 eV. Temos empregado uma função de onda realística do átomo de hélio, tratando os elétrons do alvo da mesma maneira e escolhendo um função de onda exata para o átomo Ps. A literatura revela que o parâmetros de espalhamento a energias baixas e médias são muito sensíveis a função de onda empregada. Além disso, é sabido que o canal de captura tem um papel crucial na previsão dos parâmetros de espalhamento a energias baixas e médias [80, 102, 103]. Pelo nosso conhecimento, este é o primeiro cálculo usando a versão bicanal do CCA onde o próprio tratamento de dois elétrons é considerado. Todos os trabalhos de estado acoplado bicanal em átomos de dois elétrons tem usado modelos de um elétron. No caso de espalhamento e^+ -átomo, mesmo em modelos de um elétron, a dificuldade enfrentada pelos teóricos é a resolução e implementação, nas equações acopladas, formação dos kernels de positrônio que descrevem como o positrônio é formado em seus diferentes estados pela captura do elétron alvo. Computacionalmente, este é um problema muito mais difícil do que qualquer outro problema relacionado a espalhamento elétron átomo. Em trabalhos de modelos de um elétron para sistema explícitos de dois elétrons, que é usado aqui,

passamos a um novo nível de complicação. Com alvos de dois elétrons temos que levar em conta, não somente formação de kernels de positrônio, mas também uma classe mais complicada de objetos — o kernel de troca de positrônio. A presença de dois elétrons significa que, no canal de formação de positrônio, o positrônio formado pode trocar seus elétrons com os que permanecem no íon atômico. É este processo físico que leva ao aparecimento do kernel de troca de positrônio. Uma vez que esse processo envolve a troca simultânea de dois elétrons entre dois diferentes centros, o positrônio e o átomo, não é surpreendente que os kernels de troca sejam, matematica e computacionalmente, mais complicados do que o a formação dos kernels do positrônio nos quais somente um elétron é transferido entre o átomo e o pósitron. Todavia, temos tido sucesso na criação de um código numérico em Fortran que possa realizar os cálculos de close-coupling considerando qualquer combinação dos primeiros cinco estados do alvo de hélio, i.e. $\text{He}(1s1s)$, $\text{He}(1s2s)$, $\text{He}(1s2p)$, $\text{He}(1s3s)$ and $\text{He}(1s3p)$ e três do positrônio, $\text{Ps}(1s)$, $\text{Ps}(2s)$ e $\text{Ps}(2p)$, no canal final.

Temos testado nossos cálculos em baixa energias através de medidas de deslocamento de fase e torna-se evidente que para encontrar resultados satisfatórios e previsões corretas a inclusão de canais de formação Ps é necessária. Todavia, devemos comentar que deslocamentos de fase a baixa energia deste modelo não são realísticos. A energias muito baixas, as seções de choque totais são muito maiores que as experimentais. Uma correta descrição da polarização pelo inclusão de pseudo-estados pode útil da redução das seções de choque.

Temos sido capazes de estudar o comportamento ressonante do sistema $e^+\text{-He}$ próximo as thresholds. Temos encontrado ressonâncias no espalhamento elástico abaixo do primeiro threshold de excitação do singlete por volta de 19.25 eV, que está

em acordo com estudos anteriores de vários autores. Acima do threshold inelástico, temos encontrado uma aguda ressonância em ambos canais de excitação e formação do positrônio por volta de 30 eV. Em todos os casos, a posição e a largura da ressonância não dependem do número de auto-estados no conjunto base. Para obter a ressonância no canal elástico de estado(s) p é necessária. Por outro lado, para canais inelásticos ambos estados p e Ps são incluídos para ter ressonâncias.

Temos feito um estudo detalhado das seções de choque total e diferencial com os parâmetros coincidentes para o sistema e^+ -He em energias médias usando muitas combinações de auto-estados do hélio e do positrônio mencionados acima. Isso nos deu uma idéia da importância de cada auto-estados adicionado ao esquema de expansão, à razão de convergência dos parâmetros de espalhamento e o efeito do canal de formação do positrônio no espalhamento elástico e excitação do pósitron com hélio. Os presentes resultados são estão em bom acordo com as previsões teóricas e dados medidos.

Temos calculado as seções de choque diferenciais para todos canais elásticos, inelásticos e rearrangement para diferentes energias. Todavia, aqui temos discutido algumas energia selecionadas como 40eV, 60eV, 80 eV, 100 eV e 200 eV para mostrar a tendência geral do sistema e comparar os resultados com outros possíveis. Também temos apresentado os parâmetros coincidentes, λ e χ .

Temos empregado o presente esquema CCA para estudar o canal de formação do positrônio exclusivamente com objetivo de ver como tal esquema descreve a formação Ps . Temos nos restringido ao intervalo de energia de 17-200 eV e apresentados resultados para a formação do positrônio para os estados fundamental ($n=1$) e excitado ($n=2$) para as primeiras cinco ondas parciais ($l = 0, 1, \dots, 4$). Na região de

gap Öre gap, o presente cálculo está em bom acordo com o recente cálculo variacional Kohn de VanReeth e Humberston [73] bem como os resultados experimentais [49]. Na região de energia média, até a energia do pósitron incidente de 200 eV, a presente seção de choque total da formação de Ps está em muito bom acordo com o experimento [48] e o cálculo CCA da ref. [76].

Finalmente temos apresentado um estudo detalhado dos processos elástico e de excitação no sistema e^+ -He e o efeito do canal de formação de Ps nestes mesmos processos. Na região de energia média, a presente seção total de excitação está em grande acordo com os experimentos [45, 46] e cálculos CCA das refs. [76, 78, 98]. Temos visto que a inclusão dos canais de formação de Ps, $Ps(1s, 2s, 2p)$ tem um efeito significativo nas seções de choque de excitação e elástica. De todos os canais de formação de Ps, os efeitos do estado $Ps(1s)$ é o mais pronunciado.

Há várias possibilidades de melhoria deste modelo pela adição de mais auto-estados ou pseudo-estados em ambos os canais. Pelo acréscimo de auto-estados na base entende-se um aumento da dimensão da matriz a qual, por sua vez, gera mais dificuldades computacionais. Necessitamos computadores mais potentes e tempo. Se o método de espaço de momento ou espaço de configuração são empregados, mais tempo é consumido para resolver a equação integral acoplada e este limita o tamanho da base que pode ser usada na prática. Todavia, com a disponibilidade de supercomputadores, a solução para esse problema não é uma impossibilidade. Nossa pretensão desta investigação foi o estudo sistema pósitron-hélio de uma forma realística e temos tido sucesso em produzir resultados convincentes. Esperamos que a investigação continue no futuro com mais avanços e para muitos outros átomos.

Appendix A

Equações integrais acopladas usadas no presente trabalho

As expressões explícitas para duas das onze equações integrais acopladas que são necessárias pra resolver os cálculos a aproximação de close coupling de oito estados do espalhamento e^+ -He são dadas abaixo. Os exemplos presentes são para a matriz t , que corresponde ao espalhamento elástico do pósitron com o He(1s), $T_{11}^J(10Jk'_{1s}; 10Jk_{1s})$ e o rearrangement com formação de positrônio no estado fundamental do He(1s), $T_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 10Jk_{1s})$, respectivamente. As outras nove equações que vão corresponder à excitação do alvo de hélio e formação de Ps nos estados excitados pode ser escritas da mesma maneira.

$$\begin{aligned} 1. \quad & T_{11}^J(10Jk'_{1s}; 10Jk_{1s}) = B_{11}^J(10Jk'_{1s}; 10Jk_{1s}) \\ & - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{1s}^2 - i\epsilon} B_{11}^J(10Jk'_{1s}; 10Jk'') T_{11}^J(10Jk''; 10Jk_{1s}) \\ & - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{2s}^2 - i\epsilon} B_{11}^J(10Jk'_{1s}; 20Jk'') T_{11}^J(20Jk''; 10Jk_{1s}) \\ & - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{2p}^2 - i\epsilon} B_{11}^J(10Jk'_{1s}; 21J + 1k'') T_{11}^J(21J + 1k''; 10Jk_{1s}) \\ & - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{2p}^2 - i\epsilon} B_{11}^J(10Jk'_{1s}; 21J - 1k'') T_{11}^J(21J - 1k''; 10Jk_{1s}) \\ & - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{3s}^2 - i\epsilon} B_{11}^J(10Jk'_{1s}; 30Jk'') T_{11}^J(30Jk''; 10Jk_{1s}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{3p}^2 - i\epsilon} B_{11}^J(10Jk'_{1s}; 31J + 1k'') T_{11}^J(31J + 1k''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{3p}^2 - i\epsilon} B_{11}^J(10Jk'_{1s}; 31J - 1k'') T_{11}^J(31J - 1k''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{Ps(1s)}^2 - i\epsilon} B_{12}^J(10Jk'_{1s}; 10Jk'') T_{21}^J(10Jk''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{Ps(2s)}^2 - i\epsilon} B_{12}^J(10Jk'_{1s}; 20Jk'') T_{21}^J(20Jk''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{Ps(2p)}^2 - i\epsilon} B_{12}^J(10Jk'_{1s}; 21J + 1k'') T_{21}^J(21J + 1k''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{Ps(2p)}^2 - i\epsilon} B_{12}^J(10Jk'_{1s}; 21J - 1k'') T_{21}^J(21J - 1k''; 10Jk_{1s}).
\end{aligned} \tag{A.1}$$

$$\begin{aligned}
2. \quad & T_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 10Jk_{1s}) = B_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{Ps(1s)}^2 - i\epsilon} B_{22}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 10Jk'') T_{21}^J(10Jk''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{Ps(2s)}^2 - i\epsilon} B_{22}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 20Jk'') T_{21}^J(20Jk''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{Ps(2p)}^2 - i\epsilon} B_{22}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 21J + 1k'') T_{21}^J(21J + 1k''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{Ps(2p)}^2 - i\epsilon} B_{22}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 21J - 1k'') T_{21}^J(21J - 1k''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{1s}^2 - i\epsilon} B_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 10Jk'') T_{11}^J(10Jk''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{2s}^2 - i\epsilon} B_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 20Jk'') T_{11}^J(20Jk''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{2p}^2 - i\epsilon} B_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 21J + 1k'') T_{11}^J(21J + 1k''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{2p}^2 - i\epsilon} B_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 21J - 1k'') T_{11}^J(21J - 1k''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{3s}^2 - i\epsilon} B_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 30Jk'') T_{11}^J(30Jk''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{3p}^2 - i\epsilon} B_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 31J + 1k'') T_{11}^J(31J + 1k''; 10Jk_{1s}) \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{k'' dk''}{k''^2 - k_{3p}^2 - i\epsilon} B_{21}^J(10Jk'_{Ps(1s)}; 31J - 1k'') T_{11}^J(31J - 1k''; 10Jk_{1s}).
\end{aligned} \tag{A.2}$$

B_{22}^J representa o espalhamento do positrônio do íon. Deveríamos notar que o elemento de matriz correspondente ao espalhamento direto B_{22}^J se anula, tendo a mesma paridade das funções de onda no estado inicial e final. Todavia, no caso presente B_{22}^J sobrevive devido a troca de elétrons entre Ps e o íon hélio.

Appendix B

Deslocamentos de fase elásticos a baixas energias para diferentes conjuntos de bases

A importância dos deslocamentos de fase no estudo da convergência do modelo é discutida com respectivas figuras na seção 4.4.1. No presente apêndice os valores numéricos dos deslocamentos de fase são dados na em forma de tabela para ondas S, P e D para diferentes conjuntos de bases usados na investigação.

B.1 Deslocamento de fase elástico de onda S

B.1.1 Conjunto de bases sem canal de formação de Ps

k (a.u)	Energia	Base (A)	Base (B)	Base (C)	Base (D)	Base (E)
0.1	0.136	-0.426-01	-0.421-01	-0.312-01	-0.311-01	-0.291-01
0.2	0.544	-0.847-01	-0.837-01	-0.676-01	-0.674-01	-0.646-01
0.3	1.224	-0.126+00	-0.124+00	-0.106+00	-0.106+00	-0.103+00
0.4	2.176	-0.166+00	-0.164+00	-0.146+00	-0.145+00	-0.142+00
0.5	3.400	-0.204+00	-0.202+00	-0.184+00	-0.184+00	-0.181+00
0.6	4.896	-0.240+00	-0.237+00	-0.222+00	-0.221+00	-0.218+00
0.7	6.664	-0.275+00	-0.271+00	-0.257+00	-0.256+00	-0.254+00
0.8	8.704	-0.307+00	-0.303+00	-0.290+00	-0.289+00	-0.287+00
0.9	11.016	-0.336+00	-0.332+00	-0.321+00	-0.320+00	-0.318+00
1.0	13.600	-0.360+00	-0.359+00	-0.349+00	-0.348+00	-0.346+00

(A) He(1s1s);

(B) He(1s1s,1s2s); (C) He(1s1s, 1s2s, 1s2p);

(D) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s); (E) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p).

B.1.2 Conjunto de base com canal de formação de Ps

k (a.u)	Base (I)	Base (J)	Base (K)	Base (L)	Base (M)	Base (N)
0.1	-0.675-02	-0.111-01	-0.304-02	-0.105-01	-0.253-02	0.220-01
0.2	-0.314-01	-0.328-01	-0.281-01	-0.320-01	-0.273-01	-0.108-01
0.3	-0.618-01	-0.642-01	-0.595-01	-0.632-01	-0.586-01	-0.507-01
0.4	-0.976-01	-0.102+00	-0.960-01	-0.101+00	-0.949-01	-0.906-01
0.5	-0.138+00	-0.143+00	-0.136+00	-0.142+00	-0.135+00	-0.132+00
0.6	-0.180+00	-0.185+00	-0.178+00	-0.183+00	-0.176+00	-0.174+00
0.7	-0.221+00	-0.225+00	-0.218+00	-0.223+00	-0.217+00	-0.215+00
0.8	-0.260+00	-0.262+00	-0.257+00	-0.261+00	-0.255+00	-0.254+00
0.9	-0.296+00	-0.297+00	-0.292+00	-0.296+00	-0.291+00	-0.290+00
1.0	-0.329+00	-0.329+00	-0.325+00	-0.327+00	-0.323+00	-0.322+00

(I) He(1s1s, 1s2s) + Ps(1s,2s);

(J) He(1s1s, 1s2s, 1s2p) + Ps(1s);

(K) He(1s1s, 1s2s, 1s2p) + Ps(1s, 2s);

(L) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + Ps(1s);

(M) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + Ps(1s, 2s);

(N) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + Ps(1s, 2s, 2p)

B.2 Deslocamento de fase elástico em onda P

B.2.1 Conjunto de base sem o canal de formação de Ps

k (a.u)	Energy	Basis (A)	Basis (B)	Basis (C)	Basis (D)	Basis (E)
0.1	0.136	-0.805-04	-0.788-04	0.730-03	0.732-03	0.884-03
0.2	0.544	-0.630-03	-0.617-03	0.203-02	0.203-02	0.246-02
0.3	1.224	-0.206-02	-0.201-02	0.276-02	0.276-02	0.349-02
0.4	2.176	-0.465-02	-0.455-02	0.221-02	0.223-02	0.326-02
0.5	3.400	-0.858-02	-0.839-02	-0.592-04	-0.303-04	0.128-02
0.6	4.896	-0.139-01	-0.136-01	-0.418-02	-0.413-02	-0.258-02
0.7	6.664	-0.204-01	-0.200-01	-0.999-02	-0.993-02	-0.818-02
0.8	8.704	-0.281-01	-0.275-01	-0.172-01	-0.171-01	-0.152-01
0.9	11.016	-0.368-01	-0.360-01	-0.257-01	-0.255-01	-0.235-01
1.0	13.600	-0.462-01	-0.451-01	-0.350-01	-0.348-01	-0.326-01

(A) He(1s1s);

(B) He(1s1s,1s2s);

(C) He(1s1s, 1s2s, 1s2p);

(D) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s);

(E) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p).

B.2.2 Conjunto de bases com canal de formação de Ps

k (a.u)	Base (I)	Base (J)	Base (K)	Base (L)	Base (M)	Base (N)
0.1	0.213-02	0.107-02	0.284-02	0.110-02	0.286-02	0.689-02
0.2	0.583-02	0.436-02	0.778-02	0.444-02	0.785-02	0.184-01
0.3	0.788-02	0.901-02	0.109-01	0.913-02	0.110-01	0.206-01
0.4	0.105-01	0.132-01	0.142-01	0.134-01	0.144-01	0.207-01
0.5	0.126-01	0.152-01	0.168-01	0.155-01	0.170-01	0.209-01
0.6	0.123-01	0.141-01	0.167-01	0.144-01	0.169-01	0.197-01
0.7	0.887-02	0.100-01	0.134-01	0.104-01	0.137-01	0.160-01
0.8	0.264-02	0.341-02	0.721-02	0.381-02	0.760-02	0.999-02
0.9	-0.581-02	-0.515-02	-0.121-02	-0.469-02	-0.757-03	0.201-02
1.0	-0.158-01	-0.151-01	-0.112-01	-0.145-01	-0.107-01	-0.722-02

(I) $\text{He}(1s1s, 1s2s) + \text{Ps}(1s, 2s);$

(J) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p) + \text{Ps}(1s);$

(K) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p) + \text{Ps}(1s, 2s);$

(L) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s);$

(M) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s);$

(N) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s, 2p)$

B.3 Deslocamento de fase elástico em onda D

B.3.1 Conjunto de bases sem canal de formação de Ps

k (a.u)	Energia	Base (A)	Base (B)	Base (C)	Base (D)	Base (E)
0.1	0.136	-0.107-06	-0.105-03	0.139-03	0.140-03	0.172-03
0.2	0.544	-0.334-05	-0.327-05	0.541-03	0.542-03	0.657-03
0.3	1.224	-0.243-04	-0.238-04	0.114-02	0.114-02	0.136-02
0.4	2.176	-0.961-04	-0.941-04	0.189-02	0.189-02	0.223-02
0.5	3.400	-0.272-03	-0.266-03	0.260-02	0.261-02	0.308-02
0.6	4.896	-0.618-03	-0.604-03	0.316-02	0.316-02	0.378-02
0.7	6.664	-0.121-02	-0.118-02	0.345-02	0.346-02	0.423-02
0.8	8.704	-0.210-02	-0.205-02	0.338-02	0.338-02	0.431-02
0.9	11.016	-0.336-02	-0.328-02	0.286-02	0.287-02	0.396-02
1.0	13.600	-0.501-02	-0.489-02	0.187-02	0.189-02	0.315-02

(A) He(1s1s);

(B) He(1s1s,1s2s);

(C) He(1s1s, 1s2s, 1s2p);

(D) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s);

(E) He(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p).

B.3.2 Conjunto de bases com canal de formação de Ps

k (a.u)	Base (I)	Base (J)	Base (K)	Base (L)	Base (M)	Base (N)
0.1	0.204-03	0.141-03	0.342-03	0.110-02	0.286-02	0.689-02
0.2	0.167-02	0.610-03	0.218-02	0.444-02	0.785-02	0.184-01
0.3	0.259-02	0.154-02	0.356-02	0.913-02	0.110-01	0.206-01
0.4	0.290-02	0.306-02	0.431-02	0.134-01	0.144-01	0.207-01
0.5	0.383-02	0.508-02	0.563-02	0.155-01	0.170-01	0.209-01
0.6	0.559-02	0.726-02	0.765-02	0.144-01	0.169-01	0.197-01
0.7	0.770-02	0.936-02	0.999-02	0.104-01	0.137-01	0.160-01
0.8	0.970-02	0.112-01	0.122-01	0.381-02	0.760-02	0.999-02
0.9	0.113-01	-0.126-01	-0.141-01	-0.469-02	-0.757-03	0.201-02
1.0	0.124-01	-0.135-01	-0.154-01	-0.145-01	-0.107-01	-0.722-02

(I) $\text{He}(1s1s, 1s2s) + \text{Ps}(1s, 2s);$

(J) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p) + \text{Ps}(1s);$

(K) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p) + \text{Ps}(1s, 2s);$

(L) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s);$

(M) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s);$

(N) $\text{He}(1s1s, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p) + \text{Ps}(1s, 2s, 2p)$

Appendix C

Algumas relações e identidades matemáticas

Aqui apresentamos algumas relações ou identidades que são essenciais para a resolução das amplitudes de espalhamento.

Transformada de Fourier:

$$e^{\lambda r} = \frac{\lambda}{\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{(q^2 + \lambda^2)^2} d\mathbf{q} \quad (\text{C.1})$$

$$\frac{e^{\lambda r}}{r} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{q^2 + \lambda^2} d\mathbf{q} \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}}{q^2} d\mathbf{q} \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{q^2} d\mathbf{q} \quad (\text{C.4})$$

Integrais de Bethe[104, 105]:

$$\int \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r} d\mathbf{r} = \frac{4\pi}{k^2} \quad (\text{C.5})$$

$$\int \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1}}{r_{12}} d\mathbf{r}_1 = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2} \quad (\text{C.6})$$

Função Delta:

$$\int e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}) \quad (\text{C.7})$$

$$\int f(x) \delta(x - a) dx = f(a) \quad (\text{C.8})$$

Intégrais de Cheshire[106] :

$$\int \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{[(\mathbf{k} + \mathbf{p})^2 + \gamma^2]^2 [(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 + \nu^2]} d\mathbf{k} = -\frac{\pi^2}{2} \int_0^1 x e^{i\mathbf{r} \cdot \Lambda} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) \frac{1}{\mu} e^{\mu r} dx. \quad (\text{C.9})$$

$$\int \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{[(\mathbf{k} + \mathbf{p})^2 + \gamma^2]^2 [(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 + \nu^2]^2} d\mathbf{k} = -\frac{\pi^2}{4} \int_0^1 x e^{i\mathbf{r} \cdot \Lambda} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial \mu} \right)^2 \frac{1}{\mu} e^{\mu r} dx. \quad (\text{C.10})$$

onde,

$$\Lambda = x\mathbf{p} + (1-x)\mathbf{q} \quad (\text{C.11})$$

$$\mu^2 = x\gamma^2 + \mu^2(1-x) + x(1-x)(p^2 + q^2) \quad (\text{C.12})$$

Appendix D

Solução da amplitude de espalhamento de Born,

$$f^B(\mathbf{k}', \mathbf{k})$$

D.1 Amplitude de espalhamento para a excitação do He(1s1s) para o He(1s2s) por impacto do pósitron:

$$f_{11}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = -\frac{1}{2\pi} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3} \psi_{2s}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left(\frac{2}{r_3} - \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}} \right) \psi_{1s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \quad (\text{D.1})$$

onde $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$. A contribuição do primeiro termo do potencial, $2/r_3$, para a integral acima se anula devido a ortogonalidade de $\psi_{1s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ e $\psi_{2s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Daí, a $f_{11}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ se reduz a

$$\begin{aligned} f_{11}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) &= \frac{1}{2\pi} \int \psi_{2s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3} \left[\frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \right] \psi_{1s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \\ &= \frac{1}{2\pi} (\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

onde,

$$\mathbf{F}_1 = \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3} \psi_{2s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{13}} \psi_{1s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \quad (\text{D.3})$$

e

$$\mathbf{F}_2 = \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3} \psi_{2s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{23}} \psi_{1s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \quad (\text{D.4})$$

Uma vez que $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$ são variáveis mudas, $\mathbf{F}_1$ e $\mathbf{F}_2$ tem o mesmo valor. Então

$f_{11}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ se reduz a

$$f_{11}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \frac{2\mathbf{F}_1}{2\pi} = \frac{\mathbf{F}_1}{\pi} \quad (\text{D.5})$$

Consideremos agora a integral F_1 . Usando a função de onda do hélio, apresentada na seção 3.2.1, temos

$$F_1 = N \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3} \left[u_{1s}^+(\mathbf{r}_1) v_{2s}(\mathbf{r}_2) + u_{1s}^+(\mathbf{r}_2) v_{2s}(\mathbf{r}_1) \right] \frac{1}{r_{13}} u_{1s}(\mathbf{r}_1) u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \quad (D.6)$$

De novo, devido a ortogonalidade de $u_{1s}(\mathbf{r})$ e $v_{2s}(\mathbf{r})$, a contribuição do primeiro termo da função de onda do He(1s2s) vai a zero e F_1 se reduz

$$F_1 = N \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3} u_{1s}^+(\mathbf{r}_2) v_{2s}(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{13}} u_{1s}(\mathbf{r}_1) u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \quad (D.7)$$

que pode ser reescrito como

$$F_1 = N \mathcal{M} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3} v_{2s}(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{13}} u_{1s}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \quad (D.8)$$

onde,

$$\mathcal{M} = \int u_{1s}^+(\mathbf{r}_2) u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \quad (D.9)$$

Usando as equações (3.18) e (3.20) para $u_{1s}(\mathbf{r}_2)$ e $u_{1s}^+(\mathbf{r}_2)$, respectivamente temos,

$$\mathcal{M} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{i=1}^2 a_i \int e^{-\chi_i r_2} d\mathbf{r}_2 \quad (D.10)$$

com $\chi_i = Z + \lambda_i$. Agora usando as equações (C.1) e (C.7) resolvemos a integral como

$$\mathcal{M} = 2 \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^3} \quad (D.11)$$

Voltemos agora a integral F_1 . Usando as expressões para $u_{1s}(\mathbf{r}_1)$ e $v_{2s}(\mathbf{r}_1)$ das equações 3.18 e 3.21 podemos escrever F_1 da seguinte forma

$$F_1 = \frac{N \mathcal{M}}{4\pi} \sum_{i=1}^2 a_i \sum_{j=1}^2 b_j \int r^{j-1} e^{\lambda_i r} e^{-\beta_j r} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_3}}{r_{13}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_3 \quad (D.12)$$

que, com o uso da equação (C.6) e (C.1) pode ser reescrita como

$$F_1 = \frac{N \mathcal{M}}{\pi^2 k^2} \sum_{i=1}^2 a_i \sum_{j=1}^2 b_j \left(-\frac{\partial}{\partial \beta_j} \right)^{j-1} \xi_{ij} \int \frac{e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1}}{(p^2 + \xi_{ij}^2)^2} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{p} \quad (D.13)$$

onde $\xi_{ij} = \lambda_i + \beta_j$ e $\left(-\frac{\partial}{\partial \beta_j}\right)^{j-1} \equiv r^{j-1}$. Agora podemos resolver a integral facilmente usando as equações (C.7) e (C.8) como,

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 &= \frac{8\pi}{k^2} N \mathcal{M} \sum_{i=1}^2 a_i \sum_{j=1}^2 b_j \left(-\frac{\partial}{\partial \beta_j}\right)^{j-1} \xi_{ij} \frac{1}{(k^2 + \xi_{ij}^2)^2} \\ &= \frac{8\pi}{k^2} N \mathcal{M} \sum_{i=1}^2 a_i \left[\frac{b_1 \xi_{i1}}{k^2 \rho_i^2} - \frac{b_2}{k^2 \omega_i^2} + \frac{4b_2 \xi_{i2}^2}{k^2 \omega_i^3} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

com $\rho_i = k^2 + \xi_{i1}^2$ e $\omega_i = k^2 + \xi_{i2}^2$. Agora, usando a identidade,

$$\frac{1}{(k^2 + \xi^2)^n} = \frac{1}{\xi^{2n} k^2} - \frac{1}{\xi^{2n} (k^2 + \xi^2)} - \frac{1}{\xi^{2(n-1)} (k^2 + \xi^2)^2} - \dots - \frac{1}{\xi^2 (k^2 + \xi^2)^n} \quad (\text{D.15})$$

podemos reduzir $\mathbf{F}_1$ para

$$\frac{8\pi}{k^2} N \mathcal{M} \sum_{i=1}^2 a_i \left[\sum_{k=1}^2 \frac{C_{ik}}{\rho_i^k} + \sum_{n=1}^3 \frac{\mathcal{D}_{in}}{\omega_i^n} \right] \quad (\text{D.16})$$

onde,

$$C_{i1} = -\frac{b_1}{\xi_{i1}^3}, C_{i2} = -\frac{b_1}{\xi_{i1}}$$

$$\mathcal{D}_{i1} = -\frac{3b_2}{\xi_{i2}^4}, \mathcal{D}_{i2} = -\frac{3b_2}{\xi_{i2}^2}, \mathcal{D}_{i3} = -4b_2$$

Os valores dos ξ 's pode ser obtido dos valores de λ 's e β dados na seção 3.2.1.

Portanto, finalmente obtemos,

$$f_{11}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \frac{\mathbf{F}_1}{\pi} = \frac{8}{k^2} N \mathcal{M} \sum_{i=1}^2 a_i \left[\sum_{k=1}^2 \frac{C_{ik}}{\rho_i^k} + \sum_{n=1}^3 \frac{\mathcal{D}_{in}}{\omega_i^n} \right] \quad (\text{D.17})$$

D.2 Amplitude de espalhamento para a formação do Ps(1s) de He(1s1s) pelo impacto do pósitron

$$\begin{aligned}
 f_{21}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) &= -\frac{1}{\pi} \int e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot (\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3)} \eta_{Ps(1s)}^*(\mathbf{r}_{23}) \phi_{He^+}^*(\mathbf{r}_1) \left(\frac{2}{r_3} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{13}} \right) \\
 &\times \psi_{1s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_3} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \\
 &\equiv -\frac{1}{\pi} \int e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot (\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3)} \eta_{Ps(1s)}^*(\mathbf{r}_{23}) \mathcal{A} u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3
 \end{aligned} \tag{D.18}$$

onde temos usado a equação (3.17) para $\psi_{1s}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ e

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A} &= \int \phi_{He^+}^*(\mathbf{r}_1) \left(\frac{2}{r_3} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{13}} \right) u_{1s}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \\
 &\equiv \left(\frac{2}{r_3} - \frac{2}{r_2} \right) \mathcal{M} + \mathcal{B} - \mathcal{C}
 \end{aligned} \tag{D.19}$$

com,

$$\mathcal{M} = \int \phi_{He^+}^*(\mathbf{r}_1) u_{1s}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 = 4\sqrt{Z^3} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^3} \tag{D.20}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{B} &= \phi_{He^+}^*(\mathbf{r}_1) \left(\frac{1}{r_{12}} \right) u_{1s}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \\
 &= 4\sqrt{Z^3} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^3} \left[\frac{1}{r_2} - \frac{e^{-\chi_i r_2}}{r_2} - \frac{\chi_i}{2} e^{-\chi_i r_2} \right]
 \end{aligned} \tag{D.21}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{C} &= \phi_{He^+}^*(\mathbf{r}_1) \left(\frac{1}{r_{23}} \right) u_{1s}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \\
 &= 4\sqrt{Z^3} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^3} \left[\frac{1}{r_3} - \frac{e^{-\chi_i r_3}}{r_3} - \frac{\chi_i}{2} e^{-\chi_i r_3} \right]
 \end{aligned} \tag{D.22}$$

onde, $\chi_i = Z + \lambda_i$.

Para resolver as integrais acima temos usado as equações (3.17), (3.18), (C.1), (C.3), (C.7) e temos considerado a função de onda do íon hélio como

$$\phi_{He^+}(\mathbf{r}_1) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr_1} \tag{D.23}$$

com $Z = 2.0$

Assim, podemos reescrever $\mathcal{A}$ o rearranjando de uma maneira conveniente como

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} &= \left(\frac{2}{r_3} - \frac{2}{r_2} \right) \mathcal{M} + 4\sqrt{z^3} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^3} \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_3} \right) \\
&- 4\sqrt{z^3} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^3} \left[\left(\frac{e^{\chi_i r_2}}{r_2} - \frac{\chi_i r_3}{r_3} \right) + \frac{\chi_i}{2} (e^{-\chi_i r_2} - e^{-\chi_i r_3}) \right] \\
&= \left(\frac{1}{r_3} - \frac{1}{r_2} \right) \mathcal{M} - 4\sqrt{z^3} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^3} \left[\left(\frac{e^{\chi_i r_2}}{r_2} - \frac{\chi_i r_3}{r_3} \right) \right] \\
&- 2\sqrt{z^3} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^2} \left[(e^{-\chi_i r_2} - e^{-\chi_i r_3}) \right]
\end{aligned} \tag{D.24}$$

onde temos usado as equações (D.20) para $\mathcal{M}$. Subsequentemente, $f_{21}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ pode agora ser expresso como

$$\begin{aligned}
f_{21}^B(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) &= -\frac{1}{\pi} \mathcal{M} (\mathcal{I}_1 - \mathcal{I}_2) + \frac{4\sqrt{z^3}}{\pi} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^3} [(\mathcal{I}_3 - \mathcal{I}_4)] \\
&+ \frac{2\sqrt{z^3}}{\pi} \sum_{i=1}^2 \frac{a_i}{\chi_i^2} [(\mathcal{I}_5 - \mathcal{I}_6)]
\end{aligned} \tag{D.25}$$

onde,

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_1 &= \int \eta_{P_s(1s)}^*(\mathbf{r}_{23}) e^{i\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{r}_3} e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_2} \left(\frac{1}{r_3} \right) u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \\
&= 2\sqrt{2}\pi\alpha \sum_{j=1}^2 a_j \lambda_j \int_0^1 dx x(1-x) \left(\frac{1}{\mu_j} \frac{\partial}{\partial \mu_j} \right)^2 \frac{1}{\mu_j} \frac{1}{(S^2 + \mu_j^2)},
\end{aligned} \tag{D.26}$$

com

$$\mu_j^2 = x\lambda_j^2 + (1-x)\alpha^2 + \frac{1}{4}x(1-x)k_f^2. \tag{D.27}$$

e

$$S = \mathbf{k}_i - \frac{1}{2}(1-x)\mathbf{k}_f. \tag{D.28}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_2 &= \int \eta_{P_s(1s)}^*(\mathbf{r}_{23}) e^{i\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{r}_3} e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_2} \left(\frac{1}{r_2} \right) u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \\
&= \frac{8\sqrt{2}\pi\alpha}{(\rho^2 + \alpha^2)^2} \sum_{j=1}^2 a_j \frac{1}{k^2 + \lambda_j^2},
\end{aligned} \tag{D.29}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_3 &= \int \eta_{Ps(1s)}^*(\mathbf{r}_{23}) e^{i\rho \cdot \mathbf{r}_3} e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_2} \left(\frac{e^{\chi_i r_2}}{r_2} \right) u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \\
&= \frac{4\sqrt{2}\pi\alpha}{(\rho^2 + \alpha^2)^2} \sum_{j=1}^2 a_j \frac{1}{k^2 + \omega_{ij}^2},
\end{aligned} \tag{D.30}$$

com $\omega_{ij} = \chi_i + \lambda_j$, λ_j vindo de u_{1s} (eqn. 3.18).

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_4 &= \int \eta_{Ps(1s)}^*(\mathbf{r}_{23}) e^{i\rho \cdot \mathbf{r}_3} e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_2} \left(\frac{e^{\chi_i r_3}}{r_3} \right) u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \\
&= \sqrt{2}\pi\alpha \sum_{j=1}^2 a_j \lambda_j \int_0^1 dx x(1-x) \left(\frac{1}{\mu_j} \frac{\partial}{\partial \mu_j} \right)^2 \frac{1}{\mu_j} \frac{1}{(S^2 + \gamma_{ij}^2)},
\end{aligned} \tag{D.31}$$

com $\gamma_{ij} = \chi_i + \mu_j$. μ_j e S dados pelas equações (D.27) e (D.28), respectivamente.

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_5 &= \int \eta_{Ps(1s)}^*(\mathbf{r}_{23}) e^{i\rho \cdot \mathbf{r}_3} e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_2} e^{\chi_i r_2} u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \\
&= \frac{8\sqrt{2}\pi\alpha}{(\rho^2 + \alpha^2)^2} \sum_{j=1}^2 a_j \frac{\omega_{ij}}{(k^2 + \omega_{ij}^2)^2},
\end{aligned} \tag{D.32}$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_6 &= \int \eta_{Ps(1s)}^*(\mathbf{r}_{23}) e^{i\rho \cdot \mathbf{r}_3} e^{-\frac{1}{2}i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_2} e^{\chi_i r_3} u_{1s}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \\
&= 2\sqrt{2}\pi\alpha \sum_{j=1}^2 a_j \lambda_j \int_0^1 dx x(1-x) \left(\frac{1}{\mu_j} \frac{\partial}{\partial \mu_j} \right)^2 \frac{1}{\mu_j} \frac{\gamma_{ij}}{(S^2 + \gamma_{ij}^2)^2}.
\end{aligned} \tag{D.33}$$

Na solução de todas as seis integrais acima, temos usado todas as identidades dadas no apêndice (C). A função de onda positrônio é tomada da equação (3.28).

Referências

- [1] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A* **117**, 610 (1928); **118** 351 (1928).
- [2] C. D. Anderson, *Phys. Rev*, **43**, 491 (1933).
- [3] P. M. S. Blackett and G. P. S. Occhialine, *Proc. Roy. Soc. A* **139**, 699 (1933).
- [4] Positrons in Solids, ed. P. Hautojarvi (Springer-Verlag, Berlin, 1979).
- [5] R. J. Drachman, *Proc. XIX ICPEAC, Whistler, Canada, 1995*, eds. L. J. Dubé, J. B. A. Mitchell, J. W. McConkey and C. E. Brion (AIP Press, 1995).
- [6] A. D. Stauffer and R. P. McEachran, *Positron(Electron)-Gas scattering*, W. E. Kauppila, T. S. Stein and J. M. Wadehra eds., (World Scientific, Singapore, 1986).
- [7] W. Raith, *Proc. of XX ICPEAC, Vienna, Austria, 1997*, eds. F. Aumayr and H. Winter (World Scientific, Singapore, 1997).
- [8] A. Ore, *Naturvidenskap Rekko No. 9*, Univ i Bergen Arbok (1949).
- [9] P. Chaudhuri, S.K. Adhikari and A. S. Ghosh, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30**, L81 (1997).
- [10] P. Chaudhuri and S.K. Adhikari, *Phys. Rev. A* **57**, 984 (1997)

- [11] P. Chaudhuri and S.K. Adhikari, *Nucl. Phys. A* **631**, 715c(1998)
- [12] P. Chaudhuri and S.K. Adhikari, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31**, 3057 (1998).
- [13] P. Chaudhuri and S.K. Adhikari, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32**, 129 (1999).
- [14] H. S. W. Massey and C. B. O. Mohr, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A136**, 289 (1932)
- [15] K. Smith, R. P. McEachran and P. A. Fraser, *Phys. Rev.* **125**, 553 (1962)
- [16] P. G. Burke and H. M. Schey, *Phys. Rev.* **126**, 147 (1962)
- [17] P. G. Burke and H. M. Schey, *Phys. Rev.* **126**, 163 (1962)
- [18] P. G. Burke and K. Smith, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 458 (1962)
- [19] P. G. Burke and H. M. Schey and K. Smith, *Phys. Rev.* **129**, 1258 (1962)
- [20] R. P. McEachran and P. A. Fraser, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 1038 (1963)
- [21] W. J. Cody, J. Lawson, Sir H. Massey and K. Smith, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A278**, 479 (1964)
- [22] R. P. McEachran and P. A. Fraser, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 369 (1965)
- [23] I. C. Percival and M. J. Seaton, *Proc. Cam. phil. Soc* **53**, 369 (1957)
- [24] K. Smith, *Proc. Phys. Soc.* **78**, 549 (1961)
- [25] L. Castillejo, I. C. Percival and M. J. Seaton, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A254**, 259 (1960)

- [26] A. Salmona and M. J. Seaton, *Proc. Phys. Soc.* **77**, 617 (1961).
- [27] P. G. Burke and A. J. Taylor, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **2**, 869 (1961).
- [28] A. Salmona, *C. R. Acad. Sci. Paris* **260**, 1482 (1972)
- [29] D. L. Moores and D. W. Norcross, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **5**, 1482 (1972).
- [30] P. Khan, S. Datta and A. S. Ghosh, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **20**, 2927 (1987).
- [31] K. P. Sarkar, M. Basu and A. S. Ghosh, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 1649 (1988)
- [32] S. J. Ward, M. Horbarsch, R. P. McEachran and A. D. Stauffer, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **21**, L611 (1988)
- [33] S. J. Ward, M. Horbarsch, R. P. McEachran and A. D. Stauffer, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 1845 (1989)
- [34] S. K. Adhikari, A. S. Ghosh, and H. Ray, *Chem. Phys. Lett.* **222**, 302 (1994).
- [35] H. Roy, P. Chaudhuri and A. S. Ghosh, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31**, 1631 (1998).
- [36] A. S. Ghosh and D. Basu, *Ind. J. Phys* **47**, 765 (1973).
- [37] J. Chaudhuri, A. S. Ghosh and N. C. Sil, *Phys. Rev. A* **10**, 2257 (1974).
- [38] Y. E. Chan and P. A. Fraser, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **6**, 2504 (1973).

- [39] M. Charlton and G. Laricchia, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, 1045 (1990).
- [40] M. Charlton and G. Laricchia, *Hyp. Int.* **76**, 97 (1993).
- [41] M. Charlton, *Proceedings of XX ICPEAC, Vienna, Austria, 1997*, eds. F. Aumayr and H. Winter (World Scientific, Singapore, 1997).
- [42] M. Charlton, *Nucl. Instrum. Meth. B* **143**, 127 (1998).
- [43] M. Charlton and G. Laricchia, *Comments At. Mol. Phys.* **26**, 253 (1991).
- [44] G. Laricchia, *Nucl. Instrum. Meth. B* **143**, 363 (1998).
- [45] O. Sueoka 1989 unpublished, as quoted in ref. [46]
- [46] M. Charlton and G. Laricchia, *J. Phys. B* **23**, 1045 (1990).
- [47] P. G. Coleman, J. T. Hutton, D. R. Cook and C. A. Chandler, *Can J. Phys.* **60**, 584 (1982).
- [48] N. Overton, R. J. Mills and P. G. Coleman, *J. Phys. B* **26**, 3951 (1993).
- [49] J. Moxom, G. Laricchia, M. Charlton, A. Kovar and W. E. Meyerhof, *Phys. Rev. A* **50**, 3129 (1994).
- [50] P. G. Coleman and J. T. Hutton, *Phys. Rev. Lett.* **45** 2017 (1980).
- [51] L. S. Fornari, L. M. Diana and P. G. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2276 (1983).
- [52] D. Fromme, G. Kruse, W. Raith and G. Sinapulus, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 3031 (1986).

- [53] L. M. Diana, P. G. Coleman, D. L. Brooks, P. K. Pendleton and D. M. Norman, *Phys. Rev. A* **34**, 2731 (1986).
- [54] T. C. Griffith and G. R. Heyland, *Phys. Rep. C* **39**, 169 (1978).
- [55] M Charlton, *Rep. Prog. Phys.* **48**, 737 (1985).
- [56] T. S. Stein, W. E. Kauppila, V. Pol, J. H. Smart and G. Jenslon, *Phys. Rev. A* **17**, 1600 (1978).
- [57] W. E. Kauppila, T. S. Stein, J. H. Smart, M. S. Debabneh, Y. K. Ho, J. P. Downing and V. Pol, *Phys. Rev. A* **24**, 725 (1981).
- [58] G. M. A. Hyder, M. S. Debabneh, Y-F. Hsieh, W. E. Kauppila, C. K. Kwan, M Mahdavi-Hezaveh and T. S. Stein, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2252 (1986).
- [59] W. E. Kauppila and T. S. Stein, *Atomic Physics with Positrons* eds. J. W. Humberston and E. A. G. Armour (New York : Plenum) (1987).
- [60] S. J. Smith, W. E. Kauppila, C. K. Kwan and T. S. Stein, *Proc. XV ICPEAC* (Amsterdam : North-Holland)
- [61] A. Schwab, P. Honer, W. Raith and G. Sinapius, *Atomic Physics with Positrons* eds. J. W. Humberston and E. A. G. Armour (New York : Plenum) (1987).
- [62] O. Sueoka, *J. Phys. soc. Japan* **51**, 3757 (1982).
- [63] M Charlton, T. C. Griffith and G. R. Heyland, K. S. Lines and G. L. Wright, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **13**, L757 (1980).
- [64] M Charlton, G. Clark, T. C. Griffith and G. R. Heyland, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **16**, L465 (1983).

- [65] J. Moxom, G. Laricchia, M. Charlton, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **26**, L367 (1993).
- [66] D. R. Schulz, C. O. Reinhold and R. E. Olson, *Phys. Rev. A* **40**, 4947 (1989).
- [67] E. F. Varracchio, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **23**, L779 (1990).
- [68] P. Khan and A. S. Ghosh, *Phys. Rev. A* **28**, 2181 (1983).
- [69] P. Khan, P. S. Mazumdar, and A. S. Ghosh, *Phys. Rev. A* **31**, 1405 (1985).
- [70] N. C. Deb, D. S. F. Crothers, and D. Fromme, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **23**, L483 (1990).
- [71] P. Van Reeth and J. W. Humberston, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L23 (1995).
- [72] P. Van Reeth and J. W. Humberston, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L511 (1995).
- [73] P. Van Reeth and J. W. Humberston, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30**, L95 (1997).
- [74] P. Van Reeth and J. W. Humberston, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32**, L103 (1999).
- [75] P. Mandal, A. S. Ghosh, and N. C. Sil, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **8**, 2377 (1975).
- [76] R. N. Hewitt, C. J. Noble, and B. H. Bransden, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 557 (1992).

- [77] S. L. Willis and M. R. C. McDowell, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **15**, L31 (1982).
- [78] S. L. Willis, J. Hata, M. R. C. McDowell, C. J. Joachain and F. W. Byron, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **14**, 2687 (1981).
- [79] M. Kahali, S. K. Adhikari, D. Basu, A. S. Ghosh, *Chem. Phys. Lett.* **239**, 344 (1995).
- [80] M. Basu and A. S. Ghosh, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 3439 (1988).
- [81] K. Higgins and P. G. Burke, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **24**, L343 (1991).
- [82] R. N. Hewitt, C. J. Noble and B. H. Bransden, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **24**, L635 (1991).
- [83] N. K. Sarkar, M. Mukherjee, M. Basu and A. S. Ghosh, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **26**, L427 (1993).
- [84] See, for example, S. K. Adhikari and K. L. Kowalski, *Dynamical Collision Theory and Its Applications*, (Academic Press, Boston, 1991); S. K. Adhikari, *Variational Principles and the Numerical Solution of Scattering Problems*, (John Wiley and Sons Inc., New York, 1998).
- [85] T. G. Winter and C. C. Lin, *Phys. Rev. A* **12**, 434 (1975).
- [86] R. I. Campeanu and J. W. Humberston, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **10**, L153 (1977).
- [87] R. I. Campeanu and J. W. Humberston, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **8**, L244 (1975).

- [88] A. S. Ghosh, N. C. Sil and P. Mandal, *Phys. Rep.* **87**, 313 (1982).
- [89] P. G. Burke, J. W. Cooper and S. Ormonde, *Phys. Rev* **183**, 245 (1969).
- [90] J. G. Seiler, R. S. Oberoi and J. Callaway, *Phys. Rev. A* **3**, 2006 (1971).
- [91] S. E. A. Wakid and R. W. LaBahn, *Phys. Rev. A* **6**, 2039 (1973)
- [92] M. Basu, M. Mukherjee and A. S. Ghosh, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2195 (1989).
- [93] A. A. Kernoghan, M. T. McAlinden and H. R. J. Walters *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, 1079 (1995).
- [94] K. Bartschat, E. T. Hudson, M. P. Scott, P. G. Burke and V. M. Burke, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **29**, 2875 (1996).
- [95] M. Eminyan, K. B. MacAdam, J. Slevin, and H. Kleinpoppen, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **7**, 1519 (1974).
- [96] H. R. J. Walters, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 1893 (1988).
- [97] H. Ray, S. K. Adhikari, and A. S. Ghosh, *Chem. Phys. Lett.* **227**, 429 (1994).
- [98] S. L. Willis and M. R. C. McDowell, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **15**, L31 (1982).
- [99] L. A. Parcell, R. P. McEachran and A. D. Stauffer A D, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **16**, 4249 (1983).
- [100] L. A. Parcell, R. P. McEachran and A. D. Stauffer A D, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **20**, 2307 (1987).

- [101] R. I. Campeanu, D. Fromme, G. Kruse, R. P. McEachran, L. A. Parcell, W. Raith, G. Sinapius and A. D. Stauffer, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **20**, 3557 (1987).
- [102] N. K. Sarkar, M. Basu and A. S. Ghosh, *Phys. Rev. A* **45**, 6887 (1992).
- [103] A. A. Kernoghan, M. T. McAliden and H. R. J. Walters, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **28**, 1079 (1995).
- [104] H. Bethe, *Ann. Phys., lpz.*, **5** 325 (1930)
- [105] M. J. Seaton, *Proc. Phys. Soc.*, **77** 184 (1961)
- [106] I. M. Cheshire, *Proc. Phys. Soc.*, **83** 227 (1964)

