

# STUDIO DELLA PRODUZIONE DI POSITRONIO NELL'ESPERIMENTO AEGIS

Davide Trezzi - N.Matr.685664

5 ottobre 2007



# Indice

<b>1</b>	<b>L'Antimateria Fredda</b>	<b>5</b>
1.1	Introduzione . . . . .	5
1.2	Teorema CPT e Principio di Equivalenza . . . . .	6
1.3	Antimateria Fredda . . . . .	8
<b>2</b>	<b>L'Esperimento AEGIS</b>	<b>9</b>
2.1	L'Esperimento ATHENA . . . . .	9
2.2	Oltre ATHENA, l'Esperimento AEGIS . . . . .	10
2.2.1	Produzione di anti-idrogeno . . . . .	12
2.2.2	Misure di gravità su anti-idrogeno . . . . .	17
2.3	AEGIS a Milano . . . . .	17
2.3.1	Il fascio di positroni . . . . .	19
2.3.2	Formazione di positronio . . . . .	19
2.3.3	Eccitazione laser . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Simulazione ad Energie Intermedie</b>	<b>29</b>
3.1	Introduzione . . . . .	29
3.2	Processi Elastici . . . . .	30
3.2.1	Urto Non Relativistico in Approssimazione di Born . . . . .	30
3.2.2	L'equazione di Dirac per un Potenziale Centrale . . . . .	35
3.2.3	Metodo relativistico dello sviluppo in onde parziali . . . . .	38
3.2.4	Calcolo degli shift di fase . . . . .	44
3.2.5	Simulazione Monte Carlo . . . . .	47
3.3	Processi Anelastici . . . . .	62
3.3.1	Energy Stopping Power . . . . .	62
3.3.2	Simulazione Monte Carlo . . . . .	69
<b>4</b>	<b>Simulazione a Basse Energie</b>	<b>81</b>
4.1	Introduzione . . . . .	81
4.2	Processi Elastici . . . . .	82
4.3	Processi Anelastici . . . . .	83
4.3.1	Scattering con fononi . . . . .	83
4.3.2	Formazione di Positronio . . . . .	85

<b>5</b>	<b>Formazione di Ps in Allumina</b>	<b>89</b>
5.1	Il Programma . . . . .	89
5.2	I Risultati della Simulazione Monte Carlo . . . . .	91
5.3	Conclusioni . . . . .	94
<b>A</b>	<b>Effetto Pick-off</b>	<b>97</b>
<b>B</b>	<b>Listato del Programma</b>	<b>101</b>

# Capitolo 1

## L'Antimateria Fredda

### 1.1 Introduzione

Prevista dall'equazione di Dirac, l'antimateria ed in particolare l'anti-elettrone o positrone venne osservato sperimentalmente per la prima volta nel 1932 da C.D. Anderson ed S. H. Neddermeyer<sup>1</sup>. Ben presto si cercarono le anti-particelle relative ai fermioni allora conosciuti quali ad esempio il protone ed il neutrone. L'anti-protone venne scoperto con l'acceleratore Bevatron al Lawrence Berkeley National Laboratory nel 1955 da O. Chamberlain, E. Segrè, C. Wiegand e T. Y. Ypsilantis. Due anni dopo, sempre al Bevatron, Cork, Lambertson, Piccioni e Wenzel mostrarono l'esistenza dell'anti-neutrone. Oggi sappiamo che ad ogni particella possiamo associare la relativa anti-particella di massa e vita media identica ma numeri quantici interni opposti. Se le interazioni che hanno luogo tra le anti-particelle sono le stesse di quelle che coinvolgono le particelle allora, in principio, deve essere possibile creare stati legati di antimateria: gli anti-atomi. Seppur semplice dal punto di vista teorico, sperimentalmente ciò è reso difficile dal fatto che l'antimateria reagisce, tramite annichilazione, con la materia che in gran quantità la circonda<sup>2</sup>. Per osservare sperimentalmente i primi anti-atomi bisognerà infatti aspettare 63 anni dopo la scoperta dell'antimateria, quando nel 1995 al CERN vennero prodotti nove atomi di anti-idrogeno. Tre anni dopo, nel 1998, al Fermilab ne vennero prodotti ben 57. La rivelazione di nuclei di anti-elio ed elementi più pesanti di origine cosmica è tuttora oggetto di studio dell'esperimento BESS (The Balloon-borne Experiment with Superconducting Spectrometer) ma saranno necessari ancora anni per la produzione dei primi anti-atomi pesanti. Oggi, applicazioni tecnologiche dell'antimateria sono schematizzabili in due rami: medico ed energetico. Per quanto riguarda

---

<sup>1</sup>C. D. Anderson, *Phys. Rev.*, **43** (1933) 491

<sup>2</sup>Il perché di tale disequilibrio tra materia ed antimateria è ancor oggi uno dei problemi teorici aperti ed una soluzione potrebbe trovarsi nella violazione della simmetria CP da parte delle interazioni fondamentali descritte dal Modello Standard delle particelle.

l'aspetto medico i positroni sono utilizzati nella Tomografia ad Emissione di Positroni (PET). Per quello energetico invece si pensa di utilizzare l'annichilazione materia-antimateria per produrre energia. L'annichilazione produce, a parità di combustibile, una quantità di energia quattro ordini di grandezza superiore a quanto viene prodotto tramite fissione nucleare. Il futuro dell'energia ad antimateria è però limitato, al momento, dalla difficoltà di reperire antimateria in natura.

## 1.2 Teorema CPT e Principio di Equivalenza

La teoria che, allo stato attuale, descrive l'interazione gravitazionale è la relatività generale formulata da A. Einstein nel 1915. Alla base di questa vi è il *principio di equivalenza* che nella formulazione originale assume l'equivalenza fisica tra campo gravitazionale e un corrispondente sistema di riferimento in moto accelerato. Oggi esistono tre formulazioni del principio di equivalenza denominate: debole, di Einstein e forte. Le ultime due presuppongono la veridicità della prima che può essere enunciata come: “tutti i corpi situati nello stesso punto dello spazio-tempo immersi in un dato campo gravitazionale sono soggetti alla stessa accelerazione”. Applicato alla fisica delle particelle elementari questo significa che materia ed antimateria immersi in un identico campo gravitazionale, come ad esempio quello terrestre, devono essere soggetti alla stessa accelerazione, ovvero l'interazione gravitazionale è invariante rispetto all'operazione di coniugazione di carica. Teorie moderne formulate allo scopo di unificare in un'unica teoria l'interazione gravitazionale con quella forte ed elettrodebole, prevedono che materia ed antimateria possano comportarsi in modo differente se sottoposte al campo gravitazionale terrestre, violando così il principio di equivalenza debole. Il test sperimentale del principio di equivalenza è quindi un passaggio obbligatorio che la fisica teorica deve affrontare per costruire una teoria in grado di unificare tutte e quattro le interazioni fondamentali.

Nel formalismo della meccanica quantistica moderna, ogni teoria quantistica di campo locale e invariante sotto trasformazioni di Lorentz, tra cui il Modello Standard delle particelle, deve essere invariante<sup>3</sup> sotto CPT. Tale simmetria risulta essere la composizione di tre simmetrie discrete: coniugazione di carica C, parità P ed inversione temporale T. Questa proprietà è stata provata indipendentemente da G. Lüders, W. Pauli, J. Schwinger<sup>4</sup> e prende oggi il nome di *teorema CPT*. Il teorema CPT porta ad alcune interessanti conclusioni quali:

1. se le particelle seguono statistiche di tipo Bose-Einstein o Fermi-Dirac, allora quelle con spin intero soddisfano la prima mentre quelle a spin

---

<sup>3</sup>In uno spazio-tempo piatto

<sup>4</sup>G. Lüders, *Annals of Physics*, **2** (1957) 1

semi-intero la seconda. In meccanica quantistica questo fatto comporta che operatori a spin intero devono essere quantizzati usando regole di commutazione mentre quelli a spin semi-intero con relazioni di anti-commutazione;

2. particelle ed anti-particelle devono avere massa a riposo e vita media identica;
3. tutti i numeri quantici interni delle anti-particelle devono essere opposti a quelle delle particelle;
4. le frequenze di transizione per stati legati costituiti da materia devono essere le stesse del relativo sistema costituito da antimateria.

Mentre si è dimostrato sperimentalmente che P,C,CP e T non sono generalmente simmetrie di una teoria quantistica di campo, CPT appare oggi come una simmetria vera per tutte le interazioni fondamentali. Dato che il Modello Standard è una teoria quantistica di campo, esso deve essere invariante rispetto a CPT. L'importanza di questa simmetria rende necessaria una verifica della sua validità con ogni tipo di particelle esistenti: barioni, mesoni e leptoni.

AEGIS (Antimatter Experiment: Gravity, Interferometry, Spectroscopy) si propone come un esperimento in grado di testare il principio di equivalenza debole ed il teorema CPT utilizzando anti-idrogeno. Misure di gravità mediante anti-idrogeno sarebbero inoltre indipendenti dal modello teorico utilizzato per descrivere l'interazione con il campo gravitazionale<sup>5</sup>. Infine un confronto diretto tra lo spettro elettromagnetico dell'idrogeno e dell'anti-idrogeno fornirebbe un test del teorema CPT. I dati sperimentali attualmente a disposizione della comunità scientifica, seppur scarsi, pongono come limite di violazione del principio di equivalenza  $10^{-6}$  mentre per il teorema CPT abbiamo  $10^{-10}$  nel settore barionico dalla misura del rapporto carica-massa di protone ed anti-protone<sup>6</sup>,  $2 \cdot 10^{-12}$  nel settore leptonico dalla misura della costante giromagnetica di elettrone e positrone<sup>7</sup> ed infine  $10^{-18}$  nel settore mesonico dalla misura della massa del kaone e dell'anti-kaone neutro<sup>8</sup>. AEGIS si propone di ottenere per il test del principio di equivalenza una precisione superiore a  $10^{-6}$  e  $10^{-15}$  per il teorema CPT.

---

<sup>5</sup>Quindi indipendente dal fatto che CPT sia considerata o meno una simmetria della teoria.

<sup>6</sup>G. Gabrielse et al., *Phys. Rev. Lett.*, **82** (1999) 3198

<sup>7</sup>R. S. Van Dyck et al., *Phys. Rev. Lett.*, **59** (1987) 26

<sup>8</sup>CLEAR Collaboration, *Phys. Lett. B*, **452** (1999) 425. L'interpretazione del limite CPT dall'oscillazione  $K^0 - \bar{K}^0$  è però model-dependent.

### 1.3 Antimateria Fredda

L'esperimento che nel 1995 permise al CERN di creare per la prima volta l'anti-idrogeno era così strutturato: gli anti-protoni venivano prodotti, accumulati e decelerati in un anello di accumulazione denominato LEAR (Low Energy Antiproton Ring). Successivamente il fascio di anti-protoni così prodotti veniva fatto incrociare con un getto di atomi di Xenon. Le conseguenti collisioni anelastiche producevano una coppia elettrone-positrone. Il positrone poteva poi legarsi all'anti-protone dando luogo ad un atomo di anti-idrogeno. L'energia cinetica degli atomi prodotti era pari a qualche decina di  $keV$  ovvero una temperatura associata di miliardi di gradi Kelvin. L'esperimento del 1995 aveva prodotto un campione esiguo di anti-atomi liberi ed oltretutto "caldi". Per ottenere misure sull'anti-idrogeno, come per esempio lo spettro elettromagnetico, è però necessario avere a disposizione più statistica, atomi confinati e temperature dell'ordine del Kelvin. Proprio per ottenere questo risultato sono nati al CERN due gruppi di ricerca: ATRAP (Antihydrogen Trap Collaboration), guidato da G. Gabrielse della Harvard University ed ATHENA (AnTiHydrogEN Apparatus), guidato da R. Landua del CERN. Proprio quest'ultimo nel 2002 è stato il primo a pubblicare un lavoro che annunciava l'osservazione di atomi di anti-idrogeno freddi. Seppur freddi gli atomi prodotti non erano ancora confinati. Questo non ha permesso ad ATHENA di compiere misure di tipo spettroscopico sugli atomi di anti-idrogeno. Allo stato attuale ne ATRAP ne ATHENA sono ancora riusciti ad ottenere atomi di anti-idrogeno confinati freddi a sufficienza da permettere una misura accurata dello spettro elettromagnetico<sup>9</sup>.

---

<sup>9</sup>ATRAP ed ATHENA hanno prodotto atomi di anti-idrogeno non confinati con temperature pari a qualche centinaia di Kelvin ben al di sopra del Kelvin, limite massimo per effettuare un test di CPT.

## Capitolo 2

# L'Esperimento AEGIS

### 2.1 L'Esperimento ATHENA

L'esperimento ATHENA aveva come scopo la produzione di anti-idrogeno freddo attraverso le reazioni  $\bar{p} + e^+ \rightarrow \bar{H} + h\nu$  e  $\bar{p} + e^+ + e^+ \rightarrow \bar{H} + e^+$ . La sorgente di positroni era un campione di Sodio 22. Questo elemento radioattivo decade in Neon 22 emettendo un positrone ed un neutrino elettronico, secondo la reazione:  $^{22}\text{Na} \rightarrow ^{22}\text{Ne} + e^+ + \nu_e$ . Il campione utilizzato al CERN era in grado di emettere  $2 \cdot 10^{14}$  positroni ogni secondo. Questi positroni hanno una distribuzione energetica di tipo beta positivo con Q-valore intorno ai  $550 \text{ keV}$  equivalente ad una temperatura di circa sei miliardi di gradi Kelvin. Una volta emessi, i positroni venivano diffusi elasticamente da un sottile strato di Neon solido e rallentati in Azoto gassoso. I positroni rallentati venivano poi accumulati: in cinque minuti l'apparato sperimentale di ATHENA riusciva a preparare un bunch di 75 milioni di positroni sospesi mediante campi elettrici e magnetici nel vuoto spinto di una trappola di Penning. Gli anti-protoni invece erano prodotti facendo collidere protoni su una targhetta metallica tramite reazione  $p + A \rightarrow p + A + p + \bar{p}$ . Tali anti-protoni erano però molto caldi e per portarli a temperature comparabili con quelli dei positroni ATHENA utilizzò il deceleratore di particelle del CERN noto come AD (Antiproton Decelerator), evoluzione tecnologica del precedente LEAR. Ogni minuto e mezzo AD produceva un bunch di circa 20 milioni di anti-protoni con energia pari a circa  $5 \text{ MeV}$ . Questi venivano successivamente rallentati da una sottile targhetta di Alluminio al fine di ridurne l'energia a pochi  $eV$ . Ultima fase era l'accumulo degli anti-protoni in una trappola di Penning. La trappola di ATHENA poteva trattenere circa 10 mila anti-protoni per diverse ore. Il confinamento di particelle cariche è sperimentato da decenni ma le trappole standard funzionano solo per particelle con carica elettrica dello stesso segno. In particolare una trappola di Penning cilindrica che ospita positroni non può contenere anti-protoni. In questo schema di trappola, un campo magnetico confina le particelle radialmente ed un campo

elettrico aumenta il potenziale alle estremità del cilindro. Per il positrone, si può immaginare il potenziale alle estremità come una rampa, e la particella come una pallina che rotola su per la rampa. I positroni che si muovono abbastanza lentamente si fermano e tornano indietro sulla rampa restando all'interno della trappola. Per gli anti-protoni che hanno carica opposta le rampe all'estremità della trappola non sono in salita, ma in discesa: perciò gli anti-protoni tendono a sfuggire, andando a collidere con le pareti della camera a vuoto, perdendosi per annichilazione. Al fine di intrappolare gli anti-protoni, occorrerebbe invertire il campo elettrico e quindi il potenziale. Il trucco per confinare insieme particelle di carica opposta fu ideato nel 1988 da Gabrielse: si mette una trappola poco profonda per particelle di una polarità all'interno di una trappola profonda per particelle di polarità opposta. Le specie intrappolate dalle pareti esterne vedono una profonda buca con al centro una collinetta. Le specie di carica opposta vedono tutti i potenziali invertiti, e la collinetta diventa una piccola depressione al centro della cima di una montagna (vedi figura 2.1).

ATHENA ha usato una trappola di questo genere, in grado di tenere assieme positroni ed anti-protoni; nella regione della collinetta i due tipi di particelle possono coesistere. A volte le collisioni tra particelle di segno opposto producono un positrone ed un anti-protone che si muovono insieme lungo la stessa direzione e finiscono per orbitare l'uno intorno all'altro: nasce un atomo di anti-idrogeno. Gli atomi di anti-idrogeno così formati sono neutri e quindi sfuggono alla trappola per particelle cariche precedentemente descritte. Una volta usciti dalla trappola l'anti-idrogeno si scontra con le pareti della stessa annichilandosi. L'annichilazione avviene tramite due reazioni: nella prima il positrone si annichila con un elettrone della parete tramite la reazione  $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$  con emissione di due fotoni con energia caratteristica di  $511 \text{ keV}$ . Nella seconda invece l'anti-protone si annichila con un nucleo degli atomi della parete con conseguente formazione di due o tre pioni. Ogni qual volta il rivelatore osserva istantaneamente nello stesso punto la produzione di fotoni e pioni si ha un evento di produzione con conseguente annichilazione di un atomo di anti-idrogeno.

## 2.2 Oltre ATHENA, l'Esperimento AEGIS

Pensato come evoluzione dell'esperimento ATHENA che nel 1995 realizzò il primo campione di atomi di anti-idrogeno freddi, AEGIS si propone la verifica sperimentale del principio di equivalenza debole attraverso misure dirette di gravità su atomi di anti-idrogeno con temperature dell'ordine di  $100 \text{ mK}$ . L'esperimento offrirà anche la possibilità di effettuare misure di spettroscopia in grado di porre un limite sperimentale più stringente sulla possibile violazione della simmetria CPT.

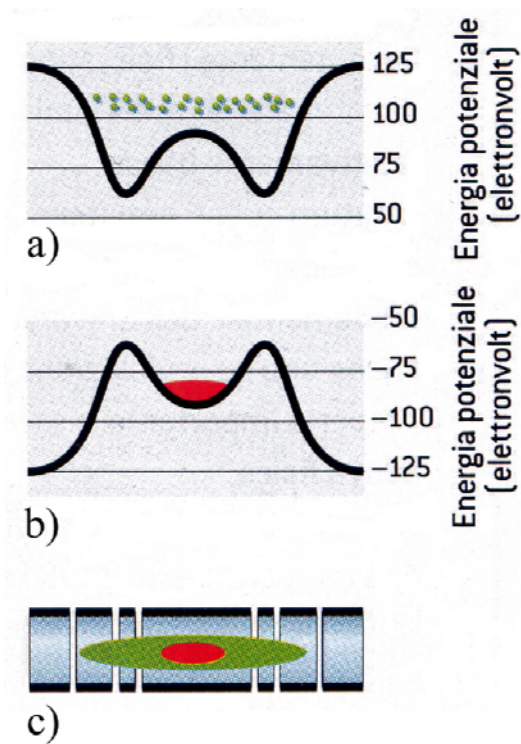


Figura 2.1: Funzionamento della trappola di ricombinazione. I positroni non possono essere raccolti nella stessa buca di potenziale che ospita una nube di anti-protoni, perciò la loro trappola deve essere ricavata all'interno della trappola per gli antiprotoni. a) Gli anti-protoni rimbalzano avanti ed indietro tra i confini di una grande e profonda buca di potenziale con una collinetta che si alza nel centro. b) I positroni che hanno carica opposta, "vedono" il potenziale invertito, così la collinetta diventa una depressione sulla cima di un'ampia collina c) La depressione intrappola i positroni nella stessa regione di spazio in cui vi sono gli anti-protoni, permettendo agli atomi di anti-idrogeno di formarsi.

### 2.2.1 Produzione di anti-idrogeno

A differenza di ATHENA, in AEGIS la produzione di anti-idrogeno è basata sulla reazione di scambio carica positronio-anti-protone:  $Ps^* + \bar{p} \rightarrow \bar{H}^* + e^-$ .

#### Produzione di anti-protoni

Per ottenere anti-protoni di energia adeguata per l'esperimento si utilizza la reazione di produzione di coppie  $p + p \rightarrow p + p + p + \bar{p}$  facendo collidere un bunch di  $1.5 \cdot 10^{13}$  protoni a  $26 \text{ GeV}$  prodotti dal PS (Proton Synchrotron) del CERN con una targhetta di Iridio. In queste condizioni vengono ottenuti approssimativamente  $5 \cdot 10^7$  anti-protoni a  $2.7 \text{ GeV}$  guidati per mezzo di un filtro magnetico <sup>1</sup> all'ingresso dell'AD. Questa macchina del diametro di 60 metri, attiva al CERN dal 2000, è in grado di rallentare gli anti-protoni variando la loro energia dal valore iniziale di  $2.7 \text{ GeV}$  a quello finale di  $5 \text{ MeV}$ . Alla fine del processo di produzione e rallentamento, della durata complessiva di un paio di minuti circa, viene emesso un bunch di circa  $2.5 \cdot 10^7$  anti-protoni. All'uscita dell'AD gli anti-protoni vengono fatti passare attraverso piccole targhette che ne diminuiscono ulteriormente l'energia per poi giungere infine all'ingresso della prima trappola tipo Malmberg - Penning di AEGIS detta "catching trap". Questa trappola è in grado, scegliendo opportuni valori della tensione fornita ai capi della stessa, di confinare  $10^4$  anti-protoni con energia dell'ordine del  $\text{keV}$ . La catching trap è mantenuta in uno stato di ultra alto vuoto e raffreddata, tramite un criostato, ad una temperatura di  $4 \text{ K}$ . Inoltre al suo interno è presente un campo magnetico di  $3 \text{ T}$ . Successivamente nella trappola viene introdotta una nube di elettroni che, urtando con gli anti-protoni, ne diminuiscono l'energia. Tale energia è ceduta dagli anti-protoni agli elettroni e a sua volta rilasciata da questi all'ambiente tramite radiazione di ciclotrone prodotta dall'interazione con il campo magnetico di  $3 \text{ T}$  presente nella camera. Alla fine del processo anti-protoni ed elettroni raggiungeranno una temperatura di equilibrio di  $4 \text{ K}$  uguale a quella della trappola. Un campo elettrico quadrupolare fa sì che la nube di anti-protoni diminuisca le sue dimensioni radiali assumendo una forma che ricorda quello di un sigaro. Modificando adiabaticamente <sup>2</sup> i valori della tensione ai capi della trappola è possibile muovere assialmente gli anti-protoni portandoli nella seconda trappola di tipo Penning detta "Antihydrogen formation trap". Questa è mantenuta in ultra alto vuoto e raffreddata tramite un criostato ad una temperatura inferiore al Kelvin. All'interno è mantenuto un campo magnetico di  $1 \text{ T}$ . Per lo stesso fenomeno illustrato in precedenza anti-protoni ed elettroni raggiungono l'equilibrio termodinamico con la trappola. Variando velocemente la tensione con "kicks" di  $50 - 100 \text{ ns}$  è

<sup>1</sup>Questo è reso necessario al fine di eliminare il rumore nel processo di produzione degli anti-protoni

<sup>2</sup>In questo caso adiabatico significa che il tempo di variazione delle tensioni deve essere più lungo del periodo relativo al moto delle particelle nella trappola.

possibile successivamente separare gli elettroni dagli anti-protoni<sup>3</sup>. Lo schema dell'apparato per la produzione di anti-protoni è illustrato in figura 2.2. Alla fine del processo di produzione, accumulo e raffreddamento otteniamo un bunch di  $10^4 - 10^5$  anti-protoni ad energie *sub-eV*.

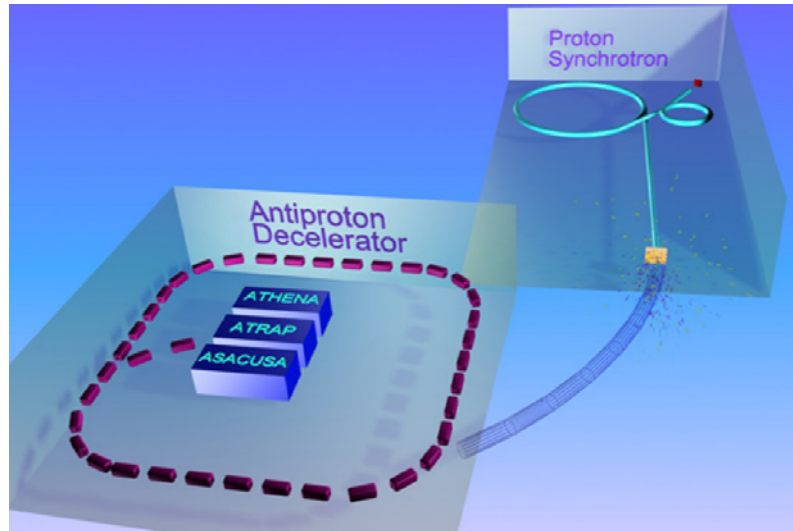


Figura 2.2: Rappresentazione dell'Antiproton Decelerator (AD). Il fascio di protoni prodotto dal Proton Synchrotron (PS) viene fatto collidere su una targhetta di Iridio. Gli anti-protoni prodotti dalla collisione vengono guidati verso l'Antiproton Decelerator e portati, una volta raffreddati, all'ingresso della "catching trap" che si troverà nell'area oggi dedicata all'esperimento ATHENA.

### Produzione di anti-idrogeno

Come detto in precedenza la produzione di anti-idrogeno in AEGIS è basata sulla reazione di scambio carica tra anti-protoni e positronio  $Ps^* + \bar{p} \rightarrow \bar{H}^* + e^-$ . Le ragioni che rendono questo tipo di reazione interessante ai fini dell'esperimento sono:

1. la grande sezione d'urto del processo, dell'ordine di  $a_0 n^4$  con  $a_0$  raggio di Bohr ed  $n$  numero quantico principale dell'atomo di positronio;
2. la stretta distribuzione nel numero quantico principale degli stati dell'anti - idrogeno prodotto<sup>4</sup>;

<sup>3</sup>Questo a seguito della differenza di massa tra elettroni ed anti-protoni.

<sup>4</sup>Questo è vero solo se la distribuzione del numero quantico principale del positronio è concentrata intorno ad un unico valore

3. la possibilità di ottenere anti-idrogeno freddo<sup>5</sup>.

Il processo di formazione dell'anti-idrogeno avviene all'interno della antihydrogen formation trap sovrapponendo il positronio prodotto facendo collidere positroni su una targhetta porosa posizionata nelle vicinanze della trappola come illustrato in figura 2.6<sup>6</sup> con la nube di anti-protoni. Prima di giungere all'ingresso della trappola, il positronio prodotto è sottoposto ad eccitazione laser. Il tasso di formazione di anti-idrogeno dipende fortemente dal periodo di sovrapposizione della nube di anti-protoni con quella del positronio. Data la geometria sfavorevole del problema è stato inserito un campo elettrico in grado di aumentare di un fattore dieci il tempo in cui le due nubi si sovrappongono. Il numero atteso di atomi di anti-idrogeno prodotti è stimato tra 100 e 1000. Al fine di monitorare il processo di formazione di anti-idrogeno è in fase di sviluppo la costruzione di un rivelatore analogo a quello utilizzato nell'esperimento ATHENA, in grado di ricostruire il vertice di annichilazione degli atomi di anti-idrogeno con la superficie interna della trappola. Tale ricostruzione avviene misurando la coincidenza spaziale e temporale dei pioni, generati durante l'annichilazione anti-protone - nucleo, con i due gamma prodotti dall'annichilazione positrone - elettrone. Nel caso del rivelatore di ATHENA, muovendosi radialmente dalla zona centrale verso l'esterno incontriamo, dopo una regione cava del diametro di 7.5 cm, due piani di rivelatori a microstrip al Silicio seguiti da 16 righe da 12 cristalli di Ioduro di Cesio ciascuna. Il diametro esterno del rivelatore è di 14 cm mentre la lunghezza complessiva è pari a 25 cm. L'efficienza di rilevazione degli atomi di anti-idrogeno è del 25%. Una rappresentazione del rivelatore è mostrata in figura 2.3.

Gli atomi di anti-idrogeno, una volta prodotti, hanno una velocità distribuita isotropicamente pari ad una decina di metri al secondo. Al fine di realizzare misure di gravità è necessario applicare un gradiente di campo elettrico in grado di accelerare assialmente gli atomi di anti-idrogeno sino all'uscita della antihydrogen formation trap<sup>7</sup>.

### Confinamento degli atomi di anti-idrogeno

Il confinamento magnetico di specie atomiche neutre si basa sull'interazione tra il momento magnetico atomico ed un campo magnetico statico disomogeneo opportunamente modellato. Il termine che descrive l'interazione è:

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (2.1)$$

---

<sup>5</sup>A patto che gli anti-protoni siano freddi

<sup>6</sup>Una descrizione dettagliata è data nel paragrafo 2.3.

<sup>7</sup>Dopo alcune decine di nanosecondi dall'interazione tra anti-protoni e atomi di positronio la tensione ai capi della antihydrogen formation trap viene azzerata. Successivamente viene generato un gradiente di campo elettrico trasformando la trappola in un acceleratore Rydberg di tipo Stark.

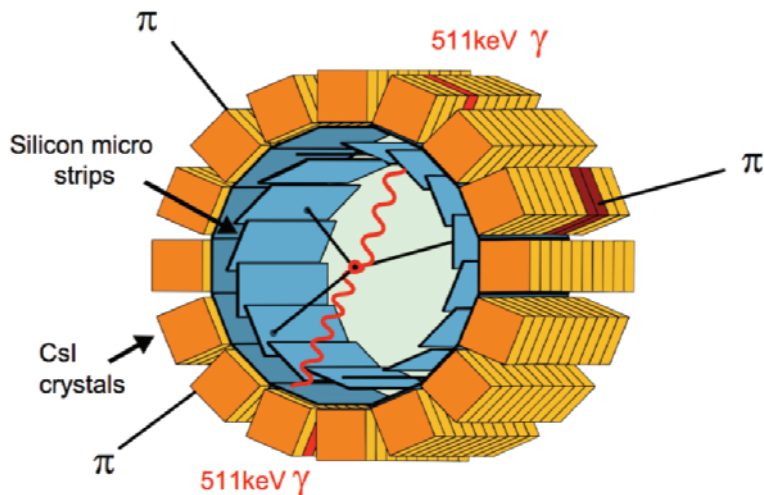


Figura 2.3: Rappresentazione grafica del rivelatore di anti-idrogeno relativo all'esperimento ATHENA. Si ha un evento di formazione con conseguente annichilazione di anti-idrogeno quando è misurata una coincidenza spazio-temporale tra tre pioni originati dall'annichilazione dell'anti-protone e due fotoni da 511 keV ciascuno originati dall'annichilazione del positrone.

dove  $\vec{\mu}$  indica il momento di dipolo magnetico dell'atomo e  $\vec{B} = \vec{B}(r)$  è il campo magnetico radiale. Nell'ipotesi di validità dell'approssimazione adiabatica, ossia se la frequenza di Larmor risulta molto maggiore del tasso di variazione del campo magnetico visto nel sistema di riferimento dell'atomo, l'hamiltoniana diviene:

$$H = \pm\mu \left| \vec{B} \right| \quad (2.2)$$

gli atomi con segno meno sono chiamati HFS (High-Field-Seekers) dal momento che sono attratti ed intrappolati dai punti di massimo del modulo del campo magnetico; viceversa quelli con segno più sono attratti dai punti di minimo del modulo del campo e sono detti LFS (Low-Field-Seekers). Il fatto che un campo magnetico statico risulti irrotazionale determina l'impossibilità di trovare punti di massimo del modulo all'interno di un mezzo omogeneo. Da ciò deriva l'impossibilità di trovare punti di HFS nel vuoto. Per contro, è possibile creare minimi di modulo del campo magnetico ed intrappolare quindi i LFS, ad esempio utilizzando una coppia di bobine anti-Helmholtz. La profondità della buca di potenziale dipende, oltre che dai termini di sviluppo nel campo maggiori o uguali al primo, dal momento magnetico della specie da intrappolare. Nel caso dell'atomo di anti-idrogeno nello stato fondamentale il momento magnetico è di fatto pari ad un magnetone di Bohr e cioè  $0.67K/T$ . Quindi per confinare anti-idrogeno con energie inferiori a cir-

ca  $670mK$  in una regione con dimensioni lineari di pochi centimetri occorre realizzare gradienti di campo magnetico dell'ordine del Tesla al centimetro nelle tre direzioni degli spazi, con un minimo del modulo di  $B$  e con un valore di questo minimo diverso da zero. Quest'ultima richiesta è importante per mantenere l'approssimazione adiabatica nella descrizione del moto ed evitare gli spin flips e la conseguente perdita di particelle. Una buona soluzione del problema si ha utilizzando il campo di quadrupolo generato da bobine in configurazione Ioffe-Pritchard utilizzata attualmente in un gran numero di esperimenti con atomi freddi.

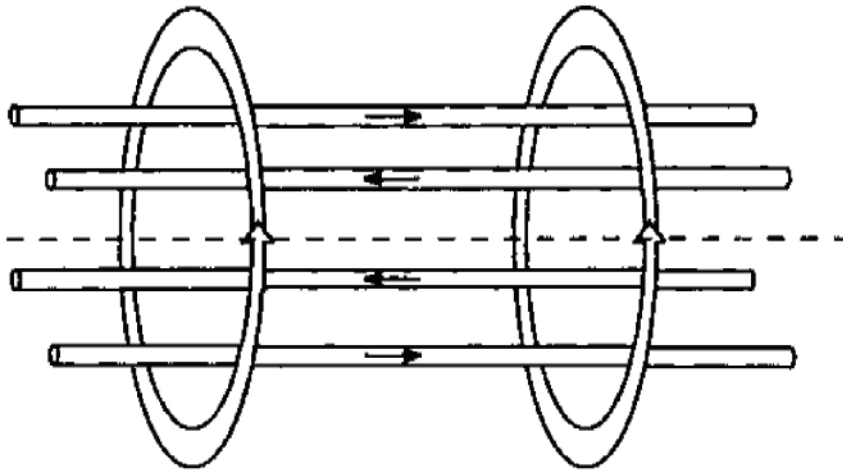


Figura 2.4: Trappola di tipo Ioffe-Pritchard. Le frecce indicano la direzione in cui circola la corrente elettrica nel conduttore.

La figura 2.4 mostra la geometria dei conduttori nella trappola di Ioffe-Pritchard. Notiamo che il sistema non ha simmetria di rotazione. Dati gli elevati valori dei campi necessari occorre l'uso di magneti superconduttori. Allo stato attuale, per l'esperimento AEGIS, soluzioni con combinazioni di magneti permanenti e magneti superconduttori sono anche possibili. La trappola magnetica di Ioffe-Pritchard sarà installata esternamente al magnete dell'esperimento AEGIS una volta rimossa la parte dell'apparato sperimentale relativa alla misura di gravità. Anti-idrogeno freddo, allo stato fondamentale e confinato può a sua volta essere sottoposto ad eccitazione laser passando ad uno stato Rydberg ben definito. L'Anti-idrogeno eccitato così preparato può essere impiegato per misure di spettroscopia. Si noti in particolare che una misura della transizione  $1s - 2s$  con una precisione di  $10^{-11}$  serve come confronto tra la distribuzione di carica del protone e quella

dell'anti-protone <sup>8</sup> portando quindi ad una verifica diretta della simmetria CPT. Questa misura costituirà la seconda fase dell'esperimento AEGIS dopo la misura di gravità all'1% con anti-idrogeno.

### 2.2.2 Misure di gravità su anti-idrogeno

Una volta prodotto, il fascio di atomi di anti-idrogeno può essere utilizzato per effettuare una misura dell'accelerazione gravitazionale terrestre. Per fare questo è stato progettato un deflettometro classico di Moirè all'uscita dell'antihydrogen formation trap. Tale apparato sperimentale fu ideato nel 1996 da M. K. Oberthaler et al. e consiste in un insieme di tre grate di periodo  $a$  che possono funzionare da deflettometro od interferometro a seconda che  $a$  sia o molto maggiore o molto minore di  $\sqrt{\lambda_{DB}L}$  con  $L$  distanza tra le grate e  $\lambda_{DB}$  lunghezza d'onda di De Broglie. Nel primo caso si parla di deflettometro e le particelle seguono traiettorie di tipo classico, nel secondo caso invece le particelle sono soggette a fenomeni quantistici e si parla di interferometro (Mach-Zehnder). La presenza delle prime due grate distanziate  $L$  produce in un reticolo di Moirè una struttura periodica <sup>9</sup> nel numero di atomi  $N$  rilevati ad una distanza  $L$  dalla seconda grata. L'effetto della forza di gravità è quella di introdurre una fase in tale struttura periodica, funzione della costante di accelerazione gravitazionale  $g$ . Al fine di misurare  $N$  si introduce una terza grata posta ad una distanza  $L$  dalle prime due. Nell'esperimento AEGIS tale grata è sostituita da un rivelatore di posizione al Silicio, riducendo in questo modo il tempo di misura. Tale rivelatore a microstrip dovrà avere una risoluzione spaziale di  $10 - 13\mu m$  al fine di ottenere una precisione sulla misura di  $g$  dell'uno per cento. Il deflettometro di Moirè sarà montato all'interno del criostato e mantenuto a bassa temperatura al fine di non perturbare le trappole antistanti. Le grate avranno un raggio di  $20\text{ cm}$  e saranno distanziate tra loro  $40\text{ cm}$ . Nella regione del deflettometro tutti i campi magnetici (tra cui quello terrestre) dovranno essere eliminati o schermati. Lo schema dell'apparato sperimentale è mostrato in figura 2.5.

## 2.3 AEGIS a Milano

L'Università degli Studi di Milano ed il Politecnico di Milano in collaborazione con l'Università degli Studi di Trento sono impegnati nello studio e progettazione della parte dell'esperimento AEGIS atta alla produzione di positronio eccitato. Tale processo è schematizzabile in tre fasi distinte: produzione del fascio di positroni, formazione di positronio e conseguente eccitazione laser.

---

<sup>8</sup>Infatti l'incertezza teorica nel calcolo dell'energia di transizione per l'atomo di idrogeno è sull'undicesima cifra decimale ed è dovuta all'incertezza sperimentale nella determinazione del raggio del protone.

<sup>9</sup>Tale struttura è periodica nella coordinata  $x$  diretta lungo la direzione della forza di gravità

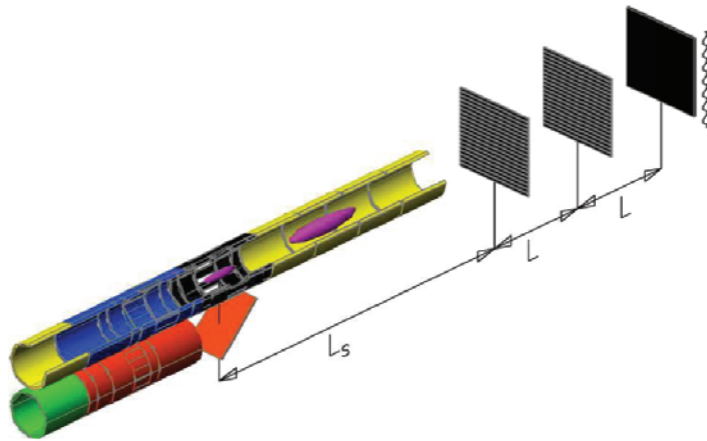


Figura 2.5: Deflettometro di Moiré per la misura di gravità con anti-idrogeno. In figura si vedono le due linee di produzione di anti-protoni (sopra) e positroni (sotto). In nero è indicata l'antihydrogen formation trap. In giallo la regione atta alla diminuzione delle dimensioni radiali della nube di anti-idrogeno e conseguente accelerazione della stessa. In grigio le due grate del deflettometro di Moiré ed infine in nero il rivelatore di posizione al Silicio.

### 2.3.1 Il fascio di positroni

Il fascio di positroni è originato a partire da una sorgente radioattiva di Sodio 22 moderata da una targhetta di Neon solido mantenuto ad una temperatura di  $7\text{ K}$ . L'intensità del fascio sarà data da  $2 \cdot 10^5$  positroni al secondo per millicurie. Si stima che utilizzando un accumulatore modello Surko è possibile ottenere in  $200 - 300$  secondi un fascio costituito da  $10^8$  o più positroni. Al fine di monitorare il processo di accumulo dei positroni sono stati progettati una serie di rivelatori quali uno schermo al fosforo<sup>10</sup>, una coppa di Faraday<sup>11</sup> ed un fotodiodo allo Ioduro di Cesio<sup>12</sup>. Successivamente tali positroni con energie dell'ordine di decine o centinaia di  $eV$  vengono trasferiti dall'accumulatore ad una trappola Malmberg - Penning ad ultra alto vuoto, detta "positron trap", montata all'interno dello stesso campo magnetico della catching trap degli anti-protoni. I positroni sottoposti a tale campo magnetico perdono energia per emissione di ciclotrone raggiungendo l'equilibrio termico con la trappola mantenuta a  $4\text{ K}$ . Alla fine del processo è prevista la produzione di un bunch di positroni della lunghezza di decine di nanosecondi ed un raggio di circa un millimetro. Tale bunch di positroni è poi trasferito dalla positron trap ad una regione, posta nelle vicinanze dell'antihydrogen trap (vedi figura 2.6), dove è contenuta la targhetta porosa atta alla produzione di positronio. Tale regione è mantenuta ad una temperatura di  $100\text{ mK}$  e sottoposta ad un campo magnetico di  $1\text{ T}$ .

### 2.3.2 Formazione di positronio

Il positronio sarà ottenuto in AEGIS mandando un bunch di positroni su un'opportuna targhetta denominata "converter". Il tipo di materiale che costituisce la targhetta, lo yield e la distribuzione delle velocità del positronio emesso rappresentano i parametri fondamentali dell'esperimento. La targhetta è situata di fronte al fascio di positroni incidente ed inclinata di  $45^\circ$ . La scelta di tale geometria porta allo studio della formazione di positronio in riflessione.

### Meccanismi di formazione di positronio e proprietà dei materiali

Il positronio nel vuoto è normalmente prodotto impiantando positroni con energia cinetica compresa tra alcune centinaia e poche migliaia di  $eV$  in targhette solide. I positroni, una volta all'interno del solido rallentano raggiungendo in tempi brevi<sup>13</sup> energie dell'ordine del  $meV$ . Positroni termici

---

<sup>10</sup>Permette di osservare il profilo della nube di positroni.

<sup>11</sup>Permette di contare il numero di positroni accumulati.

<sup>12</sup>Permette di monitorare i fotoni prodotti dall'annichilazione dei positroni con lo schermo al fosforo o con la coppa di Faraday.

<sup>13</sup>Rispetto alla vita media del positrone nel mezzo considerato.

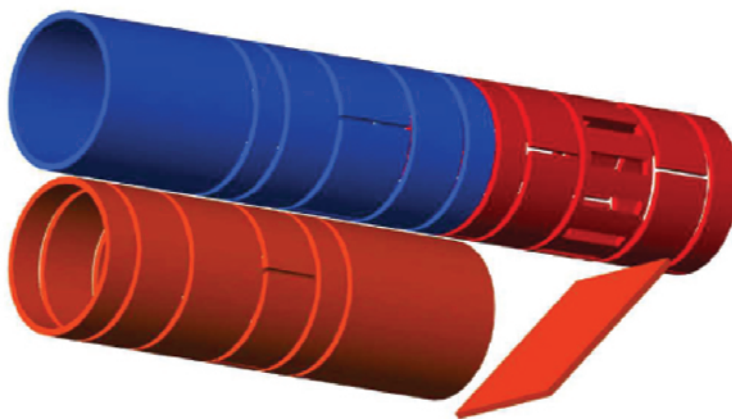


Figura 2.6: Zona di formazione di Positronio. In rosso è riportata la sezione della linea di produzione del fascio di positroni. Questa termina con la targhetta porosa inclinata, anche essa di colore rosso. In blu è indicata la sezione della linea di produzione del fascio di anti-protoni. Alla fine della regione blu, nuovamente in rosso è indicata la antihydrogen formation trap.

od epitermici<sup>14</sup>, dopo aver catturato un elettrone del mezzo, possono essere riemessi nel vuoto sotto forma di atomi di positronio. Il rapporto tra il numero di atomi di positronio formati e il numero di positroni incidenti nonché il relativo spettro energetico, dipende dalla natura del materiale utilizzato come converter e, una volta scelto il materiale, dalla profondità di impiantazione e dalla temperatura della targhetta. Il positronio, nello stato fondamentale, può trovarsi in due stati quantici differenti a seconda dell'orientamento degli spin di elettrone e positrone. Si parla di parapositronio  $p - Ps$  nel caso in cui lo spin è zero e di ortopositronio  $o - Ps$  nel caso di spin uno. La vita media del  $p - Ps$  nel vuoto è pari a  $125 ps$  ed il decadimento avviene attraverso la reazione  $p - Ps \rightarrow \gamma + \gamma$  con fotoni da  $511 keV$  ciascuno. La vita media dell' $o - Ps$  nel vuoto è invece pari a  $142 ns$  ed il decadimento avviene attraverso la reazione  $o - Ps \rightarrow \gamma + \gamma + \gamma$ . Ai fini dell'esperimento solamente la frazione di positronio emesso come  $o - Ps$  è rilevante in quanto la vita media del  $p - Ps$  è troppo breve per permetterne la successiva eccitazione laser. In un campo magnetico lo stato di tripletto con componente di spin  $S_z = 0$  è mischiato allo stato di singoletto. Questo fatto riduce la vita media dell'ortopositronio portandola a circa  $15 ns$  in un campo magnetico di  $1 T$ . Al contrario la vita media dello stato di tripletto con componenti  $S_z = \pm 1$  non viene modificata dal campo magnetico e quindi lo yield di ortopositronio in un campo di un Tesla risulta ridotto solamente

<sup>14</sup>Con positrone epitermico si intende un positrone con energia superiore al  $meV$

di un fattore un terzo. La produzione di positronio avviene nei metalli e nei semiconduttori così come negli isolanti; quello che cambia nei vari casi è il meccanismo di formazione. Nei metalli e semiconduttori la formazione di positronio è dovuta unicamente alla cattura di elettroni superficiali da parte dei positroni retrodiffusi. I positroni termalizzati possono produrre positronio ad ogni temperatura attraverso trasferimento adiabatico di carica a patto che il potenziale di formazione del positronio sia negativo, ovvero:

$$W = \Phi_- + \Phi_+ - 6.8eV < 0 \quad (2.3)$$

dove  $6.8 eV$  è l'energia di legame del positronio e  $\Phi_{\mp}$  sono rispettivamente le funzioni lavoro dell'elettrone e del positrone per il materiale che costituisce il converter. Nel caso in cui questa condizione è soddisfatta il positronio lascia la superficie con una distribuzione energetica che va da zero al valore della forza lavoro. In media quindi l'energia del positronio è dell'ordine dell' $eV$ . Se  $W > 0$ , per quanto detto precedentemente, l'emissione adiabatica di positronio è scarsa e dovuta essenzialmente ai positroni epitermici. Anche quando  $\Phi_+ < 0$  il processo di emissione di positroni è in competizione con l'emissione adiabatica del positronio. La figura 2.7 mostra i potenziali di formazione di positronio al variare del numero atomico. Gli elementi per cui la formazione di positronio è sfavorita ( $W > 0$ ) sono barrati in rosso. Con una barra blu sono indicati invece gli elementi per i quali c'è competizione tra la formazione di positronio e l'emissione di positroni ( $W < 0, \Phi_+ < 0$ ).

Positronium formation potential (eV)															
<del>Li</del> +0.36	<del>Be</del> -3.67													<del>Al</del> -2.30	<del>Si</del> +0.15
<del>Na</del> +0.32	<del>Mg</del> -0.62														
<del>K</del> +0.35	Ca -0.4	Sc -1.7	Ti -2.74	V -3.36	<del>Cr</del> -4.18	Mn -3.08	Fe -2.96	Co -2.62	<del>Ni</del> -2.51	<del>Cu</del> -1.39/ -2.5	Zn -1.56			<del>Ge</del> -0.1	
<del>Rb</del> +0.19	Sr -0.39	Y -1.49	Zr -2.82	Nb -3.87	<del>Mo</del> -4.88	Tc -5.13	Ru -4.88	Rh -3.7	Pd -1.76	Ag -1.44	Cd -1.02			<del>Sn</del> +0.8	
<del>Cs</del> +0.14	Ba -0.67	Lu -1.9	Hf -3.1	Ta -4.17	<del>W</del> -5.47	Re -5.83	Os -5.91	Ir -5.27	<del>Pt</del> -3.44	Au -2.21				<del>Pb</del> -1.24/ -0.73	

Figura 2.7: Potenziali di formazione di positronio. Gli elementi della tavola periodica per cui la formazione di positronio è sfavorita sono barrati in rosso. Con una barra blu sono indicati invece gli elementi per i quali c'è competizione tra la formazione di positronio e l'emissione di positroni.

Oltre all'emissione adiabatica è stata osservata sperimentalmente anche la formazione di positronio tramite attivazione termica. Questo processo

è dominante quando la temperatura della targhetta è dell'ordine di alcune centinaia di Kelvin e può essere interpretato in termini di disomogeneità del potenziale superficiale del solido. A seguito di tale effetto un positrone può essere intrappolato in tali disomogeneità, raffreddato e successivamente riemesso sotto forma di positronio. In questo caso il positronio ha una distribuzione di energie dettata dalla temperatura della targhetta. La formazione di positronio sulla superficie degli isolanti ad opera di positroni termici è sfavorita dato che l'energia di legame del positronio è normalmente insufficiente per compensare l'estrazione di un positrone e di un elettrone ( $W > 0$ ). Comunque la termalizzazione dei positroni negli isolanti è meno efficiente che nei metalli e in questo modo è possibile ottenere un grande flusso di positroni che tornano alla superficie dell'isolante con energia cinetica sufficiente per formare positronio. Questo processo è stato misurato in Allumina ed Ossido di Magnesio. In questo caso, lo spettro energetico del positronio riflette la distribuzione energetica dei positroni epitermici e si può estendere anche ad energie superiori all'eV. Si può anche avere formazione di positronio nel "bulk" del solido. Una volta formato, il positronio può diffondere sino alla superficie del solido ed essere infine liberato nel vuoto. In questo caso il positronio è formato durante il processo di perdita di energia dei positroni nel mezzo ed in particolare quando l'energia dei positroni appartiene all'intervallo  $[E_{gap} - E_{solido}, E_{gap}]$ <sup>15</sup> dove  $E_{gap}$  è l'energia necessaria per eccitare un elettrone dell'isolante dalla banda di valenza a quella di conduzione mentre  $E_{solido}$  è l'energia di legame del sistema  $e^+e^-$  nel solido. In generale  $E_{solido} < 6.8$  eV. La formazione di positronio nel bulk è possibile anche quando un positrone incontra un "spur" di elettroni ovvero elettroni portati in banda di conduzione dal positrone stesso durante la sua fase di rallentamento del mezzo. I due metodi di produzione appena descritti (superficiale o nel bulk) dipendono dalla temperatura della targhetta solo indirettamente. In questo modo lo yield di conversione di positroni in positronio è atteso rimanere alto malgrado le basse temperature dell'esperimento AEGIS.

### Formazione di positronio nei materiali porosi

Di rilevante importanza per l'esperimento AEGIS è lo studio della formazione di positronio nei materiali porosi. Tali materiali possono avere o meno pori connessi tra loro e con la superficie. Il positronio può formarsi nei pori fondamentalmente attraverso due processi: formazione nel bulk del solido con conseguente diffusione nel poro o formazione sulla superficie interna del poro stesso. Se i pori sono connessi tra loro e con la superficie esterna del materiale allora il positronio può uscire nel vuoto dopo una serie di urti con le pareti interne. Lo spettro di energia del positronio emesso dipende dall'energia posseduta dal positronio all'ingresso del poro, dal numero di collisioni

---

<sup>15</sup>Questo intervallo prende il nome di Öre Gap

effettuate con la superficie interna e dal tasso di energia persa in ciascuna collisione. A sua volta la profondità nel bulk dove il positronio è formato dipende dall'energia del fascio di positroni incidente e dalla geometria del poro. Variando la profondità di impiantazione dei positroni nel solido sarà quindi possibile modificare lo spettro energetico del positronio emesso. La figura 2.8 mostra schematicamente il meccanismo di produzione e raffreddamento di positronio nei materiali porosi.

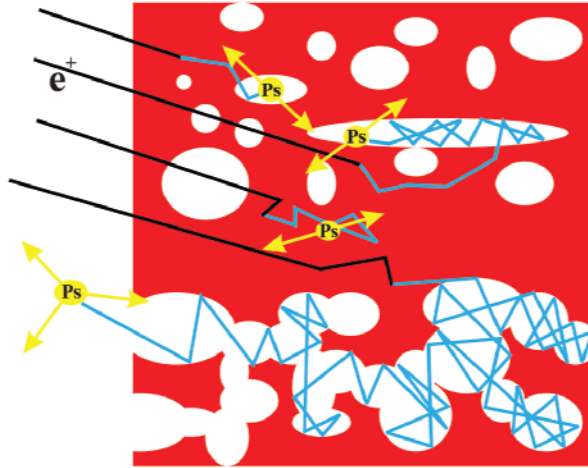


Figura 2.8: Meccanismo di produzione e raffreddamento di positronio nei materiali porosi. In nero sono indicati i positroni che incidono sulla targhetta porosa (rossa). Se viene formato positronio nel bulk del materiale questo può o annichilirsi con gli elettroni del mezzo oppure diffondere (linee azzurre) sino ad un poro. Se il poro è chiuso allora il positronio è destinato ad annichilirsi con le pareti interne. Se invece il poro è connesso con la superficie del solido, il positronio può, dopo aver perso energia attraverso urti con le pareti interne del poro, uscire nel vuoto.

Il processo di raffreddamento del positronio tramite urti con la superficie interna di pori interconnessi è stato osservato sperimentalmente nell'Ossido di Silicio granulare ed aerogel. Assumendo che l'energia iniziale degli atomi di positronio sia inferiore alla "band gap" del solido, il processo di raffreddamento avviene solo per collisioni elastiche con gli atomi alla superficie del solido. La massima energia trasferita per singola collisione  $\Delta E$  da un atomo di positronio ad un oggetto di massa  $M_{eff}$  può essere stimata come:

$$\frac{\Delta E}{E} \simeq \frac{8}{2 + \frac{M_{eff}}{m_e}} \simeq \frac{8m_e}{M_{eff}} \quad (2.4)$$

dove con  $m_e$  abbiamo indicato la massa a riposo dell'elettrone (positrone).

$M_{eff}$  coincide con la massa del singolo atomo del solido  $M$  solo quando l'energia del positronio è superiore a qualche centinaio di  $meV$ . Nel caso di energie inferiori possiamo sempre applicare l'approssimazione  $M_{eff} = nM$  con:

$$n = \frac{\lambda_{DB}^2}{r_a^2} \quad (2.5)$$

dove  $\lambda_{DB}$  è la lunghezza d'onda di De Broglie relativa all'atomo di positronio e  $r_a$  la tipica distanza interatomica. Possiamo quindi dedurre un valore medio di energia trasferita per singola collisione dal positronio al solido dato da  $\Delta E \simeq (1 - 4 \cdot 10^{-4}) \cdot E$ . Sotto queste ipotesi sono necessari circa dieci mila urti per raffreddare un atomo di positronio da valori dell'energia dell'ordine dell' $eV$  a qualche  $meV$ . Nello studio del processo di formazione di positronio nei materiali porosi non può essere trascurato l'effetto "pick-off"<sup>16</sup>, essendo la perdita di positronio per tale fenomeno è stimata intorno al 60–70%. Inoltre al fine di ottenere positronio utile per formare anti-idrogeno è necessario avere una geometria dei pori che ne permetta il raffreddamento in tempi di gran lunga inferiori ai 142  $ns$ . L'uso di converter metallici porosi è sicuramente più efficiente dal punto di vista del raffreddamento del positronio dato che una singola collisione dell'atomo di positronio con un elettrone libero alla superficie del metallo può dare luogo ad una perdita di energia del 50% riducendo il numero di collisioni necessarie da circa dieci mila a meno di cento. Nello stesso tempo aumenterebbe però la perdita di positronio per pick-off<sup>17</sup>. Allo stato attuale, al fine di produrre positronio con temperature di poche decine di Kelvin, la collaborazione AEGIS si è concentrata sullo studio di materiali porosi quali principalmente Silica ed Ossido di Alluminio.

Il grafico 2.9, ottenuto dal gruppo di Trento dell'esperimento, mostra la percentuale di ortopositronio formato in Silica al variare della temperatura del campione e dell'energia del fascio di positroni incidenti. Una prima analisi dei dati ha portato alle seguenti conclusioni:

1. lo yield totale di conversione di positroni in positronio nel poro è di circa il 72%;
2. a temperatura ambiente una frazione di positronio compresa tra il 10% ed il 20% del totale lascia il materiale;
3. il numero di atomi di ortopositronio diminuisce moderatamente con la temperatura.

Lo stesso studio è tuttora in corso con membrane Whatman costituite da targhette di Ossido di Alluminio dello spessore di 60  $\mu m$  attraversate da una fitta rete di canali cavi da 20  $nm$  di diametro. Inoltre nei laboratori di Como del Politecnico di Milano è in fase di realizzazione un apparato sperimentale

<sup>16</sup>Vedi appendice A per maggiori informazioni.

<sup>17</sup>Dovuto all'aumento del numero di elettroni liberi.

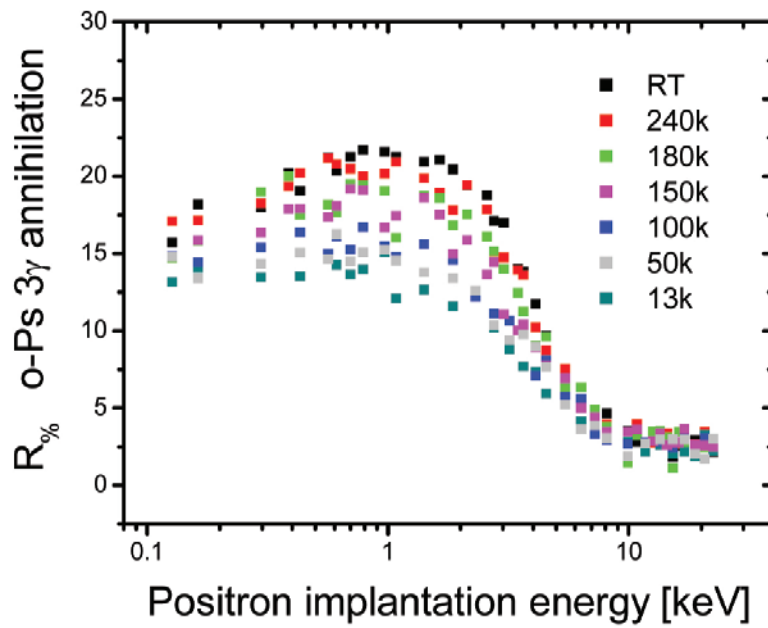


Figura 2.9: Percentuale di positronio formato rispetto al numero di positroni incidenti sulla targhetta in funzione dell'energia dei positroni al variare della temperatura del campione. Con *RT* si è indicata la temperatura ambiente. (R.S. Brusa e S. Mariazzi, non pubblicato)

in grado di stimare la distribuzione delle velocità del positronio in uscita dal converter utilizzando misure di tempo di volo. Per fare ciò si sfrutta il fatto che un positrone incidente durante il processo di perdita di energia nel mezzo può produrre elettroni secondari che possono essere utilizzati come segnale di start. Successivamente il positrone può formare positronio, che una volta emesso nel vuoto decade in volo. I fotoni di annichilazione possono essere utilizzati come segnale di stop. Misurando il tempo trascorso tra i due segnali è possibile stimare il tasso di formazione di positronio nella targhetta e lo spettro delle velocità.

### 2.3.3 Eccitazione laser

Una volta prodotto nello stato fondamentale il positronio è sottoposto ad eccitazione laser che lo porterà dal livello  $n = 1$ <sup>18</sup> ad un livello che sarà determinato sperimentalmente al fine di ottenere il tasso massimo di anti-idrogeno. Anche se non è noto a priori questo livello è previsto appartenere al range  $n = 20 \div 40$ . Come affermato nel paragrafo 2.2.1, la richiesta di un numero quantico così elevato è legata strettamente alla dipendenza in  $n^4$  della sezione d'urto di formazione di anti-idrogeno. Dato che il positronio prodotto ha una temperatura massima di qualche centinaio di Kelvin ed inoltre l'apparato è sottoposto ad un campo magnetico di circa  $1T$ , i livelli energetici dell'atomo di positronio subiscono variazioni. L'energia di transizione tra lo stato fondamentale ed i livelli ad  $n = 20 \div 40$  è superiore a  $6 eV$ . Questo fatto impone l'utilizzo di due laser<sup>19</sup>: il primo darà luogo alla transizione  $n = 1 \rightarrow n = 3$  mentre il secondo  $n = 3 \rightarrow n = 20 \div 40$ . Il fatto che i laser sono impulsati ha suggerito la scelta del livello  $n = 3$  con vita media di  $10.5 ns$  rispetto ad  $n = 2$  con vita media più breve pari a solo  $3ns$ . Lo schema dei livelli dell'atomo di positronio con i salti energetici forniti dai due laser è illustrato in figura 2.10.

---

<sup>18</sup>Con  $n$  si è indicato il numero quantico principale

<sup>19</sup>Non esistono infatti in commercio laser in grado di permettere transizioni superiori in energia a  $6 eV$

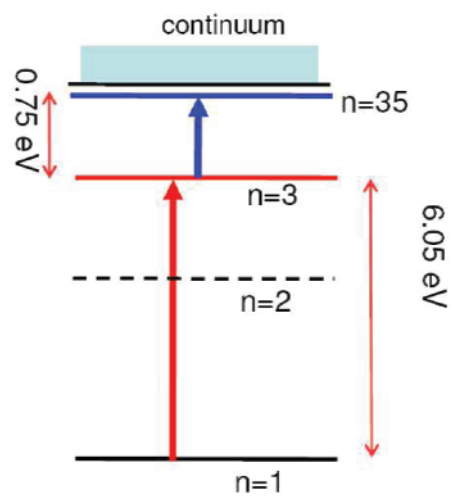


Figura 2.10: Livelli rilevanti al fine dell'esperimento dell'atomo di positronio. Come livello nel range  $n = 20 \div 40$  si è scelto  $n = 35$  (il grafico non è in scala).



## Capitolo 3

# Simulazione Monte Carlo ad Energie Intermedie

### 3.1 Introduzione

In assenza di dati sperimentali, la simulazione tramite metodo Monte Carlo del processo di formazione del positronio in Allumina è tra i pochi strumenti a nostra disposizione per stimare lo spettro energetico del positronio all'uscita della membrana Whatman. Lo schema utilizzato per la simulazione nell'intervallo di energie compreso tra  $5000\text{ eV}$  e  $20\text{ eV}$  si basa sul modello dell'energy loss approximation<sup>1</sup>. Durante il processo di rallentamento nel materiale il positrone compie un certo numero di scattering elastici con gli atomi del mezzo. Tali urti imprimono alla traiettoria del positrone una deviazione angolare descritta dalla sezione d'urto differenziale. Il calcolo di questa quantità, dato che il positrone si mantiene sempre in un regime non relativistico (energia massima  $5\text{ keV}$ ), può essere svolto risolvendo l'equazione di Schrödinger per un determinato potenziale elettrostatico. A. Jablonski<sup>2</sup> suggerisce, per misure di coefficienti di backscattering, l'utilizzo dell'equazione di Dirac invece di quella di Schrödinger. Inoltre, seppur non previsto dalla nostra simulazione Monte Carlo, risolvendo l'equazione di Dirac si può ottenere direttamente l'espressione del fattore di asimmetria, importante per lo studio dell'interazione di positroni polarizzati con la materia. Durante il processo di rallentamento dei positroni nel materiale, oltre a processi di tipo elastico studiati approfonditamente nel paragrafo 3.2, ne esistono molti altri di tipo anelastico quali ad esempio l'eccitazione o la ionizzazione degli atomi del mezzo od effetti radiativi. Vista la difficoltà nel ricavare le sezioni d'urto anelastiche di positrone su atomo per i singoli processi coinvolti, si è deciso nel nostro studio di operare con un approccio *medio* studiando l'Energy Stopping Power (ESP) di positroni nella materia. Questo permetterà quindi di

---

<sup>1</sup>Maggiori dettagli sono dati nel paragrafo 5.1.

<sup>2</sup>A. Jablonski, *Phys. Rev. B*, **43** (1991) 7546

ricavare la perdita di energia media per unità di cammino. Mediando su tutti i processi anelastici coinvolti, l'ESP riduce notevolmente la sensibilità della simulazione Monte Carlo ad effetti di tipo statistico che quindi non saranno considerati nel nostro lavoro. Mentre la formula per l'ESP per positroni con energia superiore ai 10 keV è stata teoricamente ben descritta e può essere trovata nelle tabelle in M. J. Berger e S. M. Selzer <sup>3</sup> e nel ICRU 37 Report <sup>4</sup>, esistono solo pochi modelli che descrivono l'ESP per energia dei positroni incidenti inferiori ai 10 keV. Tra questi abbiamo deciso di utilizzare per il nostro studio quello formulato da H. Gümüş e collaboratori <sup>5</sup>.

## 3.2 Processi Elastici

### 3.2.1 Urto Non Relativistico in Approssimazione di Born

Consideriamo ora il problema dello scattering non relativistico di positrone su atomo rappresentato da un potenziale centrale  $V(r)$ . Questo è descritto dalla sezione d'urto differenziale  $d\sigma/d\Omega$  definita come il rapporto tra il flusso di positroni per unità di tempo che emergono in un angolo solido  $d\Omega$  e il flusso di positroni incidente. Il flusso di particelle per unità di tempo che emergono sottendendo un angolo solido  $d\Omega$  dipende dalla componente radiale  $j_r$  della densità di corrente nella direzione uscente rispetto al centro del nucleo atomico. Il numero di positroni che emergono in un angolo solido  $d\Omega$  per unità di tempo è dato da  $j_r r^2 d\Omega$ . Consideriamo ora un fascio incidente di positroni diretti lungo l'asse  $z$  normalizzato ad una particella per unità di volume. Sia  $K = mv/\hbar$  il numero d'onda del positrone nella direzione  $z$ , dove  $v$  è la velocità del positrone ed  $m$  la sua massa. Questo fascio può essere rappresentato da un'onda piana del tipo  $e^{iKz}$ . Essendo il fascio incidente normalizzato ad una particella per unità di volume allora la velocità  $v$  rappresenta il flusso incidente. Come conseguenza:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = \frac{j_r r^2 d\Omega}{v d\Omega} = \frac{j_r r^2}{v} \quad (3.1)$$

A grande distanza dal nucleo atomico il potenziale  $V(r)$  è trascurabile e i positroni scatterati possono essere descritti da un'onda sferica del tipo  $e^{iKr}/r$ . Se  $f(\theta, \phi)$  è la costante di proporzionalità che rappresenta l'ampiezza dell'onda uscente, la funzione d'onda  $\psi(r, \theta, \phi)$  dell'intero processo di scattering soddisfa la condizione al contorno:

$$\psi(r, \theta, \phi) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{iKz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (3.2)$$

---

<sup>3</sup>M. J. Berger e S. M. Selzer, *Stopping Powers and ranges of electrons and positrons*, (National Bureau of Standards Report, NBSIR 82-2550 A, 1982)

<sup>4</sup>ICRU, Report No. 37, 1984, *Stopping powers for electrons and positrons*, (International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 1984)

<sup>5</sup>H. Gümüş, Ö. Kabaday e M. Ç. Tufan, *Chinese Journal of Physics*, **44** (2006) 290-296

La densità di probabilità per un positrone di trovarsi in un punto  $\mathbf{r}$  dello spazio è data da  $|\psi|^2 = \psi^*\psi$  mentre la densità di corrente  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  sarà:

$$\mathbf{j}(r, \theta, \phi, t) = \frac{i\hbar}{2m} [(\nabla\psi^*)\psi - \psi^*(\nabla\psi)] \quad (3.3)$$

La cui componente radiale sarà data da:

$$\begin{aligned} j_r(r, t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ f(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( f^*(\theta, \phi) \frac{e^{-iKr}}{r} \right) + \right. \\ &\quad \left. - f^*(\theta, \phi) \frac{e^{-iKr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( f(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \right) \right] \\ &= \frac{v|f(\theta, \phi)|^2}{r^2} \end{aligned} \quad (3.4)$$

confrontando queste equazione con 3.1 si deduce facilmente che:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (3.5)$$

Vogliamo calcolare ora la  $f(\theta, \phi)$  in funzione di  $V(\mathbf{r})$  con la condizione 3.2. Data l'equazione di Schrödinger:

$$(\nabla^2 + \mathbf{K}^2) \psi(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

Introducendo le condizioni al contorno 3.2, è possibile mostrare che risolvere l'equazione di Schrödinger è equivalente a risolvere la seguente equazione integrale:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iKz} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (3.7)$$

dove

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{iK|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (3.8)$$

è la funzione di Green dell'operatore  $\nabla^2 + \mathbf{K}^2$ . Come noto, questo operatore soddisfa l'equazione:

$$(\nabla^2 + \mathbf{K}^2) g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.9)$$

dove con  $\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  intendiamo la funzione delta di Dirac in tre dimensioni. Applicando ora l'operatore  $\nabla^2 + \mathbf{K}^2$  alla funzione  $\psi(\mathbf{r})$  definita dall'equazione integrale 3.7 otteniamo:

$$(\nabla^2 + \mathbf{K}^2) \psi(\mathbf{r}) = (\nabla^2 + \mathbf{K}^2) e^{iKz} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' (\nabla^2 + \mathbf{K}^2) g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (3.10)$$

Facendo agire l'operatore  $\nabla$  sull'onda piana  $e^{iKz}$  abbiamo:

$$\nabla^2 e^{iKz} = \frac{\partial^2}{\partial z^2} e^{iKz} = -K^2 e^{iKz} \quad (3.11)$$

e quindi possiamo semplicemente scrivere:

$$\left(\nabla^2 + \mathbf{K}^2\right) e^{iKz} = 0 \quad (3.12)$$

da cui:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + \mathbf{K}^2)\psi(\mathbf{r}) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' (\nabla^2 + \mathbf{K}^2)g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Dalle condizioni al contorno abbiamo:

$$\begin{aligned} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| &= \sqrt{\mathbf{r}^2 + 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + \mathbf{r}'^2} \\ &= r \sqrt{1 - \frac{2\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}{r} + \frac{\mathbf{r}'^2}{r^2}} \\ &\sim r \left[ 1 - \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.14)$$

dove con  $\hat{\mathbf{r}}$  abbiamo indicato il versore:

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (3.15)$$

Introduciamo ora il vettore  $\mathcal{K}$ , numero d'onda nella direzione del versore uscente  $\hat{\mathbf{r}}$ , definito come:

$$\mathcal{K} \equiv K\hat{\mathbf{r}} \quad (3.16)$$

In questo modo la funzione di Green per l'operatore  $\nabla^2 + \mathbf{K}^2$  espressa in 3.8 assume la forma asintotica:

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{e^{iKr - i\mathcal{K} \cdot \mathbf{r}'}}{4\pi r} \quad (3.17)$$

Sostituendo queste espressione nell'equazione integrale 3.7 otteniamo:

$$\psi(\mathbf{r}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{iKz} - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{iKr - i\mathcal{K} \cdot \mathbf{r}'}}{4\pi r} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \quad (3.18)$$

e dato che

$$\int d^3r' \frac{e^{iKr - i\mathcal{K} \cdot \mathbf{r}'}}{4\pi r} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') = \frac{e^{iKr}}{r} \int d^3r' \frac{e^{-i\mathcal{K} \cdot \mathbf{r}'}}{4\pi} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') \quad (3.19)$$

possiamo concludere che l'ampiezza di scattering è data da:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathcal{K}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (3.20)$$

esprimendo quindi  $f(\theta, \phi)$  in funzione di  $V(\mathbf{r})$ . In quest'ultima equazione  $\mathcal{K}$  assume il significato di numero d'onda del positrone scatterato e  $\psi(\mathbf{r})$  la sua funzione d'onda. Supponiamo ora che il rapporto tra l'energia cinetica del positrone e l'energia potenziale dell'atomo sia sufficientemente alto da rendere lo scattering debole in modo tale che la funzione d'onda  $\psi(\mathbf{r})$  non sia molto differente dall'onda piana incidente  $e^{iKz}$ . Questa è l'assunzione che sta alla base della prima approssimazione di Born, cioè:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.21)$$

Questa risulta essere un'approssimazione di alta energia. Se con  $E$  indichiamo l'energia del positrone incidente,  $e$  la sua carica,  $a_0$  il raggio di Bohr e  $Z$  il numero atomico dell'atomo su cui il positrone incide, la prima approssimazione di Born è sufficientemente accurata se:

$$E \gg \frac{e^2}{2a_0} Z^2 \quad (3.22)$$

Utilizzando la prima approssimazione di Born, l'equazione 3.20 diviene:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathcal{K}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.23)$$

Se indichiamo con  $\hbar\mathbf{q}$  il momento trasferito dal positrone incidente all'atomo,

$$\hbar\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{K} - \mathcal{K}) \quad (3.24)$$

per positroni veloci possiamo allora scrivere che

$$f(\theta, \phi) = f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi r^2 dr e^{iqr\cos(\theta)} V(r) \quad (3.25)$$

ed integrando otteniamo:

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \sin(qr) V(r) r dr \quad (3.26)$$

Noi siamo interessati al calcolo della sezione d'urto differenziale elastica nella prima approssimazione di Born per un potenziale di Coulomb schermato di tipo Yukawa <sup>6</sup>,

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-\frac{r}{a}} \quad (3.27)$$

---

<sup>6</sup>G. Wentzel, *Z. Phys.* **40**, (1927) 590

dove il fattore esponenziale rappresenta una rozza approssimazione dell'effetto schermo degli elettroni orbitali sulla carica nucleare, mentre il parametro  $a$  è definito come:

$$a = \frac{a_0}{Z^{1/3}} \quad (3.28)$$

dove  $a_0 = \hbar^2/me^2$  è il raggio di Bohr. Possiamo quindi calcolare ora l'ampiezza di scattering:

$$f(\theta) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{q} \int_0^\infty \sin(qr) e^{-\frac{r}{a}} dr \quad (3.29)$$

e dato che

$$\int_0^\infty \sin(qr) e^{-\frac{r}{a}} dr = \frac{q}{q^2 + \left(\frac{1}{a}\right)^2} \quad (3.30)$$

possiamo concludere che:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2}{\hbar^4} \frac{Z^2 e^4}{\left[q^2 + \left(\frac{1}{a}\right)^2\right]^2} \quad (3.31)$$

Essendo però  $|\mathbf{K}| = |\mathcal{K}|$  e  $q = \mathbf{K} - \mathcal{K}$  abbiamo che

$$\mathbf{q}^2 = (\mathbf{K} - \mathcal{K}) \cdot (\mathbf{K} - \mathcal{K}) = \mathbf{K}^2 + \mathcal{K}^2 - 2K\mathcal{K}\cos\theta = 2\mathbf{K}^2(1 - \cos\theta) \quad (3.32)$$

dove  $\theta$  è l'angolo di scattering. L'energia cinetica del positrone è data da:

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2m} \quad (3.33)$$

così che la sezione d'urto differenziale elastica per l'urto di un fascio di positroni con un potenziale atomico di tipo Yukawa è data, in prima approssimazione di Born, da:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \frac{1}{(1 - \cos\theta + \alpha)^2} \quad (3.34)$$

dove  $\alpha$  è il parametro di screening dato da:

$$\alpha = \frac{1}{2K^2 a^2} = \frac{me^4 \pi^2 Z^{2/3}}{\hbar^2 E} \quad (3.35)$$

La ben nota forma classica di Rutherford

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \frac{1}{(1 - \cos\theta)^2} \quad (3.36)$$

può essere facilmente ottenuta imponendo  $\alpha = 0$ . La sezione d'urto totale elastica definita come

$$\sigma_{el} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (3.37)$$

può facilmente essere calcolata per un potenziale tipo Yukawa come:

$$\sigma_{el} = \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{1}{(1 - \cos\theta + \alpha)^2} = \frac{\pi Z^2 e^4}{E^2} \frac{1}{\alpha(2 + \alpha)} \quad (3.38)$$

Se  $\alpha \rightarrow 0$ , ovvero la sezione d'urto differenziale elastica è data dalla formula classica di Rutherford, la sezione d'urto totale elastica diverge riflettendo la natura a lungo range di un potenziale coulombiano puro.

### 3.2.2 L'equazione di Dirac per un Potenziale Centrale

Consideriamo ora la teoria quantistica dell'urto relativistico abbiamo bisogno di conoscere la forma dell'equazione di Dirac per un positrone in presenza di un campo elettrostatico centrale descritto da un potenziale centrale del tipo  $e\phi(r) = V(r)$ . Questa sarà data da:

$$\left[ \left( i \frac{\partial}{\partial t} - e\phi(r) \right) - \alpha \cdot \mathbf{p} - m\beta \right] \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (3.39)$$

dove  $\alpha$  e  $\beta$  sono le matrici di Dirac,  $m$  ed  $e$  rispettivamente la massa e la carica elettrica del positrone,  $\psi(\mathbf{r}, t)$  spinore a quattro componenti ed infine  $\mathbf{p}$  la quantità di moto del positrone. Per trovare la soluzione dell'equazione di Dirac nella teoria quantistica dell'urto relativistico è necessario ricavare le *equazioni fondamentali della teoria dell'urto elastico di positrone su atomo*<sup>7</sup>. Queste sono state ricavate da C. G. Darwin<sup>8</sup> e L. L. Foldy<sup>9</sup>. La trattazione che seguirà sarà tratta dal lavoro di quest'ultimo autore<sup>10</sup>. Iniziamo introducendo l'operatore  $\mathcal{K}$  definito come:

$$\mathcal{K} \equiv \beta(1 + \sigma \cdot \mathbf{L}) \quad (3.40)$$

dove  $\sigma$  e  $\mathbf{L}$  sono rispettivamente lo spin e il momento angolare orbitale del positrone. Per un positrone in un campo centrale elettrostatico è possibile dimostrare che:

$$2 \frac{d\mathbf{L}}{dt} = - \frac{d\sigma}{dt} \quad (3.41)$$

Come conseguenza si ha che il momento angolare totale, definito come  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + (1/2)\sigma$ , è una costante del moto. Dato che:

$$\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 = \sigma \cdot \mathbf{L} + \frac{3}{4} \quad (3.42)$$

<sup>7</sup>N. F. Mott and H. S. W. Massy, *The theory of atomic collision* (Oxford U. Press, Oxford, 1949) second ed., pp. 74 - 76

<sup>8</sup>C. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc. A*, **118**, 654 (1928)

<sup>9</sup>L. L. Foldy, *Quantum Theory III, Radiation and High Energy Physics*, ed. D. R. Bates (Academic Press, New York, 1962)

<sup>10</sup>M. Dapor, *Electron-Beam Interactions with Solids, Application of the Monte Carlo Method to Electron Scattering Problems*, ed. Springer (Springer Tracts in Modern Physics Vol. 186, 2003), pp. 13 - 16

possiamo concludere che:

$$\mathcal{K} = \beta \left( \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \frac{1}{4} \right) \quad (3.43)$$

$\mathcal{K}$  commuta con l'operatore hamiltoniano  $H$ , ovvero  $\mathcal{K}$  è costante del moto. Definiamo ora l'operatore quantità di moto radiale del positrone  $p_r$  come:

$$p_r \equiv -i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - i}{r} \quad (3.44)$$

e l'operatore componente radiale delle matrici di Dirac  $\alpha_r$  come:

$$\alpha_r = \frac{\alpha \cdot \mathbf{r}}{r} \quad (3.45)$$

Quest'ultimo rispetta la relazione:

$$\alpha_r^2 = 1 \quad (3.46)$$

Per ogni coppia di vettori  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$  valgono le seguenti relazioni:

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b} \quad (3.47)$$

e

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{b}) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \quad (3.48)$$

Come conseguenza,

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) = r p_r + i\beta \mathcal{K} \quad (3.49)$$

Questa ultima equazione è equivalente a:

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) = \alpha_r \left( p_r + \frac{i\beta \mathcal{K}}{r} \right) \quad (3.50)$$

Come risultato l'equazione di Dirac agli autovalori può essere riscritta come:

$$H\psi = \left[ \alpha_r \left( p_r + \frac{i\beta \mathcal{K}}{r} \right) + m\beta + V(r) \right] \psi = E\psi \quad (3.51)$$

Gli operatori  $\beta$ ,  $\mathcal{K}$ ,  $\mathbf{L}^2$  e  $L_z$  sono tra loro commutanti e quindi ammettono un sistema ortonormale completo di autovettori comune. Indichiamo tali autovettori con  $\mathcal{X}$ , allora:

$$\begin{cases} \beta \mathcal{X} = \mathcal{X} \\ \mathcal{K} \mathcal{X} = -k \mathcal{X} \\ \mathbf{L}^2 \mathcal{X} = l(l+1) \mathcal{X} \\ J_z \mathcal{X} = m_j \mathcal{X} \end{cases} \quad (3.52)$$

Introduciamo ora la funzione  $\mathcal{Y}$ , definita come:

$$\mathcal{Y} = -\alpha_r \mathcal{X} \quad (3.53)$$

da questa definizione seguono alcune proprietà quali:

$$\mathcal{X} = -\alpha_r \mathcal{Y} \quad (3.54)$$

$$\mathcal{K} \mathcal{Y} = -k \mathcal{Y} \quad (3.55)$$

$$\beta \mathcal{Y} = \alpha_r \beta \mathcal{X} = -\mathcal{Y} \quad (3.56)$$

Consideriamo quindi la seguente combinazione lineare di  $\mathcal{X}$  ed  $\mathcal{Y}$ :

$$\psi = F(r) \mathcal{Y} + iG(r) \mathcal{X} \quad (3.57)$$

questa è un autovettore comune ad  $H$ ,  $\mathcal{K}$  e  $J_z$  e rappresenta quindi lo spinore  $\psi(\mathbf{r}, t)$  indicato in 3.39. Ci si prefigge ora come obiettivo quello di ricavare le funzioni  $F(r)$  e  $G(r)$ . Per fare questo si osservi che gli autovalori dell'operatore  $\mathbf{L}^2$  sono, nel caso di positroni,  $(j \pm 1/2)(j \pm 1/2 + 1)$ . Dalla definizione 3.43 abbiamo che gli autovalori di  $\mathcal{K}$  sono rispettivamente nel caso di positroni a spin up e a spin down:

$$\begin{cases} k^{up} = -\left(j + \frac{1}{2}\right) = -(l + 1) \\ k^{down} = \left(j + \frac{1}{2}\right) = l \end{cases} \quad (3.58)$$

Siamo quindi ora in grado di poter scrivere le equazioni cui obbediscono le funzioni radiali  $F(r)$  e  $G(r)$  note come equazioni fondamentali della teoria dell'urto elastico di positrone su atomo. Prima di fare questo consideriamo l'equazione di Dirac 3.51 ed osserviamo quanto segue:

$$\alpha_r p_r F(r) \mathcal{Y} = i \left[ \frac{dF(r)}{dr} + \frac{F(r)}{r} \right] \mathcal{X} \quad (3.59)$$

$$i \alpha_r p_r G(r) \mathcal{X} = - \left[ \frac{dG(r)}{dr} + \frac{G(r)}{r} \right] \mathcal{Y} \quad (3.60)$$

$$\frac{i \alpha_r \beta \mathcal{K}}{r} F(r) \mathcal{Y} = -\frac{i}{r} F(r) k \mathcal{X} \quad (3.61)$$

$$\frac{i \alpha_r \beta \mathcal{K}}{r} i G(r) \mathcal{X} = -\frac{1}{r} G(r) k \mathcal{Y} \quad (3.62)$$

$$m \beta F(r) \mathcal{Y} = -m F(r) \mathcal{Y} \quad (3.63)$$

$$i m \beta G(r) \mathcal{X} = i m G(r) \mathcal{X} \quad (3.64)$$

Da queste ultime due relazioni si osservi che, avendo autovalori dell'operatore  $\beta$  differenti,  $\mathcal{X}$  ed  $\mathcal{Y}$  sono funzioni linearmente indipendenti. Le equazioni fondamentali della teoria dell'urto elastico di positrone su atomo, ovvero l'equazione di Dirac riscritta per un potenziale centrale, sono quindi:

$$[E + m - V(r)] F(r) + \frac{dG(r)}{dr} + \frac{1+k}{r} G(r) = 0 \quad (3.65)$$

$$- [E - m - V(r)] G(r) + \frac{dF(r)}{dr} + \frac{1-k}{r} F(r) = 0 \quad (3.66)$$

### 3.2.3 Metodo relativistico dello sviluppo in onde parziali

Consideriamo nuovamente lo studio dello scattering di positroni su atomo e supponiamo di avere un flusso di positroni di massa  $m$  che si muovono con velocità  $v$  da sinistra verso destra lungo un asse che identifichiamo con  $z$ . Rappresentiamo ora questo fascio di positroni con un'onda piana del tipo  $a \cdot e^{iKz}$  con  $K$  numero d'onde associato pari a  $K = (2\pi mv)/h$ . Questa inciderà contro l'atomo responsabile dello scattering. L'ampiezza dell'onda scatterata nel punto  $(r, \theta, \phi)$  di un sistema di riferimento polare con centro nell'atomo sarà data da:

$$b(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (3.67)$$

Il problema dello scattering si riduce quindi al calcolo della funzione  $b(\theta, \phi)$  ovvero alla determinazione della soluzione  $\psi(r, \theta, \phi)$  dell'equazione d'onda che a grande distanza dall'atomo rappresenta l'onda incidente e quella scatterata. Ovvero:

$$\psi(r, \theta, \phi) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} a e^{iKz} + b(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (3.68)$$

L'equazione fondamentale della meccanica quantistica relativistica per positroni (fermioni) è l'equazione di Dirac. In questo caso la funzione d'onda  $\psi(r, \theta, \phi)$  è rappresentata da uno spinore a quattro componenti, la cui forma asintotica per grandi valori di  $r$  assumiamo sia:

$$\psi(r, \theta, \phi)_i \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} a_i e^{iKz} + b_i(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (3.69)$$

con  $i = 1, 2, 3, 4$ . La sezione d'urto differenziale elastica del processo di scattering è data da:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) &= \frac{|b_1|^2 + |b_2|^2 + |b_3|^2 + |b_4|^2}{|a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 + |a_4|^2} \\ &= \frac{|b_1|^2 + |b_2|^2 + c|b_1|^2 + c|b_2|^2}{|a_1|^2 + |a_2|^2 + c|a_1|^2 + c|a_2|^2} \\ &= \frac{|b_1|^2 + |b_2|^2}{|a_1|^2 + |a_2|^2} \end{aligned} \quad (3.70)$$

dove  $c$  è una costante di proporzionalità che prende in considerazione il fatto che i coefficienti  $a_i$  e  $b_i$  non sono tutti indipendenti. Se lo spin del positrone è parallelo alla direzione incidente (spin up) allora  $a_1 = 1$ ,  $a_2 = 0$ ,  $b_1 \equiv f^+(\theta, \phi)$  e  $b_2 \equiv g^+(\theta, \phi)$ , dove  $f^+$  e  $g^+$  sono due ampiezze di scattering.

La forma asintotica della funzione d'onda risulta allora descritta dalle seguenti equazioni:

$$\psi(r, \theta, \phi)_1^{up} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{iKz} + f^+(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (3.71)$$

$$\psi(r, \theta, \phi)_2^{up} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} g^+(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (3.72)$$

analogamente nel caso di spin antiparallelo alla direzione dei positroni incidenti (spin down) abbiamo  $a_1 = 0$ ,  $a_2 = 1$ ,  $b_1 \equiv g^-(\theta, \phi)$  e  $b_2 \equiv f^-(\theta, \phi)$ . In questo caso sarà data da:

$$\psi(r, \theta, \phi)_1^{down} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} g^-(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (3.73)$$

$$\psi(r, \theta, \phi)_2^{down} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{iKz} + f^-(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \quad (3.74)$$

L'equazioni di Dirac per un positrone in un campo centrale, ovvero le equazioni fondamentali della teoria dell'urto elastico di positrone su atomo, sono date da (v. pag. 37):

$$[E + m - V(r)] F_l^\pm(r) + \frac{dG_l^\pm(r)}{dr} + \frac{1+k}{r} G_l^\pm(r) = 0 \quad (3.75)$$

$$-[E - m - V(r)] G_l^\pm(r) + \frac{dF_l^\pm(r)}{dr} + \frac{1-k}{r} F_l^\pm(r) = 0 \quad (3.76)$$

dove l'apice + indica il caso di positroni spin up, mentre - positroni a spin down. Il pedice  $l$  è stato indicato per sottolineare la dipendenza delle funzioni  $F^\pm(r)$  e  $G^\pm(r)$  dal parametro  $k$ , a sua volta legato al numero quantico orbitale  $l$  come indicato in 3.58. Introduciamo ora tre nuove variabili così definite:

$$\mu(r) \equiv E + m - V(r) \quad (3.77)$$

$$\nu(r) \equiv E - m - V(r) \quad (3.78)$$

$$\mu'(r) = \frac{d\mu(r)}{dr} \quad (3.79)$$

$$\mu''(r) = \frac{d^2\mu(r)}{dr^2} \quad (3.80)$$

L'equazione di Dirac può essere così riscritta:

$$\begin{cases} F_l^\pm(r) = -\frac{1}{\mu} \left( \frac{dG_l^\pm(r)}{dr} + \frac{1+k}{r} G_l^\pm(r) \right) \\ \frac{dF_l^\pm(r)}{dr} = \frac{\mu'}{\mu^2} \left( \frac{dG_l^\pm(r)}{dr} + \frac{1+k}{r} G_l^\pm(r) \right) + \\ -\frac{1}{\mu} \left( \frac{d^2 G_l^\pm(r)}{dr^2} + \frac{1+k}{r} \frac{dG_l^\pm(r)}{dr} - \frac{1+k}{r^2} \right) G_l^\pm(r) \end{cases} \quad (3.81)$$

Dopo alcuni semplici operazioni algebriche, per eliminazione della funzione  $F_l^\pm(r)$ , si ottiene:

$$\frac{d^2 G_l^\pm(r)}{dr^2} + \left( \frac{2}{r} - \frac{\mu'}{\mu} \right) \frac{dG_l^\pm(r)}{dr} + \left( \mu\nu - \frac{k(k+1)}{r^2} - \frac{1+k}{r} \frac{\mu'}{\mu} \right) G_l^\pm(r) = 0 \quad (3.82)$$

Introduciamo ora la funzione  $\mathcal{G}_l^\pm(r)$  definita come:

$$\mathcal{G}_l^\pm(r) \equiv \frac{r}{\sqrt{\mu}} G_l^\pm(r) \quad (3.83)$$

Partendo dal fatto che  $K^2 = E^2 - m^2$  è possibile osservare che  $\nu\mu = K^2 - 2EV(r) + V^2(r)$ . Possiamo quindi concludere che una volta definita la funzione  $U_l^\pm(r)$  come:

$$-U_l^\pm(r) = -2EV(r) + V^2(r) - \frac{k\mu'}{r\mu} + \frac{1\mu''}{2\mu} - \frac{3\mu'^2}{4\mu^2} \quad (3.84)$$

l'equazione di Dirac per il problema dello scattering di positrone su atomo può essere riscritta come:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{k(k+1)}{r^2} + K^2 - U_l^\pm(r) \right] \mathcal{G}_l^\pm(r) = 0 \quad (3.85)$$

Per grandi valori di  $r$ , la funzione  $\mathcal{G}_l^\pm(r)$  è essenzialmente sinusoidale. Infatti quando la distanza dall'atomo responsabile dello scattering aumenta il potenziale  $V(r)$  risulta trascurabile,  $U_l^\pm(r)$  si riduce ad una costante e la soluzione dell'equazione 3.85 si riduce alla combinazione lineare di funzioni regolari e irregolari di Bessel moltiplicate per  $Kr$ . Prendendo in considerazione il fatto che, come espresso in 3.83,  $\mathcal{G}_l^\pm(r)$  è funzione di  $G_l^\pm(r)$  possiamo concludere che:

$$G_l^\pm(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} j_l(Kr) \cos \eta_l^\pm - n_l(Kr) \sin \eta_l^\pm \quad (3.86)$$

dove  $\eta_l^\pm$  sono costanti da determinare. Considerando ora la forma asintotica delle funzioni di Bessel:

$$j_l(Kr) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{Kr} \sin \left( Kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (3.87)$$

$$n_l(Kr) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{Kr} \cos \left( Kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (3.88)$$

otteniamo per la forma asintotica di  $G_l^\pm(r)$ :

$$G_l^\pm(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{Kr} \sin \left( Kr - \frac{l\pi}{2} \right) \cos \eta_l^\pm + \frac{1}{Kr} \cos \left( Kr - \frac{l\pi}{2} \right) \sin \eta_l^\pm \quad (3.89)$$

Perciò,

$$G_l^+(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{Kr} \sin \left( Kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l^+ \right) \quad (3.90)$$

e

$$G_l^-(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{Kr} \sin \left( Kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l^- \right) \quad (3.91)$$

Gli shift di fase  $\eta_l^\pm$  rappresentano l'effetto del potenziale  $V(r)$  sulle fasi delle onde scatterate. Si può dimostrare che:

$$e^{iKr\cos(\theta)} = e^{iKz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)i^l j_l(Kr) P_l(\cos(\theta)) \quad (3.92)$$

dove con  $P_l(\theta)$  abbiamo indicato i polinomi di Legendre e  $j_l$  le funzioni di Bessel sferiche. Ricordiamo inoltre che le funzioni  $\psi_1(r, \theta, \phi)$  e  $\psi_2(r, \theta, \phi)$  soddisfano le condizioni asintotiche studiate a pagina 38 e seguenti. Così è possibile espandere anch'esse in armoniche sferiche:

$$\begin{cases} \psi_1(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} [A_l G_l^+(r) + B_l G_l^-(r)] P_l(\cos\theta) \\ \psi_2(r, \theta, \phi) = \sum_{l=1}^{\infty} [C_l G_l^+(r) + D_l G_l^-(r)] P_l^1(\cos\theta) e^{i\phi} \end{cases} \quad (3.93)$$

dove con  $P_l^1(\cos\theta)$  abbiamo indicato il polinomio associato di Legendre di ordine uno, mentre i coefficienti  $A_l$ ,  $B_l$ ,  $C_l$  e  $D_l$  possono essere determinati nota la forma asintotica delle funzioni coinvolte. Cominciamo così con l'osservare che:

$$\psi_1(r, \theta, \phi) - e^{iKz} = \sum_{l=0}^{\infty} [A_l G_l^+(r) + B_l G_l^-(r) - (2l+1)i^l j_l(Kr)] P_l(\cos\theta) \quad (3.94)$$

ma essendo

$$\psi_1(r, \theta, \phi) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{iKr}}{r} f^+(\theta, \phi) \quad (3.95)$$

dobbiamo avere che

$$\begin{aligned} \frac{1}{Kr} \sum_{l=0}^{\infty} \left[ A_l \sin\left(Kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l^+\right) + B_l \sin\left(Kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l^-\right) + \right. \\ \left. - (2l+1)i^l \sin\left(Kr - \frac{l\pi}{2}\right) \right] P_l(\cos\theta) \\ = \frac{e^{iKr}}{r} f^+(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (3.96)$$

Come conseguenza:

$$\begin{aligned} \frac{e^{iKr}}{2iKr} \sum_{l=0}^{\infty} e^{-i\frac{l\pi}{2}} \left[ A_l e^{i\eta_l^+} + B_l e^{i\eta_l^-} - (2l+1)i^l \right] P_l(\cos\theta) + \\ - \frac{e^{-iKr}}{2iKr} \sum_{l=0}^{\infty} e^{i\frac{l\pi}{2}} [A_l e^{-i\eta_l^+} + B_l e^{-i\eta_l^-} - (2l+1)i^l] P_l(\cos\theta) \\ = \frac{e^{iKr}}{r} f^+(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (3.97)$$

allora le condizioni di asintoticità saranno soddisfatte solo se:

$$A_l e^{-i\eta_l^+} + B_l e^{-i\eta_l^-} = (2l+1)i^l \quad (3.98)$$

Una possibile scelta è:

$$A_l = l^l e^{i\eta_l^+} \quad (3.99)$$

$$B_l = (l+1)l^l e^{i\eta_l^-} \quad (3.100)$$

analogamente, rifacendo gli stessi calcoli con la funzione  $\psi_2(r, \theta, \phi)$ , otteniamo come possibile scelta dei coefficienti  $C_l$  e  $D_l$ :

$$C_l = i^l e^{i\eta_l^+} \quad (3.101)$$

$$D_l = -i^l e^{i\eta_l^-} \quad (3.102)$$

Concludendo, per positroni con spin paralleli alla direzione di incidenza abbiamo:

$$\begin{cases} \psi_1(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \left[ (l+1)e^{i\eta_l^-} G_l^-(r) + l e^{i\eta_l^+} G_l^+(r) \right] i^l P_l(\cos\theta) \\ \psi_2(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \left[ e^{i\eta_l^+} G_l^+(r) - e^{i\eta_l^-} G_l^-(r) \right] i^l P_l^1(\cos\theta) e^{i\phi} \end{cases} \quad (3.103)$$

usando ora la condizione 3.97 otteniamo:

$$\begin{cases} f^+(\theta, \phi) = f^+(\theta) = \\ = \frac{1}{2iK} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ (l+1) \left[ e^{2i\eta_l^-} - 1 \right] + l \left[ e^{2i\eta_l^+} - 1 \right] \right\} P_l(\cos\theta) \\ g^+(\theta, \phi) = \frac{1}{2iK} \sum_{l=0}^{\infty} \left[ e^{2i\eta_l^+} - e^{2i\eta_l^-} \right] P_l^1(\cos\theta) e^{i\phi} \end{cases} \quad (3.104)$$

Per positroni con spin antiparallelo (spin down) le cui ampiezze di scattering sono state indicate con  $f^-$  e  $g^-$ , possiamo osservare che:

$$f^-(\theta, \phi) = f^+(\theta, \phi) \quad (3.105)$$

e

$$g^-(\theta, \phi) = -g^+(\theta, \phi) e^{-2i\phi} \quad (3.106)$$

Diviene allora conveniente definire le funzioni:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{A}_l P_l(\cos\theta) \quad (3.107)$$

$$g(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{B}_l P_l^1(\cos\theta) \quad (3.108)$$

dove

$$\mathcal{A}_l = \frac{1}{2iK} \left\{ (l+1) \left[ e^{2i\eta_l^-} - 1 \right] + l \left[ e^{2i\eta_l^+} - 1 \right] \right\} \quad (3.109)$$

$$\mathcal{B}_l = \frac{1}{2iK} \left\{ e^{2i\eta_l^+} - e^{2i\eta_l^-} \right\} \quad (3.110)$$

Con questa notazione abbiamo che:

$$f^+ = f^- = f \quad (3.111)$$

$$g^+ = ge^{i\phi} \quad (3.112)$$

$$g^- = -ge^{-i\phi} \quad (3.113)$$

Per una direzione arbitraria dello spin, l'onda piana incidente del positrone sarà data da  $\psi_1(r, \theta, \phi) = Ae^{iKz}$  e  $\psi_2(r, \theta, \phi) = Be^{iKz}$ , e come conseguenza  $a_1 = A$  ed  $a_2 = B$ . Allora:

$$b_1 = Af^+ + Bg^- = Af - Bge^{-i\phi} \quad (3.114)$$

$$b_2 = Ag^+ + Bf^- = Bf + Age^{i\phi} \quad (3.115)$$

conseguentemente

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = (|f|^2 + |g|^2) \left\{ 1 + iS(\theta) \left[ \frac{AB * e^{i\phi} - A * Be^{-i\phi}}{|A|^2 + |B|^2} \right] \right\} \quad (3.116)$$

dove  $S(\theta)$  è il fattore di asimmetria o funzione di Sherman definita come:

$$S(\theta) = i \frac{fg * - f * g}{|f|^2 + |g|^2} \quad (3.117)$$

Si osservi che:

$$i \frac{AB * e^{i\phi} - A * Be^{-i\phi}}{|A|^2 + |B|^2} = \xi^\dagger (\sigma_2 \cos\phi - \sigma_1 \sin\phi) \xi \quad (3.118)$$

dove  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  e  $\sigma_3$  sono le matrici di Pauli mentre  $\xi$  è lo spinore a due componenti:

$$\xi = \begin{pmatrix} \frac{A}{\text{sqrt}|A|^2 + |B|^2} \\ \frac{B}{\text{sqrt}|A|^2 + |B|^2} \end{pmatrix} \quad (3.119)$$

$$\xi^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{A*}{\text{sqrt}|A|^2 + |B|^2} \\ \frac{B*}{\text{sqrt}|A|^2 + |B|^2} \end{pmatrix} \quad (3.120)$$

Come asse  $z$  si era considerato quello diretto lungo la direzione dei positroni incidenti per cui il versore perpendicolare al piano di scattering è dato da:

$$\hat{\mathbf{n}} = (-\sin\phi, \cos\phi, 0) \quad (3.121)$$

in questo modo possiamo scrivere:

$$\xi^\dagger (\sigma_2 \cos\phi - \sigma_1 \sin\phi) \xi = \mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (3.122)$$

dove  $\mathbf{P}$  è il vettore polarizzazione del fascio di positroni incidenti prima dell'urto. La sezione differenziale elastica può quindi essere riscritta come:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = (|f|^2 + |g|^2) [1 + S(\theta) \mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{n}}] \quad (3.123)$$

Nel nostro studio avremo come sorgente di positroni incidenti un fascio non polarizzato. In tal caso  $\mathbf{P} = \mathbf{0}$  per cui:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = |f|^2 + |g|^2 \quad (3.124)$$

La sezione d'urto totale elastica  $\sigma_{el}$  e quella di trasporto  $\sigma_{tr}$ , definite come:

$$\sigma_{el} = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta \quad (3.125)$$

$$\sigma_{tr} = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos\theta) \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta \quad (3.126)$$

possono essere facilmente calcolate per integrazione numerica. Si osservi infine che imponendo  $\eta_l^- = \eta_l^+ = \eta_l$  nelle precedenti equazioni si ottiene lo stesso valore di  $f(\theta, \phi)$  ricavato utilizzando l'equazione di Schrödinger. In questo caso:

$$\mathcal{A}_l = \frac{1}{2iK} \left\{ (l+1) [e^{2im} - 1] + l [e^{2im} - 1] \right\} \quad (3.127)$$

$$\mathcal{B}_l = 0 \quad (3.128)$$

così che

$$f(\theta) = \frac{1}{2iK} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{2im} - 1] P_l(\cos\theta) \quad (3.129)$$

$$g(\theta) = 0 \quad (3.130)$$

e quindi:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (3.131)$$

come visto nel paragrafo 3.2.1.

### 3.2.4 Calcolo degli shift di fase

Allo scopo di calcolare gli shift di fase è conveniente applicare le seguenti trasformazioni <sup>11</sup>:

$$F_l^\pm(r) = a_l^\pm(r) \frac{\sin\phi_l^\pm(r)}{r} \quad (3.132)$$

$$G_l^\pm(r) = a_l^\pm(r) \frac{\cos\phi_l^\pm(r)}{r} \quad (3.133)$$

si può dimostrare che con semplici passaggi algebrici le equazioni fondamentali della teoria dell'urto elastico di positrone su atomo 3.75 ed 3.76 sono equivalenti ad:

$$[E + m - V(r)] \tan\phi_l^\pm(r) + \frac{1}{a_l^\pm(r)} \frac{da_l^\pm(r)}{dr} - \tan\phi_l^\pm(r) \frac{d\phi_l^\pm(r)}{dr} + \frac{k}{r} = 0 \quad (3.134)$$

<sup>11</sup>S. Lin, N. Sherman and J. Percus, *Nucl. Phys.*, **45** (1963) 492

$$- [E - m - V(r)] \cot \phi_l^\pm(r) + \frac{1}{a_l^\pm(r)} \frac{da_l^\pm(r)}{dr} + \cot \phi_l^\pm(r) \frac{d\phi_l^\pm(r)}{dr} - \frac{k}{r} = 0 \quad (3.135)$$

ovvero

$$\frac{d\phi_l^\pm(r)}{dr} = \frac{k}{r} \sin 2\phi_l^\pm(r) - m \cos 2\phi_l^\pm(r) + E - V(r) \quad (3.136)$$

$$\frac{1}{a_l^\pm(r)} \frac{da_l^\pm(r)}{dr} = -\frac{k}{r} \cos 2\phi_l^\pm(r) - m \sin 2\phi_l^\pm(r) \quad (3.137)$$

Il potenziale elettrostatico a simmetria centrale  $V(r)$  avvertito da una carica puntiforme ad una distanza  $r$  dall'atomo, centro di scattering, con  $0 < r < \hbar/mc$  può essere approssimato nel modo seguente:

$$V(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} -\frac{Z_0 + Z_1 r + Z_2 r^2 + Z_3 r^3}{r} \quad (3.138)$$

Supponiamo ora di esprimere il potenziale elettrostatico come prodotto del potenziale generato dal nucleo moltiplicato per la funzione di screening di Cox e Bonham<sup>12</sup>  $\zeta(r)$  data da:

$$\zeta(r) = \sum_{i=1}^p A_i e^{-\alpha_i r} \quad (3.139)$$

con

$$\sum_{i=1}^p A_i = 1 \quad (3.140)$$

dove  $p$ ,  $A_i$  e  $\alpha_i$  dipendono dall'atomo considerato. Questa è un'approssimazione analitica della funzione di schermo atomico di Hartree - Fock. È possibile allora valutare i parametri  $Z_0, Z_1, Z_2$  e  $Z_3$  come:

$$Z_0 = Z e^2 \sum_i A_i = Z e^2 \quad (3.141)$$

$$Z_1 = -Z_0 \sum_{i=1}^p \alpha_i A_i \quad (3.142)$$

$$Z_2 = \frac{Z_0}{2} \sum_{i=1}^p \alpha_i^2 A_i \quad (3.143)$$

$$Z_3 = -\frac{Z_0}{6} \sum_{i=1}^p \alpha_i^3 A_i \quad (3.144)$$

Espandiamo ora  $\phi_l^\pm(r)$  in serie di potenze:

$$\phi_l^\pm(r) = \phi_{l0}^\pm + \phi_{l1}^\pm r + \phi_{l2}^\pm r^2 + \phi_{l3}^\pm r^3 + \dots \quad (3.145)$$

---

<sup>12</sup>H. L. Cox Jr., R. A. Bonham, *J. Chem. Phys.*, **47** (1967) 2599

È possibile osservare, dopo alcuni semplici calcoli, che esiste una relazione tra i coefficienti dell'espansione ed  $Z_0, Z_1, Z_2$  e  $Z_3$  dati da<sup>13</sup>:

$$\sin 2\phi_{l0}^{\pm} = -\frac{Z_0}{k} \quad (3.146)$$

$$\phi_{l1}^{\pm} = \frac{E + Z_1 - m \cos 2\phi_{l0}^{\pm}}{1 - 2k \cos 2\phi_{l0}^{\pm}} \quad (3.147)$$

$$\phi_{l2}^{\pm} = \frac{2\phi_{l1}^{\pm} \sin 2\phi_{l0}^{\pm} (m - k\phi_{l1}^{\pm}) + Z_2}{2 - 2k \cos 2\phi_{l0}^{\pm}} \quad (3.148)$$

$$\phi_{l3}^{\pm} = \frac{2\phi_{l2}^{\pm} \sin 2\phi_{l0}^{\pm} (m - 2k\phi_{l1}^{\pm}) + 2(\phi_{l1}^{\pm})^2 \cos 2\phi_{l0}^{\pm} [m - (2/3)k\phi_{l1}^{\pm}] + Z_3}{3 - 2k \cos 2\phi_{l0}^{\pm}} \quad (3.149)$$

con le condizioni:

$$\begin{cases} 0 \leq 2\phi_{l0}^{\pm} \leq \frac{\pi}{2} \text{ se } k < 0 \\ \pi \leq 2\phi_{l0}^{\pm} \leq \frac{3}{2}\pi \text{ se } k > 0 \end{cases} \quad (3.150)$$

Calcoliamo ora la derivata prima rispetto ad  $r$  dell'espressione di  $G_l^{\pm}(r)$  data in 3.133:

$$G_l^{\pm}(r) = \frac{a_l^{\pm}(r) \cos \phi_l^{\pm}(r)}{r} - \frac{a_l^{\pm}(r)}{r} \sin \phi_l^{\pm}(r) \phi_l^{\pm}(r) - \frac{a_l^{\pm}(r) \cos \phi_l^{\pm}(r)}{r^2} \quad (3.151)$$

dove con  $x'$  inchiamo la derivata prima di  $x$  rispetto ad  $r$ . A questo punto ricaviamo il rapporto tra la funzione derivata  $G_l^{\pm}(r)$  ed  $G_l^{\pm}(r)$ :

$$\frac{G_l^{\pm}(r)}{G_l^{\pm}(r)} = \frac{a_l^{\pm}(r)}{a_l^{\pm}(r)} - \phi_l^{\pm}(r) \tan \phi_l^{\pm}(r) - \frac{1}{r} \quad (3.152)$$

ovvero dalla 3.134:

$$\frac{G_l^{\pm}(r)}{G_l^{\pm}(r)} = -[E + m - V(r)] \tan \phi_l^{\pm}(r) - \frac{1+k}{r} \quad (3.153)$$

Osserviamo ora che per quanto detto nel paragrafo 3.2.3 la forma asintotica di  $G_l^{\pm}(r)$  nella regione di grandi  $r$  dove  $V(r) \approx 0$  è (v. pag. 40):

$$G_l^{\pm}(r) = j_l(Kr) \cos \eta_l^{\pm} - n_l(Kr) \sin \eta_l^{\pm} \quad (3.154)$$

dove  $K^2 = E^2 - m^2$ ,  $\eta_l^{\pm}$  sono gli ellesimi shift di fase mentre  $j_l$  ed  $n_l$  sono rispettivamente le funzioni sferiche regolari ed irregolari di Bessel. Quindi:

$$\frac{G_l^{\pm}(r)}{G_l^{\pm}(r)} = \frac{K j_l'(Kr) \cos \eta_l^{\pm} - K n_l'(Kr) \sin \eta_l^{\pm}}{j_l(Kr) \cos \eta_l^{\pm} - n_l(Kr) \sin \eta_l^{\pm}} \quad (3.155)$$

<sup>13</sup>P.J. Bunyam, J.L. Schonfelder, *Proc. Phys. Soc.*, **85** (1965) 455

considerando ora le proprietà delle funzioni di Bessel:

$$j_l'(x) = \frac{l}{x}j_l(x) - j_{l+1}(x) \quad (3.156)$$

$$n_l'(x) = \frac{l}{x}n_l(x) - n_{l+1}(x) \quad (3.157)$$

possiamo concludere che:

$$\tan\eta_l^\pm = \frac{\frac{l}{r}j_l(Kr) - Kj_{l+1} - j_l(Kr)\frac{G_l^{\pm}(r)}{G_l^{\pm}(r)}}{\frac{l}{r}n_l(Kr) - Kn_{l+1} - n_l(Kr)\frac{G_l^{\pm}(r)}{G_l^{\pm}(r)}} \quad (3.158)$$

Definiamo ora:

$$\tilde{\phi}_l^\pm = \lim_{r \rightarrow +\infty} \phi_l^\pm(r) \quad (3.159)$$

Per grandi valori di  $r$  la 3.153 diventa:

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{G_l^{\pm}(r)}{G_l^{\pm}(r)} = -(E+m)\tan\tilde{\phi}_l^\pm - \frac{1+k}{r} \quad (3.160)$$

in questo modo:

$$\tan\eta_l^\pm = \frac{Kj_{l+1} - j_l(Kr) \left[ (E+m)\tan\tilde{\phi}_l^\pm + \frac{1+l+k}{r} \right]}{Kn_{l+1} - n_l(Kr) \left[ (E+m)\tan\tilde{\phi}_l^\pm + \frac{1+l+k}{r} \right]} \quad (3.161)$$

Usando quest'ultima equazione si possono calcolare gli shift di fase dell'onda scatterata ricavando così  $f(\theta)$  e  $g(\theta)$  e quindi la sezione d'urto differenziale elastica.

### 3.2.5 Simulazione Monte Carlo

Al fine di simulare scattering elastici di positrone su atomo abbiamo bisogno di conoscere la sezione d'urto differenziale del processo. A partire da questa possiamo a sua volta calcolare la probabilità di scattering ad un determinato angolo. Abbiamo osservato come il metodo più completo per calcolare la sezione d'urto differenziale elastica sia il *Metodo dello Sviluppo in Onde Parziali Relativistiche (RPWEM)* affrontato nei paragrafi 3.2.2, 3.2.3 e 3.2.4. Questo metodo non fornisce però una funzione analitica per la sezione d'urto elastica, ma una soluzione numerica discreta. Tale soluzione va calcolata per ogni processo di scattering, rallentando notevolmente la velocità di elaborazione del calcolatore. Calcoli di sezione d'urto differenziale elastica di positroni su Alluminio ed Ossigeno con RPWEM sono stati gentilmente effettuati da Maurizio Dapor<sup>14</sup> per energie del positrone pari a 25, 50, 70, 100,

<sup>14</sup>Istituto per la Ricerca Scientifica e Tecnologica (IRST), I-38050 Povo, Trento, Italy  
- dapor@itc.it (M. Dapor)

200, 250, 300, 350, 400, 500, 750, 1000, 1250, 1350, 1500, 2000, 2500, 3000, 3250, 4000, 5000 eV. Note le sezioni d'urto differenziali elastiche per Alluminio ed Ossigeno è possibile ricavare quella dell'Allumina ( $Al_2O_3$ ) applicando la regola additiva<sup>15</sup>:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Al_2O_3} = 2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Al} + 3 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_O \quad (3.162)$$

In questo lavoro abbiamo studiato alcune metodologie di calcolo al fine di minimizzare la velocità di elaborazione del calcolatore senza perdere consistenza fisica data dal confronto con i risultati ottenuti con il RPWEM. Proprio a tal fine si è scelto di escludere i set di dati a 70, 350, 1350, 3250 eV per utilizzarli come confronto dei dati simulati. Il metodo scelto per la nostra simulazione Monte Carlo è quello che prende il nome di *Approssimazione Analitica della sezione d'urto differenziale elastica*. Questo metodo consiste nell'approssimare la sezione d'urto differenziale di scattering con la seguente funzione semi-empirica tipo Rutherford schermata:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\Phi}{(1 - \cos\theta + \Gamma)^2} \quad (3.163)$$

dove le quantità  $\Phi$  e  $\Gamma$  devono essere determinate allo scopo di ottenere il miglior fit della sezione d'urto totale e di trasporto elastica calcolata precedentemente usando il RPWEM. Come visto nel paragrafo 3.2.1, tale espressione sarà valida fondamentalmente in prima approssimazione di Born e quindi per urti di positroni ad alta energia con atomi a basso numero atomico. M. Dapor<sup>16</sup> ha mostrato comunque che tale espressione, per elettroni, è sufficientemente corretta anche per alcuni ossidi tra cui l'Allumina. Si osservi che per

$$\Phi = \frac{Z^2 e^4}{4E^2}, \Gamma = 0 \quad (3.164)$$

l'equazione 3.163 si riduce alla formula classica di Rutherford, mentre per

$$\Phi = \frac{Z^2 e^4}{4E^2}, \Gamma = \frac{me^4 \pi^2 Z^{2/3}}{h^2 E} \quad (3.165)$$

alla formula di Rutherford schermata corrispondente al potenziale di Yukawa. Vedremo ora come calcolare i parametri  $\Phi$  e  $\Gamma$  nota la sezione d'urto totale ( $\sigma_{el}$ ) e di trasporto ( $\sigma_{tr}$ ) calcolata precedentemente tramite RPWEM. Cominciamo con il calcolare la sezione d'urto totale data la formula analitica della sezione d'urto differenziale 3.163:

$$\sigma_{el} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int \frac{\Phi}{(1 - \cos\theta + \Gamma)^2} d\Omega = \frac{4\pi\Phi}{\Gamma(\Gamma + 2)} \quad (3.166)$$

<sup>15</sup>J. Barò, J. Sempau, J. M. Fernández-Varea, F. Salvat, *Nucl. Instrum. Meth. B*, **100** (1995) 31

<sup>16</sup>M. Dapor, *Phys. Lett. A*, **333** (2004) 457-467

da cui possiamo ricavare

$$\Phi = \frac{\sigma_{el}}{4\pi} \Gamma (\Gamma + 2) \quad (3.167)$$

La sezione d'urto differenziale 3.163 può essere quindi riscritta come:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma_{el}}{4\pi} \frac{\Gamma(\Gamma + 2)}{(1 - \cos\theta + \Gamma)^2} \quad (3.168)$$

ricordando ora che la sezione d'urto di trasporto è definita come:

$$\sigma_{tr} = \int (1 - \cos\theta) \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (3.169)$$

sostituendo in  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  l'espressione 3.168 otteniamo:

$$\sigma_{tr} = \Gamma \sigma_{el} \left[ \frac{\Gamma + 2}{2} \ln \left( \frac{\Gamma + 2}{\Gamma} \right) - 1 \right] \quad (3.170)$$

se indichiamo ora con  $\Xi$  il rapporto tra la sezione d'urto di trasporto e quella totale, questo obbedirà all'equazione:

$$\Xi = \Gamma \left[ \frac{\Gamma + 2}{2} \ln \left( \frac{\Gamma + 2}{\Gamma} \right) - 1 \right] \quad (3.171)$$

Dato che i valori delle sezioni d'urto totale e di trasporto sono calcolate con il RPWEM per i valori di energia del positrone incidente  $E$  precedentemente indicati, il parametro  $\Xi$  assumerà valori discreti. Per ogni  $\Xi_j$  si calcola con un algoritmo di bisezione il valore di  $\Gamma_j$ . Si può osservare che i punti  $\Gamma_j$  sono distribuiti, nel piano logaritmico, secondo una funzione cubica dell'energia, ovvero, in altre parole è possibile fittare i punti  $\Gamma_j(E)$  con la funzione:

$$\Gamma(E) = 10^{g_0 + g_1 \text{Log}(E) + g_2 \text{Log}^2(E) + g_3 \text{Log}^3(E)} \quad (3.172)$$

dove  $g_0, g_1, g_2$  e  $g_3$  sono i parametri del fit. Allo stesso modo si può osservare facilmente che, sempre nel piano logaritmico, anche i punti  $\sigma_{elj}$  calcolati con il RPWEM seguono una funzione cubica dell'energia  $E$ . Si fitta perciò anche  $\sigma_{elj}$  con la funzione:

$$\sigma_{el}(E) = 10^{s_0 + s_1 \text{Log}(E) + s_2 \text{Log}^2(E) + s_3 \text{Log}^3(E)} \quad (3.173)$$

Noti i parametri del fit otteniamo così una funzione analitica per la sezione differenziale e totale elastica. Inoltre, è ora facile calcolare la probabilità di scattering elastico in un range angolare tra 0 e  $\theta$ ,

$$P(\theta) = \frac{2\pi}{\sigma_{el}} \int_0^\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta \quad (3.174)$$

sostituendo l'espressione 3.168 otteniamo:

$$P(\theta) = \frac{\left(1 + \frac{\Gamma}{2}\right) (1 - \cos\theta)}{1 - \cos\theta + \Gamma} \quad (3.175)$$

Sapendo ora che  $P(\theta)$  è una distribuzione uniforme tra zero ed uno, possiamo facilmente calcolare l'angolo di scattering come:

$$\cos\theta = 1 - \frac{2\Gamma P(\theta)}{2 + \Gamma - 2P(\theta)} \quad (3.176)$$

Si riportano in tabella 3.1, 3.2 e 3.3, al variare dell'energia del positrone incidente, i valori della sezione d'urto totale e di trasporto calcolate con il RPWEM nonchè i parametri  $\Xi$  e  $\Gamma$  per atomi di Ossigeno, Alluminio ed Allumina. In tabella 3.4 e 3.5 sono invece riportati le stime dei parametri  $g_i$  e  $s_i$  ottenute dal fit di  $\sigma_{el}(E)$  e  $\Gamma(E)$  con le funzioni 3.172 e 3.173. Il risultato grafico del fit è riportato per Ossigeno, Alluminio ed Allumina in figura 3.1 e 3.2. Si confrontano inoltre le sezioni d'urto differenziali elastiche calcolate con il RPWEM con quelle ricavate con il metodo dell'approssimazione analitica. In particolare si riportano in figura 3.3, 3.4, 3.5 e 3.6 le sezioni d'urto differenziali elastiche per Allumina rispettivamente a 70, 350, 1350 e 3250 eV. Come si osserva, nell'Ossido di Alluminio l'approssimazione analitica risulta un buon metodo di stima per la sezione d'urto differenziale anche nel caso di positroni incidenti, generalizzando quindi quanto già trovato da M. Dapor con gli elettroni. Dalla figura 3.3 si può osservare come, calcolando con il metodo dell'approssimazione analitica le sezione d'urto differenziali elastiche dei costituenti dell'Allumina e sommando poi queste secondo la regola additiva 3.162 si ottiene un risultato migliore che utilizzare la regola additiva alle sezioni differenziali elastiche calcolate con il RPWEM ed applicare l'approssimazione analitica a quanto ottenuto<sup>17</sup>. Nella simulazione Monte Carlo si userà quindi la prima procedura. Si può inoltre osservare che al diminuire dell'energia del positrone incidente aumenta il divario tra i valori della sezione d'urto differenziale elastica calcolata con il RPWEM e quella stimata con il metodo dell'approssimazione analitica. Questo poiché il secondo metodo, implicando il confronto con una sezione d'urto elastico di tipo Rutherford, fornirà previsioni corrette solo se vale la prima approssimazione di Born. Tale approssimazione, come visto a pagina 33, sarà valida per grandi valori dell'energia del positrone incidente e basso numero atomico  $Z$ . I risultati migliori si ottengono, nel nostro caso, con atomi di Ossigeno (basso  $Z$ ) e positroni a 3250 eV (alta energia). Il confronto tra le sezioni d'urto differenziali elastiche di positroni su Ossigeno ad energie di 70, 350, 1350, 3250 eV è riportato in figura 3.7. Per mostrare come l'approssimazione di Born sia legata anche al numero atomico  $Z$  dell'atomo si riportano in figura 3.8, ad energia fissata pari a 350 eV, le sezioni d'urto differenziali elastiche di positroni su Ossigeno ( $Z = 8$ ), Alluminio ( $Z = 13$ ) ed Oro ( $Z = 79$ ).

---

<sup>17</sup>I motivi di tali differenze sono di natura non fisica

<b>Energia</b> eV	$\sigma_{el}(E)$ $\text{\AA}^2$	$\sigma_{tr}(E)$ $\text{\AA}^2$	$\Xi$	$\Gamma$
25	2.0135	1.061336	0.527110007	0.553830286
50	1.696301	0.7147406	0.42135246	0.329888359
100	1.370357	0.4426189	0.322995322	0.194870557
200	1.053051	0.2460288	0.233634268	0.110647636
250	0.955371	0.1981279	0.207383205	0.091113911
300	0.877854	0.1642157	0.187064933	0.077382733
400	0.7604597	0.1196727	0.157368891	0.059336429
500	0.6742586	0.09205953	0.136534454	0.048024027
750	0.5305517	0.05515834	0.103964119	0.032441436
1000	0.4401594	0.03740562	0.084981986	0.024501662
1250	0.3772668	0.02733268	0.072449206	0.019713993
1500	0.3307007	0.02099835	0.063496539	0.016516413
2000	0.2660038	0.01368429	0.051443964	0.012509357
2500	0.222974	0.009723548	0.043608439	0.01009255
3000	0.1921816	0.007311932	0.038046993	0.008470514
4000	0.1509335	0.004616714	0.030587736	0.006422233
5000	0.1244937	0.003205951	0.025751914	0.005176488

Tabella 3.1: Valori di  $\sigma_{el}$ ,  $\sigma_{tr}$ ,  $\Xi$ ,  $\Gamma$  in funzione dell'energia del positrone incidente  $E$  per atomi di Ossigeno

<b>Energia</b> eV	$\sigma_{el}(E)$ $\text{\AA}^2$	$\sigma_{tr}(E)$ $\text{\AA}^2$	$\Xi$	$\Gamma$
25	7.073971	2.342335	0.331120243	0.204112825
50	5.609051	1.328637	0.23687376	0.113205836
100	4.204996	0.6901926	0.164136327	0.063245805
200	2.948909	0.3446813	0.116884346	0.038323036
250	2.599154	0.2745577	0.105633487	0.033179495
300	2.335091	0.2282548	0.097749852	0.029750707
400	1.960217	0.169686	0.086564906	0.025132063
500	1.703514	0.1341186	0.078730553	0.022068321
750	1.307269	0.08602853	0.065807825	0.017324046
1000	1.0754	0.06166878	0.057344969	0.014428058
1250	0.9202928	0.04703724	0.051111168	0.012403648
1500	0.8079421	0.03736656	0.046249057	0.010890088
2000	0.6541578	0.02556891	0.039086762	0.008767739
2500	0.5525592	0.01879577	0.034015848	0.007345008
3000	0.4797725	0.01449401	0.030210173	0.00632258
4000	0.3816084	0.009486147	0.024858329	0.004953728
5000	0.3179519	0.006753935	0.021242002	0.004076993

Tabella 3.2: Valori di  $\sigma_{el}$ ,  $\sigma_{tr}$ ,  $\Xi$ ,  $\Gamma$  in funzione dell'energia del positrone incidente  $E$  per atomi di Alluminio

Energia eV	$\sigma_{el}(E)$ $\text{\AA}^2$	$\sigma_{tr}(E)$ $\text{\AA}^2$	$\Xi$	$\Gamma$
25	20.188442	7.868678	0.389761528	0.280517782
50	16.307005	4.8014958	0.294443756	0.164653953
100	12.521063	2.7082419	0.216294886	0.097511647
200	9.056971	1.427449	0.15760777	0.059472431
250	8.064421	1.1434991	0.141795561	0.050779284
300	7.303744	0.9491567	0.129954815	0.044672853
400	6.2018131	0.6983901	0.112610633	0.036334381
500	5.4298038	0.54441579	0.100264358	0.030828715
750	4.2061931	0.33753208	0.080246454	0.022650121
1000	3.4712782	0.23555442	0.067858122	0.01805092
1250	2.972386	0.17607252	0.059236088	0.015060545
1500	2.6079863	0.13772817	0.052810159	0.012946126
2000	2.106327	0.09219069	0.04376846	0.010140385
2500	1.7740404	0.066762184	0.037632843	0.008352909
3000	1.5360898	0.050923816	0.033151588	0.007109346
4000	1.2160173	0.032822436	0.026991751	0.005489466
5000	1.0093849	0.023125723	0.022910708	0.004476539

Tabella 3.3: Valori di  $\sigma_{el}$ ,  $\sigma_{tr}$ ,  $\Xi$ ,  $\Gamma$  in funzione dell'energia del positrone incidente  $E$  per molecole di Alumina

Elemento	$\mathbf{g}_3$	$\mathbf{g}_2$	$\mathbf{g}_1$	$\mathbf{g}_0$
Ossigeno	0.0285	-0.2889	0.0002	0.2233
Aluminio	-0.0950	0.7477	-2.5776	1.7215
Allumina	-0.0381	0.2537	-1.2828	0.8489

Tabella 3.4: Parametri determinati dal fit per il calcolo di  $\Gamma(E)$

Elemento	$\mathbf{s}_3$	$\mathbf{s}_2$	$\mathbf{s}_1$	$\mathbf{s}_0$
Ossigeno	-0.0124	-0.0637	0.0576	0.3794
Aluminio	0.0143	-0.2222	0.2496	0.8963
Allumina	0.0035	-0.1550	0.1510	1.3868

Tabella 3.5: Parametri determinati dal fit per il calcolo di  $\sigma_{el}(E)$

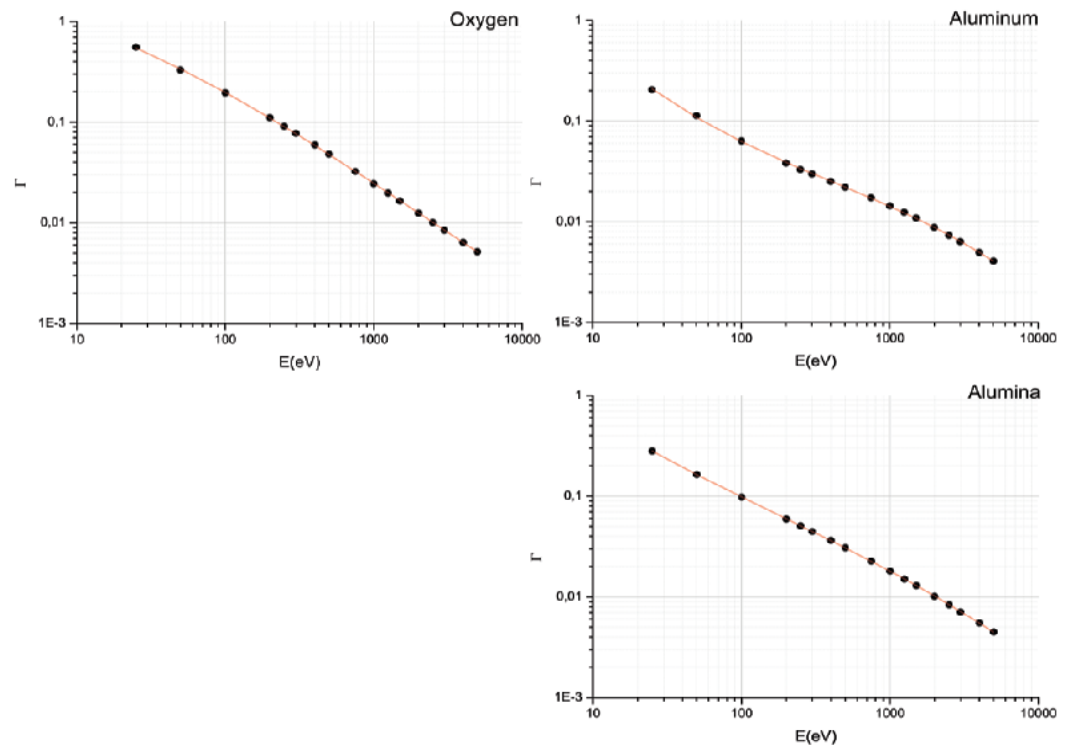


Figura 3.1: Parametro di screening  $\Gamma$  per Ossigeno, Alluminio ed Allumina in funzione dell'energia cinetica del positrone  $E$ . I punti rappresentano il calcolo effettuato con il RPWEM. La linea continua rappresenta il best fit cubico nel piano logaritmico.

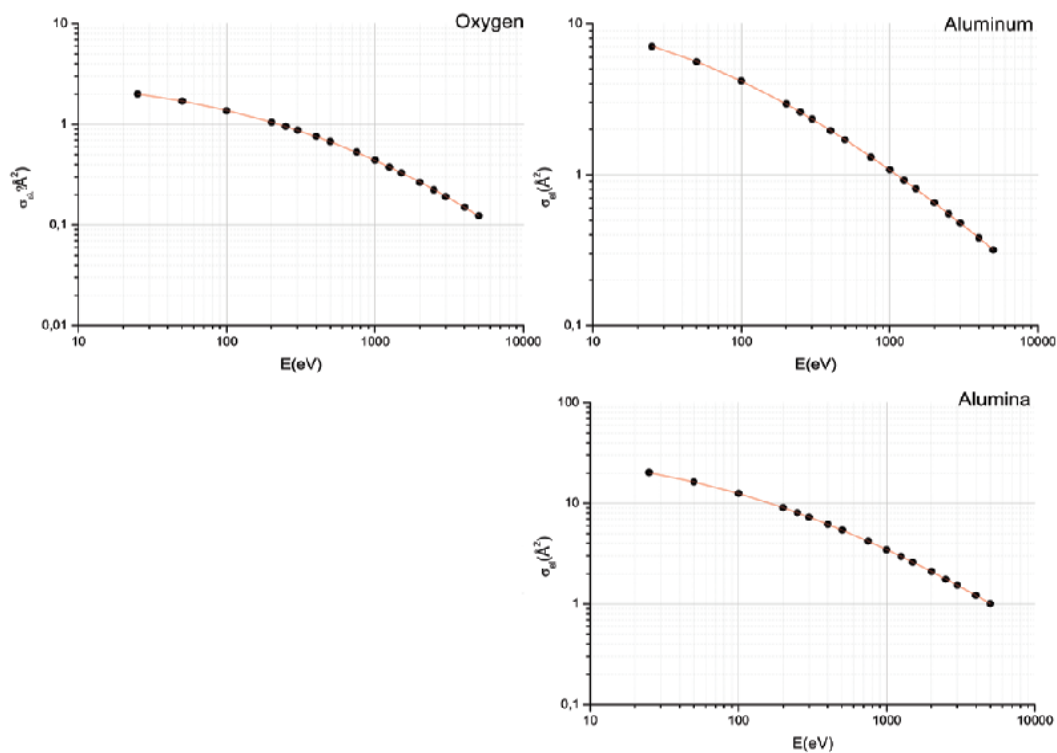


Figura 3.2: Sezione d'urto elastica  $\sigma_{el}$  per Ossigeno, Alluminio ed Allumina in funzione dell'energia cinetica del positrone  $E$ . I punti rappresentano il calcolo effettuato con il RPWEM. La linea continua rappresenta il best fit cubico nel piano logaritmico.

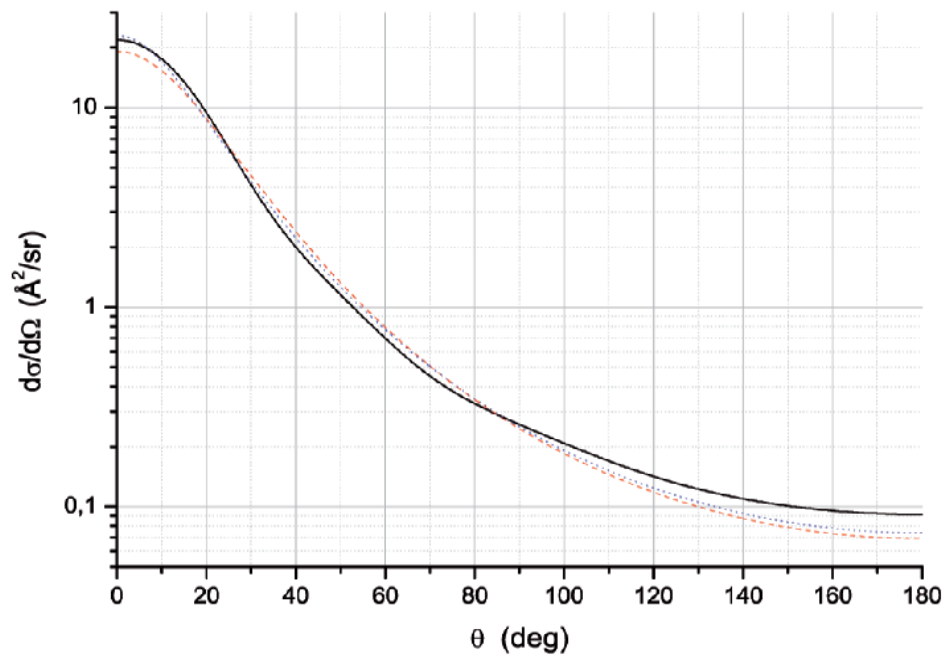


Figura 3.3: Sezione d'urto differenziale elastica di positroni a 70 eV su  $Al_2O_3$  in funzione dell'angolo di scattering  $\theta$ . La linea continua nera rappresenta il calcolo effettuato con il RPWEM. La linea tratteggiata rossa rappresenta il calcolo effettuato con il metodo dell'approssimazione analitica. La linea punteggiata blu rappresenta la somma pesata delle sezioni differenziali elastiche di Ossigeno ed Alluminio calcolate con il metodo dell'approssimazione analitica.

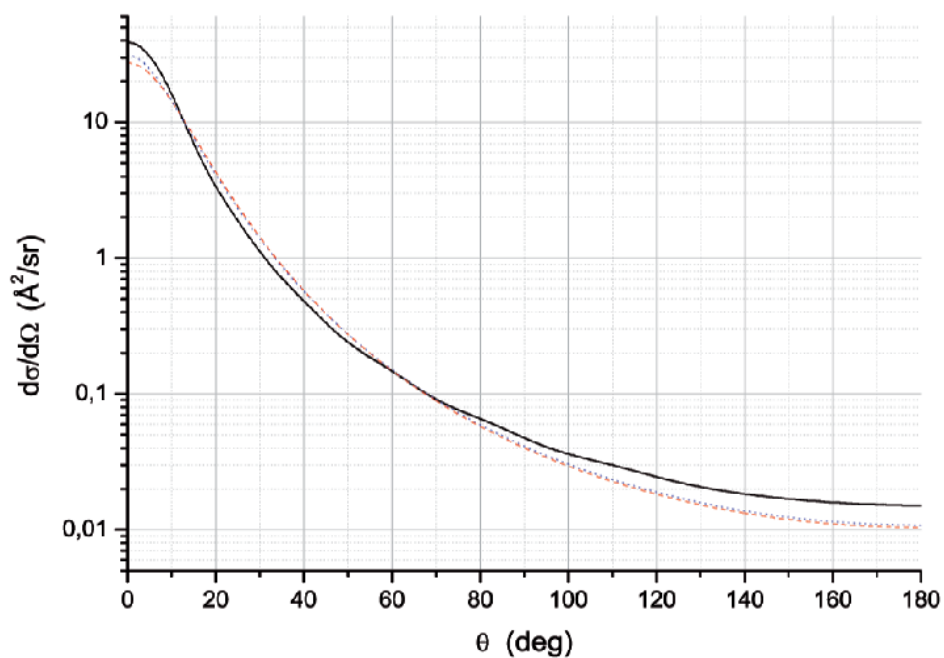


Figura 3.4: Sezione d'urto differenziale elastica di positroni a 350 eV su  $Al_2O_3$  in funzione dell'angolo di scattering  $\theta$ . La linea continua nera rappresenta il calcolo effettuato con il RPWEM. La linea tratteggiata rossa rappresenta il calcolo effettuato con il metodo dell'approssimazione analitica. La linea punteggiata blu rappresenta la somma pesata delle sezioni differenziali elastiche di Ossigeno ed Alluminio calcolate con il metodo dell'approssimazione analitica.

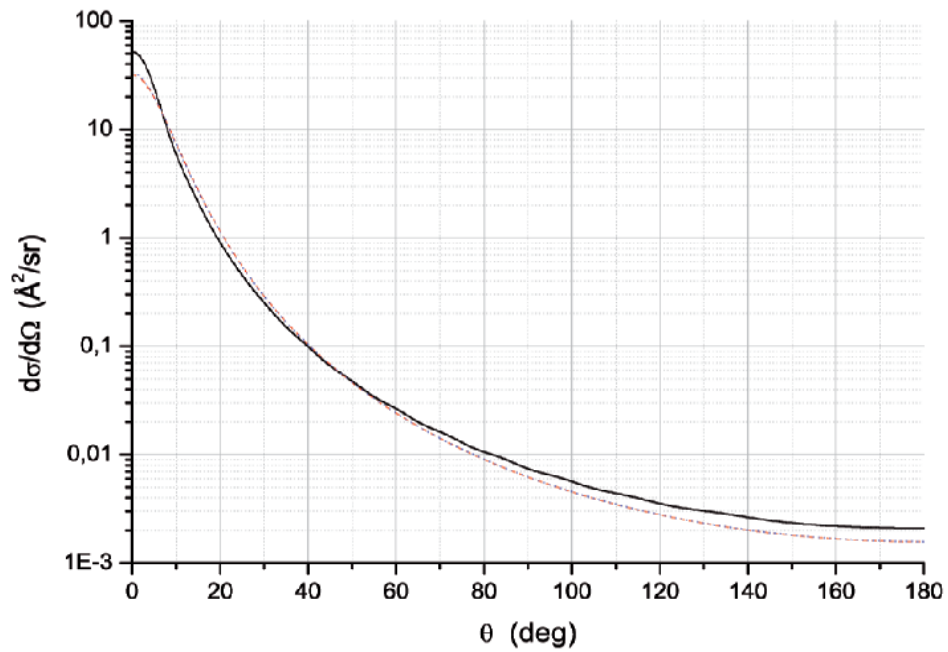


Figura 3.5: Sezione d'urto differenziale elastica di positroni a 1350 eV su  $Al_2O_3$  in funzione dell'angolo di scattering  $\theta$ . La linea continua nera rappresenta il calcolo effettuato con il RPWEM. La linea tratteggiata rossa rappresenta il calcolo effettuato con il metodo dell'approssimazione analitica. La linea punteggiata blu rappresenta la somma pesata delle sezioni differenziali elastiche di Ossigeno ed Alluminio calcolate con il metodo dell'approssimazione analitica.

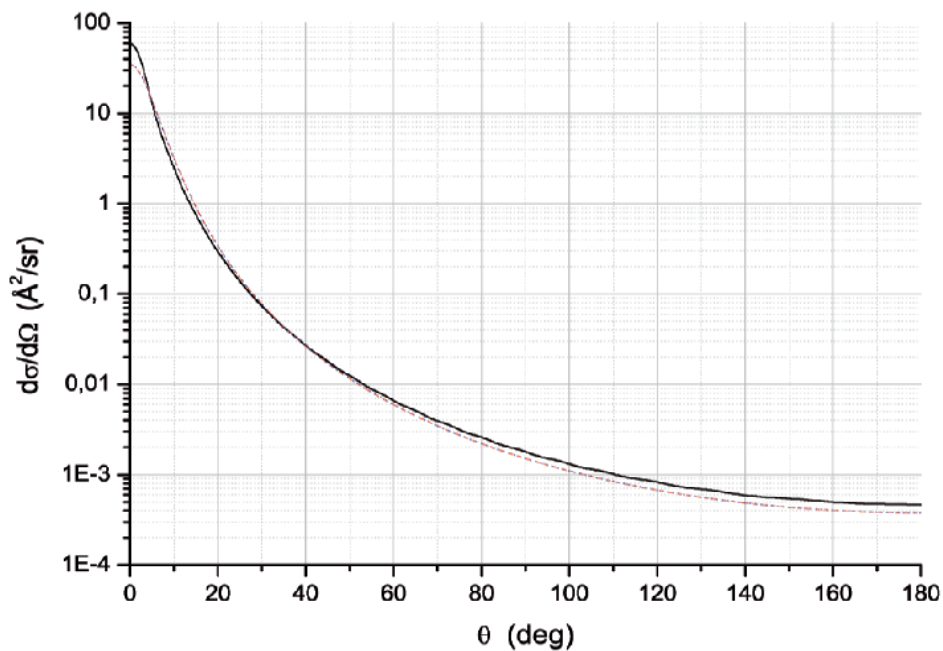


Figura 3.6: Sezione d'urto differenziale elastica di positroni a  $3250 \text{ eV}$  su  $\text{Al}_2\text{O}_3$  in funzione dell'angolo di scattering  $\theta$ . La linea continua nera rappresenta il calcolo effettuato con il RPWEM. La linea tratteggiata rossa rappresenta il calcolo effettuato con il metodo dell'approssimazione analitica. La linea punteggiata blu rappresenta la somma pesata delle sezioni differenziali elastiche di Ossigeno ed Alluminio calcolate con il metodo dell'approssimazione analitica.

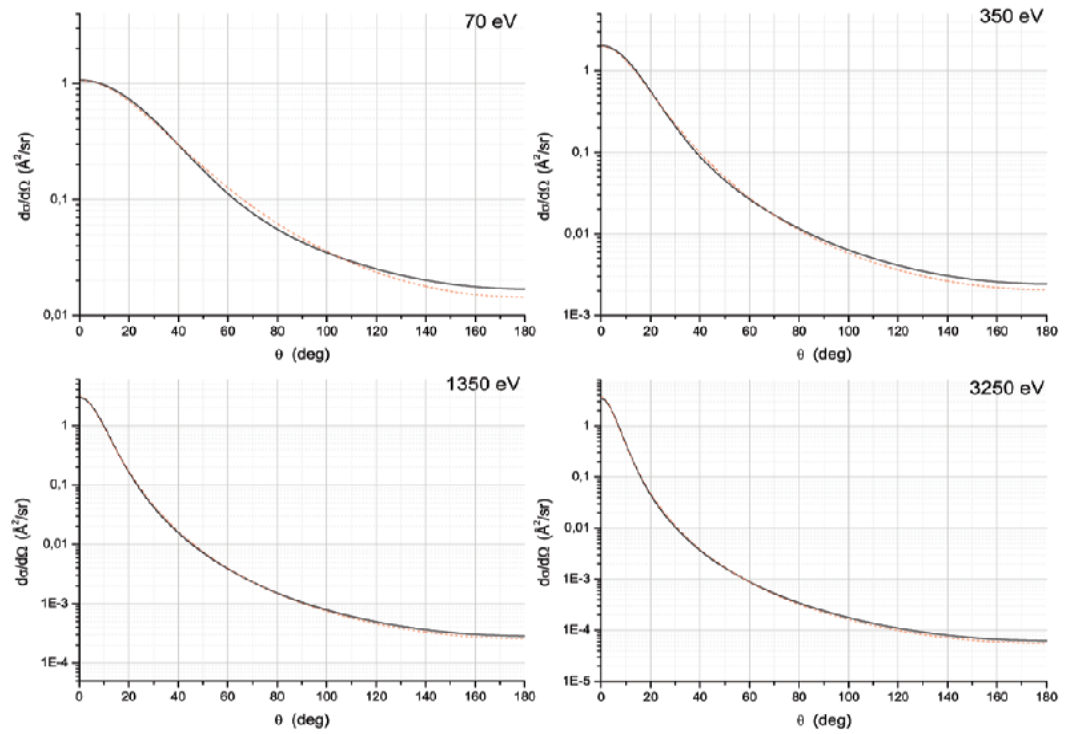


Figura 3.7: Sezione d'urto differenziale elastica di positroni rispettivamente a 70, 350, 1350 e 3250 eV su atomi di Ossigeno in funzione dell'angolo di scattering  $\theta$ . La linea continua nera rappresenta il calcolo effettuato con il RPWEM. La linea tratteggiata rossa rappresenta il calcolo effettuato con il metodo dell'approssimazione analitica.

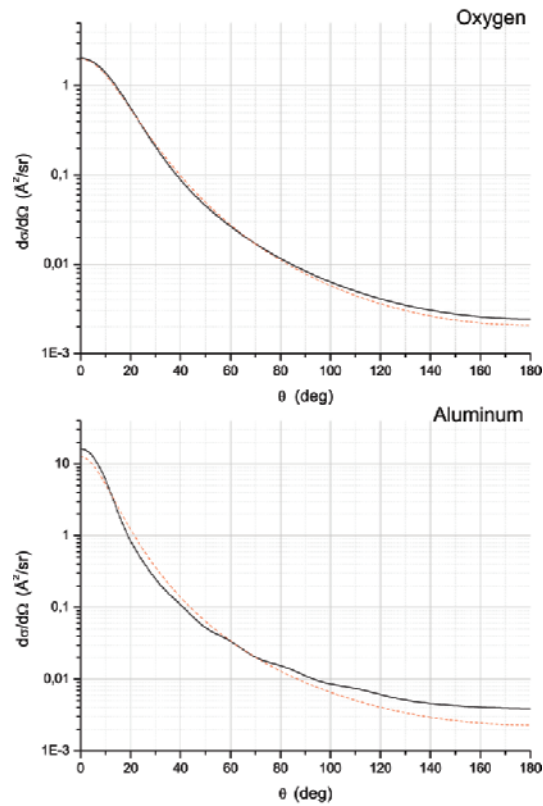


Figura 3.8: Sezione d'urto differenziale elastica di positroni a 350 eV su atomi di Ossigeno ed Alluminio in funzione dell'angolo di scattering  $\theta$ . La linea continua nera rappresenta il calcolo effettuato con il RPWEM. La linea tratteggiata rossa rappresenta il calcolo effettuato con il metodo dell'approssimazione analitica.

### 3.3 Processi Anelastici

#### 3.3.1 Energy Stopping Power

Il modello di H. Gümüş per il calcolo dell'Energy Stopping Power consiste in una modifica del modello di F. Rohrlich e B. C. Carlson<sup>18</sup> grazie all'introduzione di grandezze efficaci quali la carica del positrone, del nucleo e l'energia media di eccitazione.

#### Modello di Rohrlich e Carlson

La ben nota formula di Bethe - Bloch per l'energia media persa per collisione è stata derivata per particelle cariche leggere sotto l'assunzione che al di sopra di una certa quantità di energia trasferita  $W_1$ , gli elettroni atomici possono essere considerati liberi, così da poter utilizzare come sezione d'urto per il processo la sezione d'urto Møller<sup>19</sup>:

$$\left(\frac{d\sigma}{dW}\right)^- = \frac{2\pi e^4}{mv^2} \frac{1}{E} \left[ \frac{1}{W^2} + \frac{1}{(1-W)^2} + \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 - \frac{2\gamma-1}{\gamma^2} \frac{1}{W(1-W)} \right] \quad (3.177)$$

dove  $e$  ed  $E = (\gamma - 1)mc^2$  sono rispettivamente la carica e l'energia cinetica dell'elettrone e  $W$  l'energia trasferita in unità di  $E$  con  $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$  e  $\beta = v/c$ ,  $c$  velocità della luce. Dato che, a causa dell'indistinguibilità di particelle identiche, l'elettrone primario è definito come quello che dopo l'urto ha maggiore energia, la massima energia trasferita sarà  $W_m = 1/2$ . In questo modo, l'ESP per urto anelastico con un atomo a  $Z$  elettroni sarà:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dE}{dx}\right)_{upper}^- &= NZE \int_{W_1}^{\frac{1}{2}} W \left(\frac{d\sigma}{dW}\right)^- dW = \\ &= N \frac{2\pi Ze^4}{mv^2} \left[ \ln\left(\frac{1}{4W_1}\right) + 1 - \frac{2\gamma-1}{\gamma^2} \ln 2 + \frac{1}{8} \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.178)$$

dove il numero di atomi bersaglio per unità di volume  $N$  è dato da  $N = (\rho N_A)/A$  con  $\rho$  densità del mezzo,  $N_A$  numero di Avogadro e  $A$  numero di massa. Per valori dell'energia dell'elettrone minore di  $W_1$  è necessario sommare esplicitamente sulle varie probabilità di eccitazione dell'atomo. Quello si trova è<sup>20</sup>:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{lower}^- = NZE \int_0^{W_1} W \sigma(W, \gamma) dW$$

<sup>18</sup>F. Rohrlich e B. C. Carlson, *Phys. Rev. B*, **93** (1954) 38

<sup>19</sup>C. Møller, *Ann. Physik*, **14** (1932) 531

<sup>20</sup>H. Geiger e K. Scheel, *Handbuch der Physik* (Julius Springer, Berlino, 1933), Vol. 24/1, p.273

$$= N \frac{2\pi Z e^4}{m v^2} \left[ \ln \frac{2E^2 W_1 (\gamma + 1)}{I^2} - \beta^2 \right] \quad (3.179)$$

dove  $I$  è l'energia media di ionizzazione. Sommando le due espressioni 3.178 e 3.179 otteniamo la formula dell'Energy Stopping Power secondo il modello di F. Rohrlich e B. C. Carlson per elettroni:

$$\left( \frac{dE}{dx} \right)^- = N \frac{2\pi Z e^4}{m v^2} \left[ \ln \left( \frac{E^2 \gamma + 1}{I^2} \frac{\gamma + 1}{2} \right) + f^-(\gamma) \right] \quad (3.180)$$

dove

$$f^-(\gamma) = 1 - \beta^2 - \frac{2\gamma - 1}{\gamma^2} \ln 2 + \frac{1}{8} \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 \quad (3.181)$$

Per ricavare l'ESP nel caso di positroni si procede esattamente allo stesso modo a meno di due considerazioni. La prima è che il limite superiore dell'energia trasferita nel caso di positroni è uno, in quanto ora positrone ed elettrone sono particelle distinguibili. La seconda è che a grandi valori di energia trasferita le collisioni relativistiche elettrone - elettrone descritte dalla sezione d'urto Møller devono essere sostituite con urti di tipo elettrone - positrone descritti dalla sezione d'urto Bhabha<sup>21</sup>:

$$\begin{aligned} \left( \frac{d\sigma}{dW} \right)^+ &= \frac{2\pi e^4}{m v^2} \frac{1}{E} \left\{ \frac{1}{W^2} - \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} \frac{1}{W} + \frac{1}{2} \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 + \right. \\ &- \left. \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right) \left[ \frac{\gamma + 2}{\gamma} \frac{1}{W} - 2 \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma^2} + W \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 \right] + \right. \\ &+ \left. \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^2 \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{\gamma} + \frac{3}{2\gamma^2} - \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma} \right)^2 W(1 - W) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.182)$$

I contributi all'energia persa, per piccoli valori di energia trasferita  $W$ , sono determinati dall'intensità di oscillazione dell'atomo e sono, perciò, in buona approssimazione, indipendenti dalla carica della particella incidente. In questo modo l'equazione 3.179 vista per elettroni è valida anche per positroni. Usando la stessa procedura vista per gli elettroni si giunge quindi a scrivere la formula dell'Energy Stopping Power per positroni secondo il modello di F. Rohrlich e B. C. Carlson:

$$\left( \frac{dE}{dx} \right)^+ \equiv \left( \frac{dE}{dx} \right)_{RC} = N \frac{2\pi Z e^4}{m v^2} \left[ \ln \left( \frac{E^2 \gamma + 1}{I^2} \frac{\gamma + 1}{2} \right) + f^+(\gamma) \right] \quad (3.183)$$

dove

$$f^+(\gamma) = 2 \ln 2 - \frac{\beta^2}{12} \left[ 23 + \frac{14}{\gamma + 1} + \frac{10}{(\gamma + 1)^2} + \frac{4}{(\gamma + 1)^3} \right] \quad (3.184)$$

<sup>21</sup>H. J. Bhabha, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A154** (1936) 195

La differenza nella perdita di energia per collisioni tra elettroni e positroni è quindi determinata dalle funzioni  $f^\pm$  date in 3.184 ed 3.181. Queste funzioni che dipendono unicamente dall'energia della particella incidente e sono indipendenti dal numero atomico del materiale su cui questa incide, sono rappresentate in figura 3.9. Dal grafico si può facilmente osservare come, nel range energetico considerato nel nostro studio ( $E < 5keV$ ), la perdita di energia per positroni sia superiore a quella per elettroni.

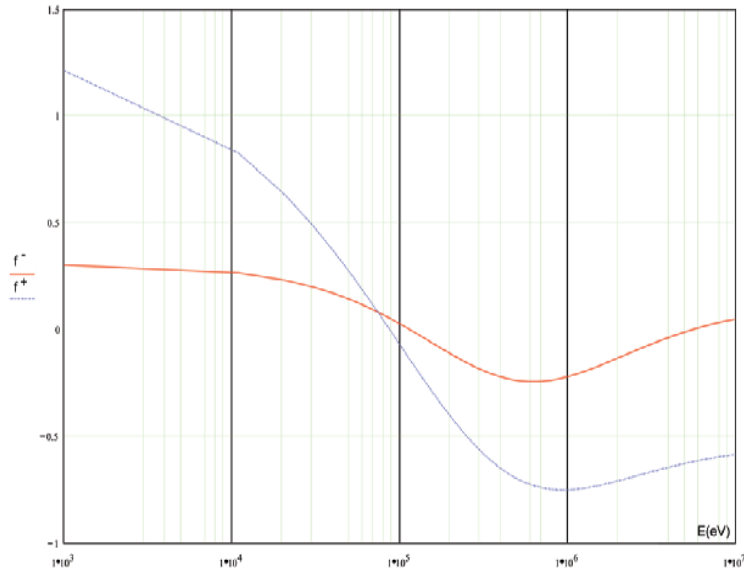


Figura 3.9: Grafico delle funzioni  $f^\pm(\gamma)$  in funzione dell'energia cinetica della particella incidente  $E = (\gamma - 1)mc^2$ .

### Calcolo delle grandezze efficaci

Per energie inferiori al  $MeV$  la formula dell'ESP calcolata in 3.183 deve essere modificata allo scopo di considerare anche correzioni di ordine superiore. Per fare questo si introducono le grandezze efficaci  $Z^*$ ,  $I^*$  e  $z^*$  mantenendo intatta l'espressione dell'ESP precedentemente calcolata. Per ottenere l'espressione del numero atomico  $Z^*$  ed energia media di ionizzazione  $I^*$  effettiva si utilizza il *Bohr stripping criterion*. Questo criterio si applica generalmente all'interazione di ioni pesanti con la materia ed afferma che solo gli elettroni legati allo ione in moto che possiedono una velocità inferiore a  $v_s$  possono essere strappati dall'atomo contro cui questo va ad urtare. Dato che in prima approssimazione c'è simmetria tra la particella incidente e quella urtata possiamo ribaltare il discorso affermando che solo gli elettroni orbitali dell'atomo urtato con velocità inferiore a  $v_s$  vengono strappati dalla parti-

cella incidente. Gli elettroni che si muovono con velocità superiori a  $v_s$  non contribuiscono allo scattering e quindi la quantità di carica così come l'energia media di ionizzazione saranno differenti dai valori  $Z$  ed  $I$  che avrebbero se tutti gli elettroni prendessero parte al processo. Possiamo quindi definire un raggio  $r_b$  entro il quale gli elettroni atomici non prendono parte allo scattering. Ora se con  $n(r)$  indichiamo la densità di carica elettrica allora, la quantità di carica che prende parte al processo e che quindi rappresenta il numero atomico efficace dell'atomo bersaglio  $Z^*$  sarà data da:

$$Z^* = \int_{r_b}^{\infty} 4\pi r^2 n(r) dr \quad (3.185)$$

Il valore di  $r_b$  è determinato a partire dal Bohr stripping criterion.  $r_b$  sarà tale per cui la velocità orbitale degli elettroni atomici a quella distanza del nucleo coincide con la velocità di stripping  $v_s$ . Per avere perdita di energia e quindi contribuire all'ESP la velocità della particella incidente dovrà essere superiore a  $v_s$  e quindi alla velocità orbitale degli elettroni alla distanza  $r_b$  dal nucleo. Ora, per valutare la velocità orbitale degli elettroni atomici abbiamo diversi metodi. Il primo è quello di considerare il modello di Thomas - Fermi secondo cui la densità  $n(r)$  è della forma:

$$n(r) = Z^2 f \left( \frac{rZ^{1/3}}{a} \right) \quad (3.186)$$

dove  $a \cong 0.885a_0$  con  $a_0$  raggio di Bohr. Se indichiamo con  $x = rZ^{1/3}/a$  allora la funzione  $f(x)$  è data da:

$$f(x) = \frac{32}{9\pi^3} \left( \frac{m\phi(x)}{x\hbar} \right)^{3/2} \quad (3.187)$$

dove  $\phi(x)$  è la funzione di Thomas-Fermi<sup>22</sup>. La velocità orbitale degli elettroni atomici  $v_F$  sarà data da:

$$v_F = \frac{\hbar}{m} \left( 3\pi^2 n(r) \right)^{1/3} = \frac{\hbar}{m} \left( 3\pi^2 Z^2 f(x) \right)^{1/3} \quad (3.188)$$

In accordo con l'analisi di H. Ascolani ed N. R. Arista, l'approccio sino ad ora utilizzato è analogo a quello basato sul Modello di Lenz-Jensen per  $n(r)$ . In questo caso la densità di carica prende la forma:

$$n(r) = Z^2 g \left[ 3.303 \left( \frac{rZ^{1/3}}{a_0} \right)^{1/2} \right] \quad (3.189)$$

dove posto  $\eta$  l'argomento della funzione  $g$ , otteniamo per  $g(\eta)$  una forma analitica piuttosto semplice. La velocità orbitale del proiettile nel modello di Lenz - Jensen sarà data da:

$$v_{LJ} = \frac{\hbar}{m} \left( 3\pi^2 \rho(r) \right)^{1/3} = \frac{\hbar}{m} \left( 3\pi^2 Z^2 g(\eta) \right)^{1/3} \quad (3.190)$$

<sup>22</sup>H. Ascolani e N. R. Arista, *Phys. Rev. A*, **33** (1986) 2352

Essendo l'espressione di  $n(r)$  data dalla formula analitica<sup>23</sup>:

$$n(r) = Z^2 \frac{3.675e^{-\eta}}{a_0^3 \eta^3} (1 + 0.265\eta)^3 \quad (3.191)$$

dove

$$\eta = 3.303 \sqrt{\frac{rZ^{1/3}}{a_0}} \quad (3.192)$$

indicando ora con

$$\eta_b = 3.303 \sqrt{\frac{r_b Z^{1/3}}{a_0}} \quad (3.193)$$

e sostituendo la densità di carica 3.191 del modello di Lenz-Jensen nell'espressione 3.185 ottenuta con il Borh stripping criterion otteniamo:

$$\begin{aligned} Z^* &= \int_{r_b}^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r) dr \\ &= \frac{8\pi 3.675}{(3.303)^6} Z \int_{\eta_b}^{\infty} \eta^2 e^{-\eta} (1 + 0.265\eta)^3 \\ &= Z \left( \frac{e^{-\eta_b}}{2} \right) \left( 0.00265\eta_b^5 + 0.04321\eta_b^4 + 0.286\eta_b^3 + \eta_b^2 + 2\eta_b + 2 \right) \end{aligned} \quad (3.194)$$

Questo è il numero atomico efficace  $Z^*$  in funzione del parametro  $\eta_b = \eta(r_b)$ .

Quando un elettrone si trova ad una distanza dal nucleo  $r_b$  allora la sua velocità orbitale sarà data dall'equazione 3.190 calcolata in  $r = r_b$ . La densità di carica in  $r_b$  sarà data dall'equazione 3.191:

$$n(r_b) = Z^2 \frac{3.675e^{-\eta_b}}{a_0^3 \eta_b^3} (1 + 0.265\eta_b)^3 \quad (3.195)$$

sostituendo questa in 3.190 otterremo:

$$\frac{1}{2} m v_{LJ}^2 = \hbar^2 \frac{(3\pi^2 Z^2 3.675)^{\frac{2}{3}} e^{-\frac{2}{3}\eta_b} (1 + 0.265\eta_b)^2}{2m a_0 \eta_b^2} \quad (3.196)$$

dove con  $m$  abbiamo indicato la massa della particella incidente. Ricordando ora che, data la simmetria del problema, la velocità orbitale dell'elettrone coincide con la velocità del proiettile<sup>24</sup> allora  $1/2 m v_{LJ}^2$  coincide con l'energia cinetica della particella incidente. Quindi:

$$E = \hbar^2 \frac{(3\pi^2 Z^2 3.675)^{\frac{2}{3}} e^{-\frac{2}{3}\eta_b} (1 + 0.265\eta_b)^2}{2m a_0 \eta_b^2} \quad (3.197)$$

<sup>23</sup>H. Gümüş e F. Köksal, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **157** (2002) 445-458

<sup>24</sup>H. Sugiyama, *Radiation Effects*, **56** (1981) 205-212

invertendo questa equazione possiamo facilmente ottenere la dipendenza del parametro  $\eta_b$  dall'energia della particella incidente. Noto quindi  $\eta_b(E)$  e data l'equazione 3.194 possiamo facilmente ricavare  $Z^*(E)$ . Per il calcolo dell'energia media di ionizzazione efficace  $I^*$  si utilizza la teoria di J. Lindhard e M. Scharff<sup>25</sup> dove:

$$\ln I^* = \frac{1}{Z^*} \int_{r_b}^{\infty} \ln [\gamma \hbar \omega_p(r)] 4\pi r^2 \rho(r) dr \quad (3.198)$$

dove  $\gamma$  è circa  $\sqrt{2}$  per elementi con  $Z > 32$  ed è determinato a partire da dati sperimentali e  $\omega_p(r)$  è la frequenza locale di plasma e vale  $\sqrt{4\pi e^2 n(r)/m}$ . Lindhard e Scharff propongono come stripping criterion  $2mv^2 \geq \gamma \hbar \omega_p(r)$  ma, come suggerito da H. Suhiyama<sup>26</sup>, per il nostro studio è preferibile utilizzare il Bohr stripping criterion. Sostituendo ora l'espressione di  $n(r)$  del modello di Lenz-Jensen in quella della frequenza di plasma locale  $\omega_p(r)$  e quindi in 3.198 si ottiene:

$$\begin{aligned} \ln I^* &= \frac{1}{Z^*} \int_{r_b}^{\infty} \ln [\gamma \hbar \omega_p(r)] 4\pi r^2 \rho(r) dr \\ &= \frac{8\pi 3.675}{(3.303)^6} \frac{Z}{Z^*} \left[ \ln \left( \gamma \hbar Z \sqrt{\frac{4\pi e^2 3.675}{ma_0^3}} \right) i_1 - \frac{1}{2} i_2 - \frac{3}{2} i_3 + \frac{3}{2} i_4 \right] \end{aligned} \quad (3.199)$$

dove:

$$i_1 = \int_{\eta_b}^{\infty} \eta^2 e^{-\eta} (1 + 0.265\eta)^3 d\eta \quad (3.200)$$

$$i_2 = \int_{\eta_b}^{\infty} \eta^3 e^{-\eta} (1 + 0.265\eta)^3 d\eta \quad (3.201)$$

$$i_3 = \int_{\eta_b}^{\infty} \ln(\eta) \eta^2 e^{-\eta} (1 + 0.265\eta)^3 d\eta \quad (3.202)$$

$$i_4 = \int_{\eta_b}^{\infty} \ln(1 + 0.265\eta) \eta^2 e^{-\eta} (1 + 0.265\eta)^3 d\eta \quad (3.203)$$

risolvendo gli integrali si ottiene la seguente espressione per  $I^*$  in funzione del parametro  $\eta_b(E)$ :

$$\ln I^* = \frac{Z}{Z^*} \left( \frac{e^{-\eta_b}}{2} \right) [\ln(g_0) g_1(\eta_b) - g_2(\eta_b) - g_3(\eta_b) - g_4(\eta_b)] \quad (3.204)$$

dove:

$$g_0 = \gamma \hbar Z \sqrt{\frac{4\pi e^2 3.675}{ma_0^3}} = \gamma Z 185.12 \text{ eV} \quad (3.205)$$

<sup>25</sup>J. Lindhard and M. Scharff, *K.Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, **27**(15) 1953; J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiott, *K.Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, **33**(14) 1963;

<sup>26</sup>H. Sugiyama, *Radiation Effects*, **56** (1981) 205-212

$$g_1(\eta_b) = 0.00265\eta_b^5 + 0.04321\eta_b^4 + 0.286\eta_b^3 + \eta_b^2 + 2\eta_b + 2 \quad (3.206)$$

$$\begin{aligned} g_2(\eta_b) &= 0.0013237\eta_b^6 + 0.0229271\eta_b^5 + 0.17118\eta_b^4 \\ &+ 0.770847\eta_b^3 + 2.5\eta_b^2 + 5.91\eta_b + 8.140677 \end{aligned} \quad (3.207)$$

$$g_3(\eta) = 3e^{\eta_b} Ei(1, \eta_b) - 4.2e^{\eta_b} Ei(1, 3.7735849 + \eta_b) \quad (3.208)$$

$$\begin{aligned} g_4(\eta) &= [0.003971\eta^5 + 0.064810425\eta^4 + 0.42888399\eta^3 + \\ &+ 1.5\eta^2 + 3\eta + 3] \ln \left( \frac{\eta}{1 + 0.265\eta} \right) \end{aligned} \quad (3.209)$$

ed  $Ei$  rappresenta la funzione exponential integral<sup>27</sup>. Per quanto concerne  $z^*$  si utilizza la carica elettrica semiempirica data da<sup>28</sup>:

$$z^* = 1 - e^{-2200\beta^{1.78}} \quad (3.210)$$

dove i valori numerici sono stati corretti in modo da fittare la formula semiempirica di L. R. Peterson e A. E. S. Green per  $N_2$  ed  $O_2$ <sup>29</sup>.

### Modello di Gümüş

Il modello di H. Gümüş per il calcolo dell'Energy Stopping Power di Positroni nella materia consiste in una modifica del modello di F. Rohrlich e B. C. Carlson in cui si prende in considerazione la carica effettiva del positrone, il numero effettivo di elettroni e l'energia media di eccitazione effettiva dell'atomo contro cui questo urta. La formula per l'Energy Stopping Power può così essere scritta come:

$$S_\xi = -\frac{dE}{\rho dx} = \frac{4\pi e^4 z^* N_A Z^*}{mv^2 A} \left[ \ln \frac{E}{I^*} + \frac{1}{2} \ln \left( 1 + \frac{\tau}{2} \right) + \frac{F^+(\tau)}{2} \right] \quad (3.211)$$

dove  $\rho$  è la densità del mezzo espressa in  $g/cm^3$  e sfruttando il fatto che  $E = (\gamma - 1)mc^2$  abbiamo riscritto  $\gamma$  dell'equazione 3.183 come:

$$\gamma = \frac{E}{mc^2} + 1 \equiv \tau + 1 \quad (3.212)$$

Infine la funzione  $F^+(\tau)$  è una riscrittura della funzione  $f^+(\gamma)$  in termini della nuova variabile  $\tau$ , ovvero:

$$F^+(\tau) = 2\ln(2) - \frac{\beta}{12} \left[ 23 + \frac{14}{\tau + 2} + \frac{10}{(\tau + 2)^2} + \frac{4}{(\tau + 2)^3} \right] \quad (3.213)$$

<sup>27</sup>M. Abramowitz e I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards, App. Math. Ser. No. 55, (U.S. GPO, Washington, DC: 1970)

<sup>28</sup>H. Sugiyama, *Phys. Med. Biol.* **30** (1985) 331-335

<sup>29</sup>L. R. Peterson e A. E. S. Green, *Proc. Phys. Soc. Series II*, **1** (1968) 1131

Se come unità di misura dell'energia utilizziamo l'elettronvolt allora diventa conveniente riscrivere il termine  $\frac{4\pi e^4 N_A}{mv^2 A}$  come  $\frac{4\pi e^4 N_A}{mc^2 \beta^2 A}$  da cui:

$$\frac{4\pi e^4 N_A}{mc^2} = 0.307075 \text{ MeV cm}^2 \quad (3.214)$$

Nelle unità di misura considerate  $S_\xi(E)$  si misurerà in  $\text{MeV cm}^2/g$ . Nel caso di composti come l'Allumina, noto l'ESP per Ossigeno ed Alluminio, si può applicare la regola di somma di Bragg<sup>30</sup>:

$$S_\xi = nS_\xi^{(A)} + mS_\xi^{(B)} \quad (3.215)$$

dove  $n$  ed  $m$  sono le frazioni atomiche rispettivamente dell'elemento (A) e (B). Per l'Allumina quindi:

$$S_\xi^{Al_2O_3} = \frac{2}{5}S_\xi^{(Al)} + \frac{3}{5}S_\xi^{(O)} \quad (3.216)$$

### 3.3.2 Simulazione Monte Carlo

Analizziamo in questo paragrafo l'applicazione numerica della teoria dell'ESP analizzata nel capitolo 3.3.1 al fine di calcolare l'energia persa per unità di cammino per positroni incidenti su un campione di Allumina nel range energetico 30 – 5000 eV. Per fare ciò dobbiamo calcolare i valori del numero atomico  $Z^*$  ed energia media di eccitazione  $I^*$  efficaci per atomi di Ossigeno ed Alluminio. Come visto nel sottoparagrafo 3.3.1 è possibile, per il calcolo di queste grandezze, utilizzare funzioni analitiche del parametro  $\eta_b(E)$ , in particolare:

$$\ln I^* = \frac{Z}{Z^*} \left( \frac{e^{-\eta_b}}{2} \right) [\ln(g_0)g_1(\eta_b) - g_2(\eta_b) - g_3(\eta_b) - g_4(\eta_b)] \quad (3.217)$$

dove  $g_{0,1,2,3,4}(\eta_b)$  sono riportate a pagina 67 e,

$$Z^* = Z \left( \frac{e^{-\eta_b}}{2} \right) (0.00265\eta_b^5 + 0.04321\eta_b^4 + 0.286\eta_b^3 + \eta_b^2 + 2\eta_b + 2) \quad (3.218)$$

Mentre per il calcolo di  $Z^*(\eta_b)$  non vi sono problemi dal punto di vista computazionale, per  $I^*(\eta_b)$  non possiamo dire lo stesso. Infatti la funzione  $g_3(\eta_b)$  dipende dalla funzione exponential integral  $Ei(x)$  definita come:

$$E_i(1, x) = E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt \quad (3.219)$$

Questa funzione è possibile espanderla in serie di Puiseux come:

$$E_1(x) = -\gamma - \ln(x) - \sum_{n=1}^{\infty} (-)^n \frac{x^n}{nn!} \quad (3.220)$$

---

<sup>30</sup>W. H. Bragg and R. Kleeman, *Philos. Mag.*, **10** (1905) 318

dove  $\gamma = 0.5772156649$  è la costante di Eulero - Mascheroni. Chiaramente, dal punto di vista computazionale non è possibile calcolare tutti i termini della serie quindi dovremo limitarci al caso:

$$E_1(x, N) = -\gamma - \ln(x) - \sum_{n=1}^N (-)^n \frac{x^n}{nn!} \quad (3.221)$$

Un primo studio è quindi quello di determinare, nel range di  $\eta$  utile al fine della nostra simulazione, il numero intero  $N$  tale per cui  $E_1(x) \cong E_1(x, N)$ . Vedremo successivamente come al range energetico  $30 - 5000eV$  corrisponda un range in  $\eta_b$  pari a  $0 - 12$ . Calcoliamo quindi  $I^*(\eta_b)$  con  $N$  rispettivamente pari a 100, 50, 30 e 20 e confrontiamo quanto ottenuto con il calcolo esatto fatto con il programma MathCad 7.0 per MS Windows utilizzando la formula:

$$\ln I^* = \frac{8\pi 3.675}{(3.303)^6} \frac{Z}{Z^*} \left[ \ln \left( \gamma \hbar Z \sqrt{\frac{4\pi e^2 3.675}{ma_0^3}} \right) i_1 - \frac{1}{2} i_2 - \frac{3}{2} i_3 + \frac{3}{2} i_4 \right] \quad (3.222)$$

dove  $i_{1,2,3,4}(\eta)$  sono riportate a pagina 67. I risultati sono riportati rispettivamente per Alluminio ed Ossigeno in figura 3.10 e 3.11. Come si vede dai grafici si ha una buona approssimazione della funzione exponential integral per valori di  $N$  pari a trenta o superiori. L'utilizzo della formula 3.217 per il calcolo di  $I^*(\eta_b)$  risulta però di difficile applicazione data la sua complessità algebrica e la potenza di calcolo richiesta alla macchina. Si è pensato quindi di calcolare alcuni punti della funzione  $I^*(\eta_b)$  e di fittare questi con una funzione polinomiale di sesto grado del tipo:

$$I^*(\eta_b) = a_6 \eta_b^6 + a_5 \eta_b^5 + a_4 \eta_b^4 + a_3 \eta_b^3 + a_2 \eta_b^2 + a_1 \eta_b + a_0 \quad (3.223)$$

il risultato grafico del fit è riportato per Alluminio ed Ossigeno rispettivamente in figura 3.12 e 3.13 mentre i valori dei parametri  $a_i$  stimati sono riportati in tabella 3.6. Il confronto tra  $I^*(E)$  calcolato in modo esatto ed approssimato con una polinomiale per i vari elementi analizzati è illustrato in figura 3.14. Come si vede dal grafico l'approssimazione polinomiale è una buona approssimazione e, dato che con questo metodo viene ridotta anche la potenza di calcolo richiesta alla macchina, l'approssimazione polinomiale sarà la strategia adottata nel nostro studio. L'ultimo calcolo necessario per il calcolo dell'ESP è ricavare la relazione che intercorre tra il parametro  $\eta_b$  e l'energia cinetica  $E$  del positrone. Questa, per quanto detto nel paragrafo 3.3.1, è data da:

$$E = \hbar^2 \frac{(3\pi^2 Z^2 3.675)^{\frac{2}{3}} e^{-\frac{2}{3}\eta_b} (1 + 0.265\eta_b)^2}{2ma_0\eta_b^2} \quad (3.224)$$

La relazione  $E(\eta_b)$  non è invertibile algebricamente limitando notevolmente la precisione del nostro calcolo. Per risolvere il problema si è pensato di

calcolare, per alcuni valori di  $\eta$ , il valore dell'energia del positrone  $E$  e fittare con una curva opportuna il grafico  $\eta(E)$ . Data la forma dell'equazione 3.224 si è deciso di utilizzare come curve di fit le seguenti

$$\eta_b(E) = e_6 \ln(E)^6 + e_5 \ln(E)^5 + e_4 \ln(E)^4 + e_3 \ln(E)^3 + e_2 \ln(E)^2 + e_1 \ln(E) + e_0 \quad (3.225)$$

$$\eta_b(E)' = e_6' \ln(E)^6 + e_5' \ln(E)^5 + e_4' \ln(E)^4 + e_3' \ln(E)^3 + e_2' \ln(E)^2 + e_1' \ln(E) + e_0' \quad (3.226)$$

dall'analisi effettuata su Alluminio ed Ossigeno non si è osservata una sostanziale differenza nell'utilizzo delle due funzioni  $\eta_b(E)$  ed  $\eta_b(E)'$  e quindi, dato che la prima delle due richiede una potenza inferiore di calcolo alla macchina, si è optato per l'utilizzo di questa. I valori dei parametri  $e_i$  stimati dal fit con la funzione 3.225 sono riportati in tabella 3.7. Data l'espressione della funzione  $\eta_b(E)$ , utilizzando le equazioni 3.218 ed 3.223, possiamo calcolare  $Z^*(E)$  ed  $I^*(E)$ . Per calcolare infine la carica efficace del positrone abbiamo utilizzato

$$z^* = 1 - e^{-2200\beta^{1.78}} \quad (3.227)$$

dove è possibile esprimere la velocità  $\beta$  in funzione dell'energia cinetica del positrone come:

$$\beta(E) = \sqrt{1 - \left( \frac{1}{1 + \frac{E}{mc^2}} \right)^2} \quad (3.228)$$

che nel range di energie prese in considerazione in questo studio, si riduce alla formula non relativistica:

$$\beta(E) = \sqrt{\frac{2E}{mc^2}} \quad (3.229)$$

I risultati delle grandezze efficaci in funzione dell'energia sono riportati in figura 3.15 e 3.16. In figura 3.17 è riportata invece l'Energy Stopping Power per Alluminio, Ossigeno ed Allumina. In figura 3.18 è riportato il confronto con il calcolo per l'Alluminio effettuato da H. Gümüş. Come si osserva dal grafico, c'è una discrepanza tra quanto ottenuto dal nostro studio e quanto ottenuto da H. Gümüş per energie inferiori ai 100 eV. Il motivo di tale discrepanza è sostanzialmente legato alla costante  $\gamma$  che per  $Z < 32$  assume valori leggermente diversi da  $\sqrt{2}$ . Il valore di  $\gamma$  è determinato a partire dai dati sperimentali. L'errore comunque compiuto sulla determinazione dell'ESP permane comunque relativamente basso.

Elemento	$a_6$	$a_5$	$a_4$
Ossigeno	$6.0361 \cdot 10^{-4}$	$3.0667 \cdot 10^{-3}$	$-3.1327 \cdot 10^{-1}$
Aluminio	$1.0025 \cdot 10^{-3}$	$4.4800 \cdot 10^{-3}$	$-5.0464 \cdot 10^{-1}$

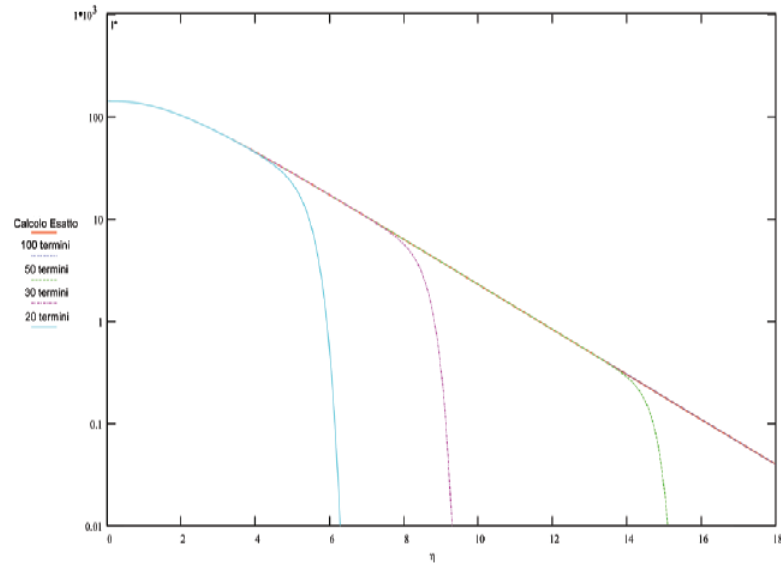
Elemento	$a_3$	$a_2$	$a_1$	$a_0$
Ossigeno	3.6356	$-1.5148 \cdot 10^1$	6.5554	$8.5153 \cdot 10^1$
Aluminio	5.8895	$-2.4579 \cdot 10^1$	$1.0624 \cdot 10^1$	$1.3838 \cdot 10^2$

Tabella 3.6: Parametri determinati dal fit per il calcolo di  $I^*(\eta_b)$ 

Elemento	$a_6$	$a_5$	$a_4$
Ossigeno	$-5.2302 \cdot 10^{-7}$	$4.8851 \cdot 10^{-5}$	$-1.6925 \cdot 10^{-3}$
Aluminio	$-4.9751 \cdot 10^{-7}$	$4.8436 \cdot 10^{-5}$	$-1.7630 \cdot 10^{-3}$

Elemento	$a_3$	$a_2$	$a_1$	$a_0$
Ossigeno	$2.5128 \cdot 10^{-2}$	$9.5748 \cdot 10^{-2}$	-1.2268	9.7289
Aluminio	$2.8064 \cdot 10^{-2}$	$-1.3378 \cdot 10^{-1}$	-1.1328	$1.0562 \cdot 10^1$

Tabella 3.7: Parametri determinati dal fit per il calcolo di  $\eta_b(E)$ Figura 3.10: Energia media di eccitazione efficace  $I^*$  in funzione del parametro  $\eta_b(E)$  per Alluminio. In vari colori sono tracciati i casi con  $N = 100, 50, 30, 20$ .

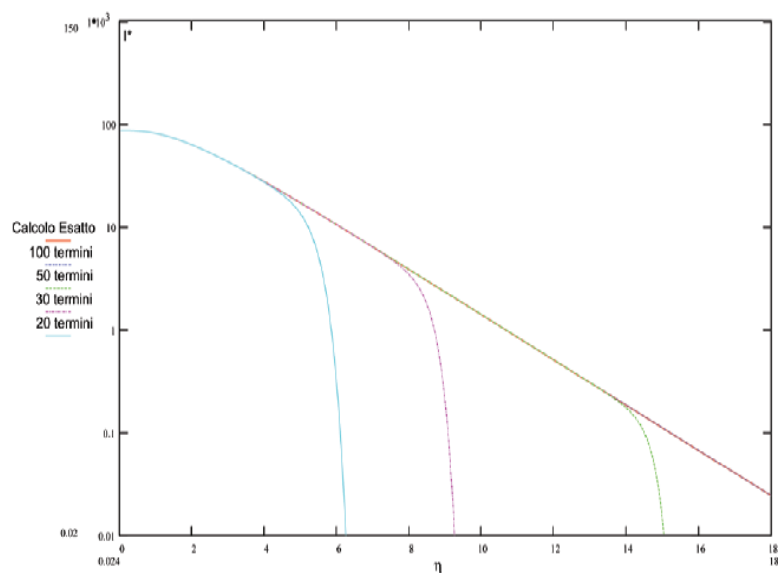


Figura 3.11: Energia media di eccitazione efficace  $I^*$  in funzione del parametro  $\eta_b(E)$  per Ossigeno. In vari colori sono tracciati i casi con  $N = 100, 50, 30, 20$ .

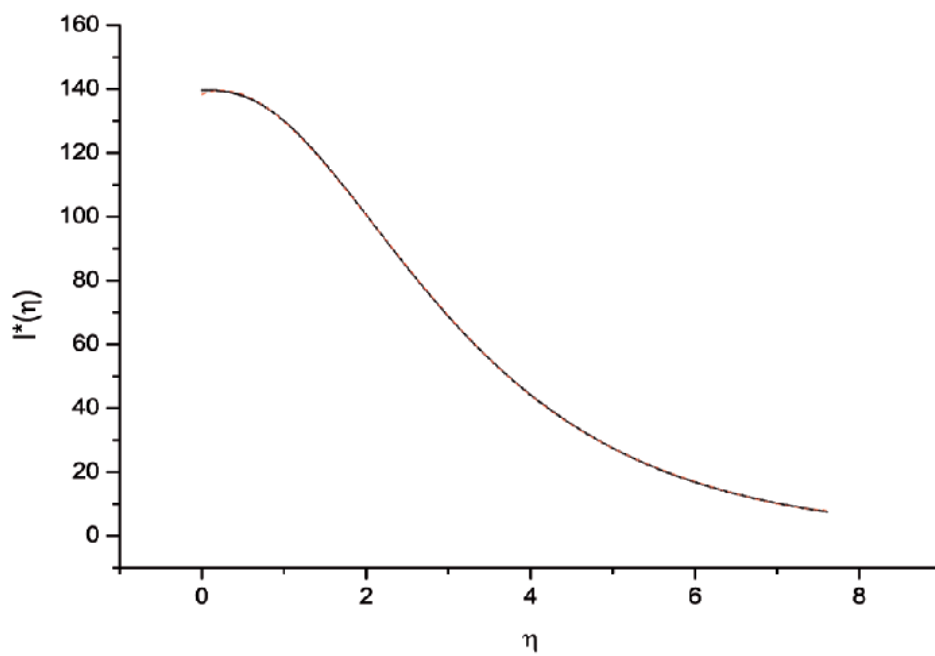


Figura 3.12: Energia media di eccitazione efficace  $I^*$  in funzione del parametro  $\eta_b(E)$  per Alluminio. La linea continua nera rappresenta il calcolo esatto. La linea tratteggiata rossa è la curva di fit polinomiale

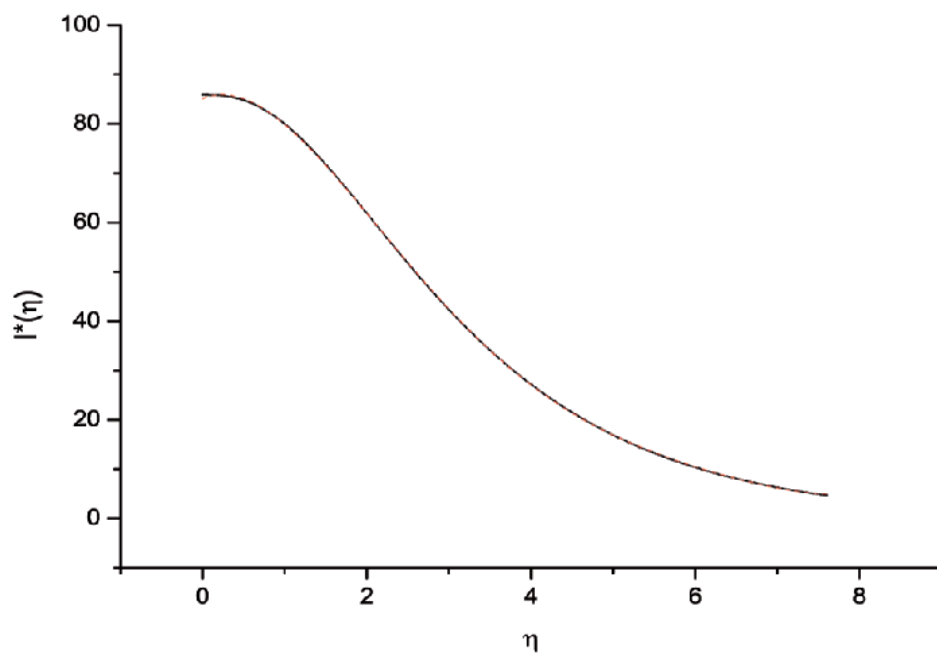


Figura 3.13: Energia media di eccitazione efficace  $I^*$  in funzione del parametro  $\eta_b(E)$  per Ossigeno. La linea continua nera rappresenta il calcolo esatto. La linea tratteggiata rossa è la curva di fit polinomiale

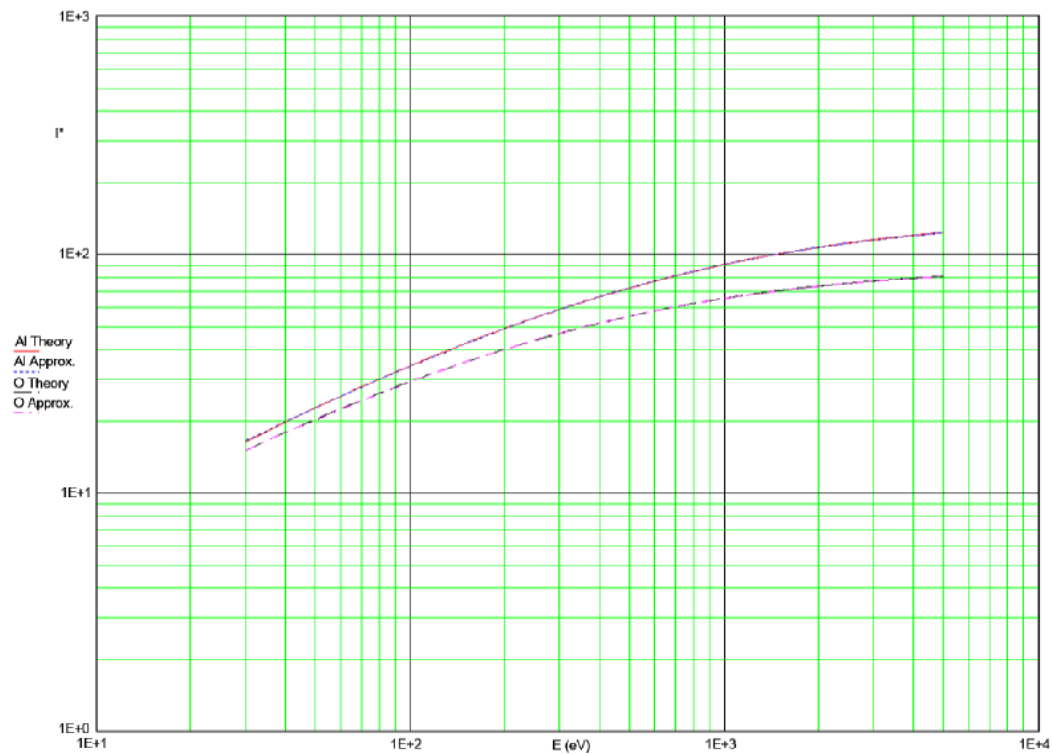


Figura 3.14: Energia media di eccitazione efficace  $I^*$  in funzione dell'energia cinetica del positrone  $E$ . Con *theory* si è indicato il calcolo esatto di  $I^*(E)$  mentre con *approx.* l'approssimazione polinomiale.

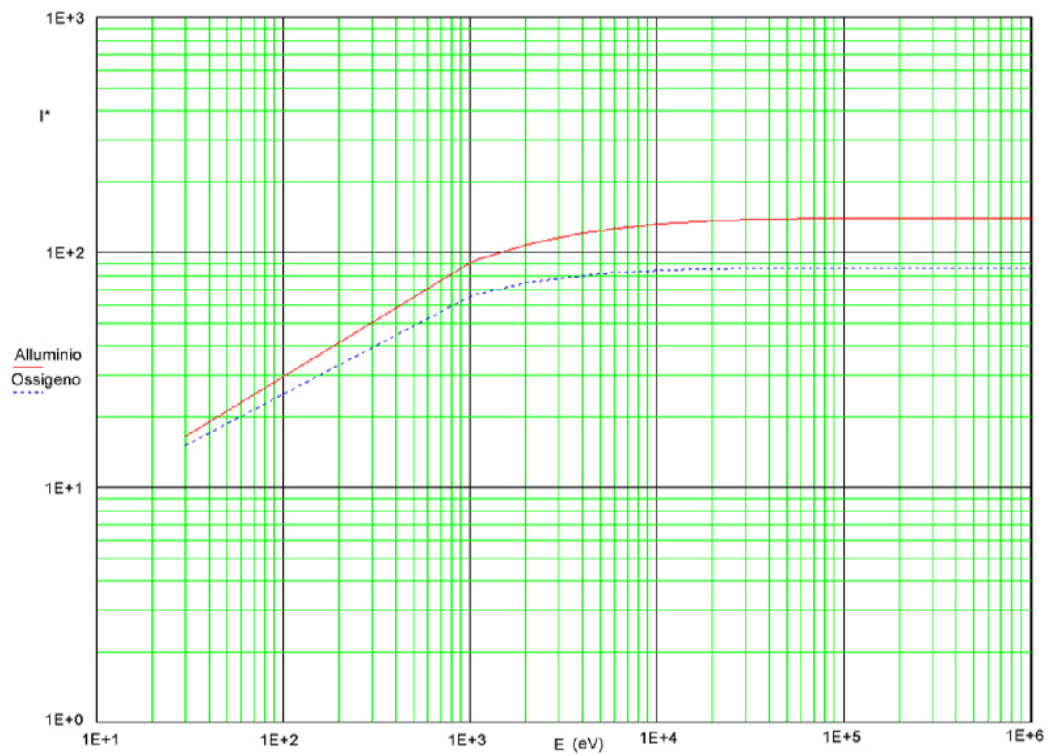


Figura 3.15: Energia media di eccitazione efficace  $I^*$  in funzione dell'energia cinetica del positrone  $E$  per Alluminio ed Ossigeno.

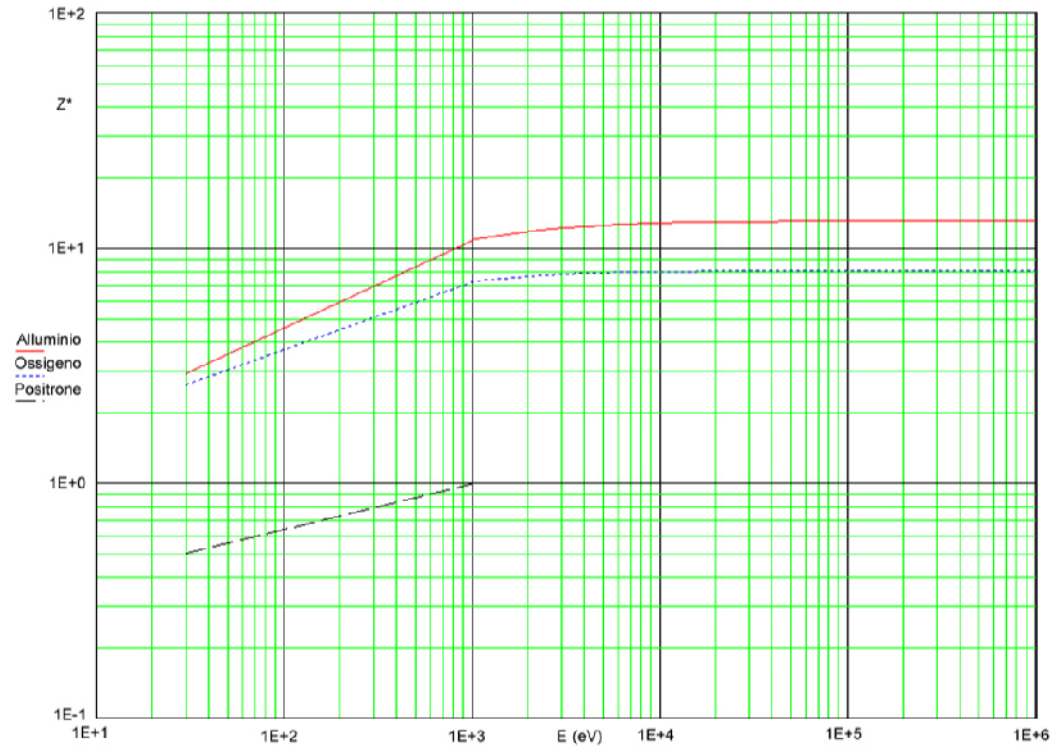


Figura 3.16: Numero atomico  $Z^*$  e carica del positrone  $z^*$  efficace in funzione dell'energia cinetica del positrone  $E$ .

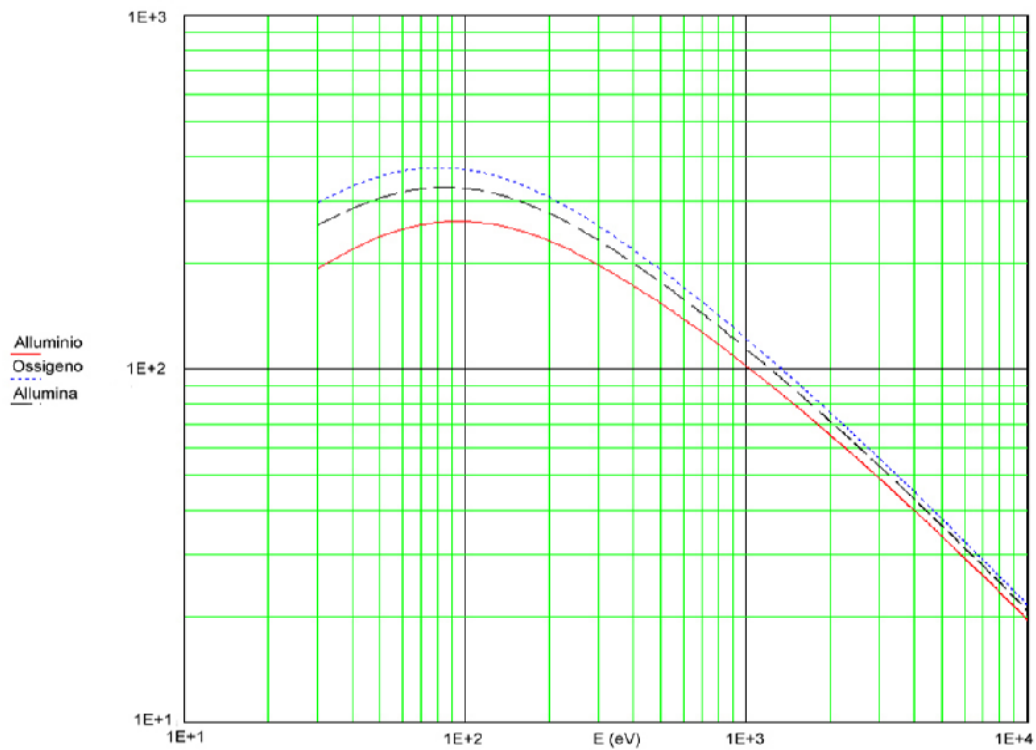


Figura 3.17: Energy Stopping Power  $S_\xi$  in funzione dell'energia cinetica del positrone  $E$  per Alluminio, Ossigeno ed Allumina.

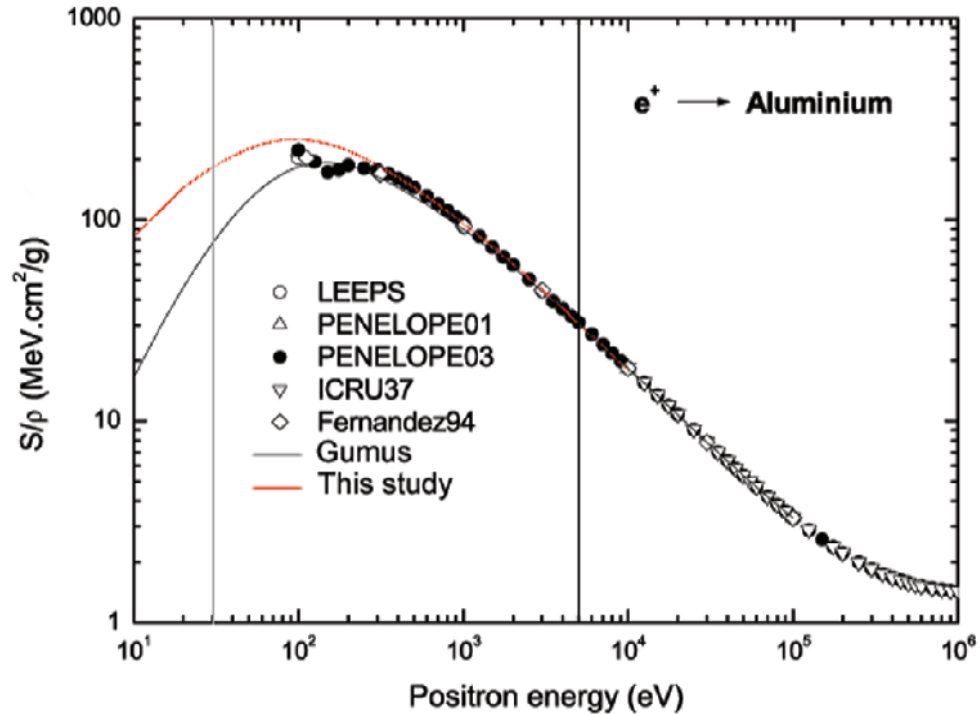


Figura 3.18: Energy Stopping Power  $S_{\xi}$  in funzione dell'energia cinetica del positrone  $E$  per Alluminio. La linea continua nera indica il calcolo di H. Gümüş (H. Gümüş, Ö. Kabaday e M. Ç. Tufan, *Chinese Journal of Physics*, **44** (2006) 290-296). La linea continua rossa il calcolo effettuato nel nostro studio. I punti aperti sono i risultati del codice Monte Carlo LEEPS di J. M. Fernández - Varea (J. M. Fernández - Varea, *Radiat. Phys. Chem.*, **53** (1998) 325). I triangoli sono i risultati dei calcoli effettuati con PENELOPE 01 (F. Salvat., J. M. Fernández - Varea e J. Sempau, *PENELOPE, A Code Systems for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*, (NEA, Data-bank, France, 2001-2003)). I triangoli rovesciati sono i dati ripresi dal ICRU 37 report (ICRU, Report No. 37, 1984, *Stopping Powers for electrons and positrons* (International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 1984)). I rombi sono i risultati dei calcoli effettuati da J. M. Fernández e collaboratori (J. M. Fernández - Varea, D. Liljequist e F. Salvat. *Sampling procedures using optical-data and partial wave cross section in a Monte Carlo code for simulation kilovolt electron and positron transport in solids*, (USIP Report 94-03, Stockholms Univ., Sweden, 1994)).

## Capitolo 4

# Simulazione Monte Carlo a Basse Energie

### 4.1 Introduzione

Numerose<sup>1</sup> sono le simulazioni Monte Carlo dell'interazione di positroni nei solidi nel range energetico compreso tra qualche  $keV$  e le decine di  $eV$ . Tra queste possiamo sicuramente inserire la simulazione sviluppata in questo lavoro e descritta nel capitolo 3. Scarse sono invece le simulazioni che descrivono il processo di rallentamento dei positroni alle scale dell' $eV$ . Per energie così basse abbiamo che i processi di perdita di energia dei positroni nel mezzo dipendono dalla classe dei solidi considerata. All'interno di ciascuna classe è poi possibile avere anche una ulteriore differenziazione che può dipendere da fattori quali ad esempio la struttura del solido (amorfo o cristallino) o la presenza di pori (materiale bulk, poroso, canalare). Questa è stata la difficoltà principale che ci ha indotto a sviluppare una simulazione Monte Carlo specifica per Allumina bulk, facilmente estendibile anche a membrane di tipo Whatman<sup>2</sup>. Per semplicità, nel modello sviluppato in questo lavoro non vengono presi in considerazione effetti specifici dovuti alla natura cristallina del campione<sup>3</sup>. Lo schema utilizzato per la simulazione nell'intervallo di energie compreso tra  $20 eV$  ed  $1eV$  si basa sul modello di Ritley per positroni in solidi metallici<sup>4</sup>. Ogni positrone con energia inferiore ai  $20 eV$  viene seguito sino al cut-off della simulazione fissato ad  $1eV$ . Esso si muove percorrendo tratti rettilinei pari ad una frazione del libero cammino medio totale. Alla fine di ogni tratto il positrone, con una certa probabilità, urterà elasticamente

---

<sup>1</sup>M. J. Puska and R. M. Nieminen, *Reviews of Modern Physics*,**66** (1994) 841

<sup>2</sup>Queste membrane sono costituite da Allumina con canali del diametro pari a  $20 nm$  e spessore di  $60 \mu m$ . Tali membrane permetterebbero la formazione ed eventuale termalizzazione del positronio.

<sup>3</sup>La simulazione è quindi particolarmente adatta per targhette costituite da Allumina amorfa.

<sup>4</sup>K. A. Ritley et al., *Journal of Applied Physics*,**74** (1993) 3479

od anelasticamente<sup>5</sup> una molecola di Allumina. In entrambe i casi il positrone subirà una deviazione angolare  $(\theta, \phi)$  e solo nel caso dello scattering anelastico si avrà una perdita di energia  $\Delta E$ . Se il positrone raggiunge la superficie con energia compresa nell'intervallo  $[10.2 \text{ eV}, 28.1 \text{ eV}]$  allora può formare positronio con una probabilità  $P_{Ps}(E)$ . Del positronio formato il 75% sarà ortopositronio ed il 25% parapositronio. La determinazione del libero cammino medio elastico, lo scattering con fononi e la formazione di positronio in Allumina saranno descritti nei paragrafi seguenti.

## 4.2 Processi Elastici

Durante il processo di rallentamento dei positroni nella materia lo scattering elastico su molecole di Allumina rimane un canale aperto anche per energie inferiori ai  $20 \text{ eV}$ . In tale range energetico non è però più possibile calcolare la sezione d'urto elastica semplicemente applicando il RPWM come illustrato nel capitolo 3. In particolare non sono più valide la prima approssimazione di Born (eq.3.22) e la regola di Bragg (eq. 3.162)<sup>6</sup>. Il primo effetto evidente è il fatto che la sezione d'urto totale elastica diverge quando l'energia del positrone incidente tende a zero. Questo porta a valori di libero cammino medio inferiori alla lunghezza d'onda di De Broglie associata al positrone. Il calcolo della sezione d'urto elastica per valori dell'energia così bassa sono alquanto complicati e di difficile uso in una simulazione Monte Carlo. Malgrado ciò è possibile intuire che al diminuire dell'energia del positrone incidente lo scattering elastico deve divenire meno importante. Per tenere conto della diminuzione della sezione d'urto totale elastica in funzione dell'energia del positrone si è utilizzata la funzione empirica:

$$R(E) = th \left[ \alpha \left( \frac{E}{E_{gap}} \right)^2 \right] \quad (4.1)$$

dove  $E$  è l'energia del positrone incidente,  $E_{gap}$  la gap-energy dell'Allumina mentre  $\alpha$  è un parametro del Monte Carlo e varia tra 0.1 ed 1.5. Nella nostra simulazione  $\alpha = 0.1$ <sup>7</sup>. Chiaramente la funzione di cut-off non è determinata univocamente. Nel nostro lavoro si è scelto di utilizzare la funzione  $R(E)$  in quanto ha permesso a J. P. Ganachaud e A. Mokrani di simulare lo scattering elastico di elettroni in Allumina amorfa nel range energetico  $0 - 50 \text{ eV}$ <sup>8</sup>. Il

---

<sup>5</sup>Scattering con fononi

<sup>6</sup>La lunghezza d'onda di De Broglie associata al positrone diviene inferiore della tipica distanza interatomica nella molecola di Allumina ( $\sim 1\text{\AA}$ )

<sup>7</sup>Data l'arbitrarietà di  $\alpha$ , si è scelto all'interno del range atteso, il valore tale da minimizzare i tempi di calcolo. Questi dipendono fortemente dalla probabilità di scattering elastico nell'intorno di  $20 \text{ eV}$  dove sia libero cammino medio che energia persa hanno valori piccoli.

<sup>8</sup>J. P. Ganachaud e A. Mokrani, *Surface Science*, **334** (1995) 329

grafico 4.1 mostra l'andamento dell'inverso del libero cammino medio elastico in funzione dell'energia del positrone.

### 4.3 Processi Anelastici

I processi anelastici considerati nel nostro lavoro responsabili della perdita di energia del positrone sono lo scattering con fononi e la formazione di positronio. Riportiamo nei paragrafi seguenti una dettagliata descrizione dei due fenomeni.

#### 4.3.1 Scattering con fononi

A basse energie, quando l'energia del positrone  $E$  non eccede di due o tre volte il valore della gap-energy  $E_{gap}$ , un positrone ha una probabilità rilevante di interagire con le vibrazioni reticolari. Nel nostro modello considereremo unicamente lo scattering con creazione di fononi longitudinali ottici.<sup>9</sup> L'interazione di un positrone quasi-libero con fononi longitudinali ottici (LO) in un mezzo polare possono essere trattati dalla teoria delle perturbazioni di Fröhlich<sup>10</sup>. L'interazione con il reticolo è accompagnata dalla creazione o assorbimento di un fonone. Per il ramo ottico, è ragionevole ignorare<sup>11</sup> la relazione di dispersione dei fononi longitudinali ed è possibile quindi caratterizzarli con un'unica frequenza  $\omega_{LO}$ . Un positrone con energia  $E$  ha una probabilità per unità di lunghezza di creare un fonone di frequenza  $\omega$ , perdendo una quantità di energia  $\Delta E = \hbar\omega$ , data da:

$$\sigma_{ph}(E) = \left( \frac{n_q + 1}{2} \right) \cdot \left( \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \cdot \frac{1}{a_0} \right) \cdot \frac{\Delta E}{E} \cdot \ln \left\{ \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{\Delta E}{E}}}{1 - \sqrt{1 - \frac{\Delta E}{E}}} \right\} \quad (4.2)$$

dove  $\epsilon(0)$  rappresenta la costante dielettrica statica e  $\epsilon(\infty)$  è la costante dielettrica calcolata nell'ottico.  $a_0$  è il raggio di Bohr ed  $n_q$  è il numero di occupazione fononico calcolato alla temperatura  $T$ . Questo è dato da:

$$n_q = \frac{1}{e^{E/kT} - 1} \quad (4.3)$$

<sup>9</sup>La collisione con fononi LO rappresenta l'interazione principale che il positrone ha con il materiale. Comunque, alcuni autori, come ad esempio Di Maria e Fischetti (D. J. Di Maria e M. V. Fischetti, *J. Appl. Phys.*, **64** (1988) 4683) o Cartier e Mc Feely (E. Cartier e F. R. Mc Feely, *Phys. Rev. B*, **44** (1991) 10689), hanno mostrato che le collisioni con fononi longitudinali acustici LA giocano anch'esse un ruolo importante al fine di determinare il moto di positroni nei semiconduttori. Seppur tali urti non comportano grandi perdite di energia essi danno luogo a grandi deviazioni angolari. L'importanza di tale contributo resta però ancora oggi oggetto di dibattito.

<sup>10</sup>H. Fröhlich, *Adv. Phys.*, **3** (1954) 325

<sup>11</sup>J. P. Ganachaud e A. Mokrani, *Surface Science*, **334** (1995) 329

con  $k$  costante di Boltzman. Date le basse temperature in gioco abbiamo che  $n_q \sim 0$ . Nel caso dell'Allumina abbiamo  $\epsilon(0) = 9$ ,  $\epsilon(\infty) = 3$  e  $\Delta E = \hbar\omega_{LO} = 0.1eV$  avendo considerato solo fononi LO. Analogalmente si può calcolare la probabilità per unità di lunghezza di assorbire un fonone. Quello che si ottiene è che il rate di creazione di fononi è circa dieci volte superiore a quello di assorbimento. Tale fatto ci ha condotto a trascurare l'assorbimento di fononi nei nostri calcoli. L'inverso del libero cammino medio fononico è riportato in figura 4.1.

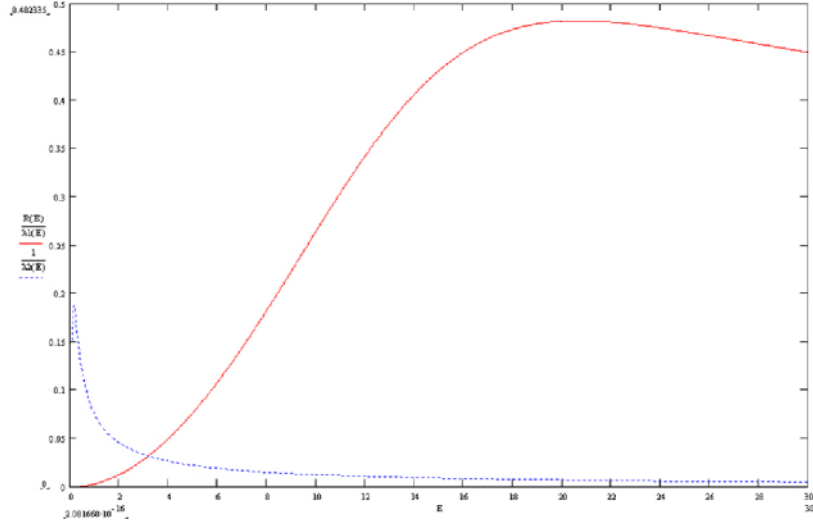


Figura 4.1: Libero cammino medio del positrone a bassa energia in funzione dell'energia del positrone. In rosso è indicato il libero cammino medio elastico, in blu quello anelastico (scattering con fononi).

Si osservi come il contributo della formazione di fononi sia rilevante solo per energie inferiori ai 20 eV. Proprio questo valore di energia funge da cut-off per la nostra simulazione ad energie intermedie illustrata nel capitolo 3. La probabilità che un positrone venga deflesso di un angolo  $\theta$  rispetto alla direzione del moto a seguito della creazione di un fonone è data da:

$$P(\theta) = \frac{1}{C(E)} \cdot \frac{\sin(\theta)}{E + E' - 2 \cdot \sqrt{EE'} \cos(\theta)} \quad (4.4)$$

dove il fattore di normalizzazione  $C(E)$  è dato da:

$$C(E) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{EE'}} \ln \left( \frac{E + E' + 2\sqrt{EE'}}{E + E' - 2\sqrt{EE'}} \right) \quad (4.5)$$

con  $E' = E - \Delta E$  energia del positrone dopo lo scattering. La funzione  $P(\theta)$  è illustrata in figura 4.2 per un positrone di energia  $E = 15 eV$ .

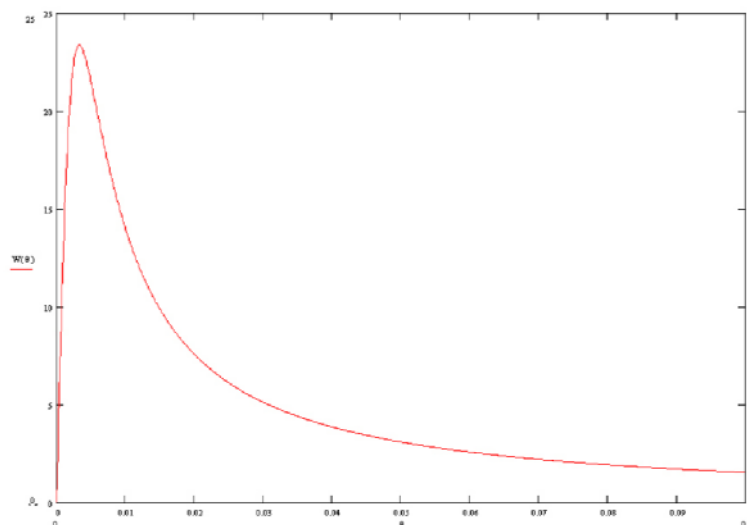


Figura 4.2: Probabilità per un fonone di energia  $15 \text{ eV}$  di essere deflesso di un angolo  $\theta$ .

### 4.3.2 Formazione di Positronio

La formazione di positronio (Ps) negli isolanti, descritta nel paragrafo 2.3.2, può essere attribuita fondamentalmente a tre processi fisici differenti:

1. i positroni vengono rallentati nel solido per poi diffondere sino alla superficie dove, catturando un elettrone, formano positronio;
2. i positroni vengono rallentati nel solido per poi diffondere sino alla superficie dove vengono intrappolati in buche di potenziale generate da difetti nel solido. Questi a loro volta possono essere attivati termicamente formando positronio;
3. i positroni vengono rallentati nel solido dove formano positronio. Questo, una volta formato, diffonde sino alla superficie.

Date le basse temperature cui sarà tenuta la targhetta  $T \sim K$ , la formazione di positronio tramite attivazione termica è un processo trascurabile. Inoltre sperimentalmente non è stata osservata formazione di positronio nel bulk dell'Allumina<sup>12</sup>. La giustificazione teorica di quest'ultimo fatto sperimentale è ancor oggi oggetto di dibattito. Al fine della simulazione verrà considerato quindi come unico processo responsabile della formazione di positronio in Allumina la cattura di elettroni da parte dei positroni retrodiffusi sino alla superficie. Non esiste allo stato attuale uno studio teorico in grado

<sup>12</sup>S. Van Petegem et al., *Phys. Rev. B*, **70** (2004) 115410

di descrivere la formazione di positronio alla superficie di materiali isolanti. Nel nostro lavoro abbiamo perciò dovuto sviluppare un modello basato sulla conoscenza della formazione di positronio nel bulk dei dielettrici. In particolare abbiamo considerato il modello di Öre discusso nel paragrafo 2.3.2 per il vuoto applicato ai solidi isolanti<sup>13</sup>. Secondo tale modello abbiamo formazione di positronio nel materiale se il positrone incidente ha energia sufficiente per portare un elettrone del materiale dalla banda di valenza a quella di conduzione, formare positronio ed estrarre il positronio dal solido. Ovvero, data  $E$  energia del positrone incidente,  $E_{gap}$  l'energy gap del solido,  $W_-$  la funzione lavoro dell'elettrone nel solido,  $W_{Ps}$  la funzione lavoro del positronio nel solido ed  $E_{Ps}^b$  l'energia di legame dell'atomo di positronio pari a  $6.8 eV$ , abbiamo che:

$$E \geq W_- + E_{gap} - (E_{Ps}^b + W_{Ps}) \quad (4.6)$$

Questa risulterà essere anche l'energia minima che un positrone dovrà avere per formare positronio alla superficie dell'isolante. Il limite superiore nel modello di Öre è determinato nei solidi dal fatto che l'atomo di positronio, una volta formato può disgregarsi per urti con gli atomi del materiale. Nel nostro caso, dove la formazione di positronio avviene in superficie, il rischio di una possibile disgregazione del Ps per urti con il materiale diviene fondamentalmente nullo. Il limite superiore dell'energia del positrone sarà quindi determinato dalla sezione d'urto del processo di formazione di positronio  $e^+ + A \rightarrow Ps + A^-$ . Questa reazione è simile a quella di formazione di anti-idrogeno  $\bar{p} + Ps \rightarrow \bar{H} + e^-$ . Quello che ci si aspetta è che quindi la sezione d'urto vada a zero velocemente per velocità del positrone superiori a quella dell'elettrone legato. Ricordando però che l'energia cinetica di un elettrone legato ad un atomo coincide con l'energia di legame dell'atomo stesso, allora possiamo affermare di avere formazione di positronio in superficie se:

$$E \leq E^B \quad (4.7)$$

dove  $E^B$  è l'energia di legame degli atomi (molecole) dell'isolante considerato. Possiamo quindi considerare come Öre gap per la formazione di positronio alla superficie di materiali isolanti:

$$W_- + E_{gap} - (E_{Ps}^b + W_{Ps}) \leq E \leq E^B \quad (4.8)$$

Nel caso dell'Allumina abbiamo che  $W_- \simeq 4 eV$ <sup>14</sup>,  $E_{gap} \simeq 10 eV$ <sup>15</sup>,  $E_{Ps}^b = 6.8 eV$  e  $W_{Ps} = -3 \pm 1$ <sup>16</sup>. Nuovamente, anche l'energia di legame dell'Allumina è non è nota ne sperimentalmente, ne teoricamente. A tale scopo si è

<sup>13</sup>A. Dupasquier, *International School of Physics "Enrico Fermi"*, Positron Solid-State Physics (Varenna - Italy, 1981)

<sup>14</sup>Spokes, *Annual rept.*, 1 July 62-30 June 63

<sup>15</sup>Ganachaud et al., *Surf. Sci.*, **334** (1995) 329

<sup>16</sup>R. Brusa, comunicazioni personali. Questo dato non è noto sperimentalmente. Il valore fornito in questo lavoro è la migliore stima che si può dare a partire dalle funzioni lavoro di materiali con proprietà simili all'Allumina.

supposto che l'energia di legame dell'Allumina sia data dal valore dell'energia assunta dagli elettroni sul fondo della banda di valenza. In particolare, per l'Allumina avremo  $E^B = 28.1 \text{ eV}$ . Sommando tutti i contributi, abbiamo come intervallo di energia del positrone utile al fine della formazione di positronio in superficie:

$$(10.2 \pm 1) \text{ eV} \leq E \leq 28.1 \text{ eV} \quad (4.9)$$

Per conoscere quale è la probabilità che un positrone, una volta giunto in superficie con energia compresa nell'Öre gap, formi positronio è necessario calcolare o misurare la sezione d'urto di formazione di positronio in Allumina. Come già affermato questa quantità non è nota. È possibile comunque misurare la quantità  $f_{pu}$  definita come il rapporto tra il numero di positronio formato ed il numero totale di positroni tornati in superficie dopo il processo di rallentamento nel materiale. I dati sperimentali<sup>17</sup> mostrano che  $f_{pu} = 0.28$ . Supponiamo ora di simulare l'interazione di  $N$  positroni con un campione di Allumina. Di questi  $N$  positroni  $N_b$  saranno tornati in superficie. A sua volta di questi  $N_b$  positroni, solo una frazione  $N_{OG}$  si troveranno ad avere energia compresa nell'Öre gap precedentemente illustrato. Se indico con  $p(E)$  la probabilità di formazione di positronio<sup>18</sup> alla superficie dell'Allumina in funzione dell'energia del fascio incidente allora:

$$f_{pu} = \frac{p(E) \cdot N_{OG}}{N_b} = 0.28 \quad (4.10)$$

noto  $N_{OG}$  ed  $N_b$ , forniti dalla simulazione, è possibile ricavare  $p(E)$ . Data  $p(E)$  posso a sua volta ricavare la percentuale di positronio formato in Allumina. È possibile inoltre calcolare la distribuzione angolare del positronio emesso considerando come direzione del positronio uscente quella posseduta dal positrone prima dell'urto<sup>19</sup>.

---

<sup>17</sup>S. Van Petegem et al., *Phys. Rev. B*, **70** (2004) 115410

<sup>18</sup>Probabilità che un positrone con energia compresa nell'Öre gap formi positronio

<sup>19</sup>C. Champion et al., *Phys. Med. Biol.*, **51** (2006) 1707



## Capitolo 5

# Simulazione Monte Carlo della Formazione di Positronio in Allumina

### 5.1 Il Programma

La simulazione Monte Carlo sviluppata in questo lavoro al fine di studiare la formazione di positronio in Allumina è articolata in tre fasi. La prima fase consiste nella simulazione del rallentamento di positroni da energie del fascio incidente  $E \simeq 5000 \text{ eV}$  a  $20 \text{ eV}$ . Per fare questo si è utilizzato il metodo della *Continuous Energy Loss Approximation* (CELA). Tale metodo consiste nel considerare il positrone come una particella classica <sup>1</sup> che si muove nel materiale seguendo una linea spezzata. Ad ogni vertice della spezzata si ha uno scattering elastico del positrone con una molecola del mezzo in grado di fornire a questo una deviazione angolare  $(\theta_{el}, \phi)$ . La probabilità di subire una deviazione angolare  $\theta_{el}$  è determinata a partire dalla sezione d'urto differenziale elastica descritta nel paragrafo 3.2. La distanza  $L$  percorsa dal positrone tra uno scattering ed il successivo è determinata a partire dal libero cammino medio elastico:

$$\lambda_{el}(E) = \frac{10^{24} A}{N_A \rho \sigma_{el}(E)} \quad (5.1)$$

dove  $\lambda_{el}(E)$  è espressa in Amstrong,  $N_A$  è il numero di Avogadro,  $\rho$  la densità dell'Allumina,  $A$  la massa atomica e  $\sigma_{el}(E)$  la sezione d'urto totale elastica calcolata nel paragrafo 3.2 espressa in  $\text{\AA}^2$ . Nota  $\lambda_{el}(E)$  e dato  $RND$  numero casuale distribuito uniformemente tra zero ed uno,  $L$  è dato da:

$$L = -\lambda_{el}(E) \cdot \log(1 - RND) \quad (5.2)$$

---

<sup>1</sup>Ossia localizzata spazialmente.

L'energia persa a seguito di processi anelastici è calcolata alla fine di ogni tratto rettilineo sottraendo all'energia del positrone  $E$  la quantità  $\Delta E$  data da:

$$\Delta E = \frac{dE}{dx}(E) \cdot L \quad (5.3)$$

dove  $dE/dx$  è l'energy stopping power del positrone in Allumina calcolata nel paragrafo 3.3. Oltre al metodo CELA esiste il metodo denominato della *straggling energy* (SE) che utilizza come schema lo stesso algoritmo ma come libero cammino medio si considera la somma dei liberi cammini medi elastici ed anelastici e ad ogni vertice si sottrae o meno al positrone, con una percentuale dettata dalla sezione d'urto totale elastica ed anelastica, una quantità  $\Delta E$  di energia. Questo metodo è quello che, allo stato attuale, ha fornito i risultati migliori ma presuppone la conoscenza della sezione d'urto anelastica. Nel caso dell'Allumina, nel range energetico considerato, tale sezione d'urto non è nota. Il CELA rimane quindi l'unico metodo di simulazione<sup>2</sup> utilizzabile per simulare il rallentamento di positroni in Allumina nel range di energie [20 eV, 5000 eV]. La seconda fase della simulazione consiste nel rallentamento-diffusione dei positroni per energie inferiori ai 30 eV. Convenzionalmente si è posto come cut-off della nostra simulazione l'energia del positrone pari ad 1 eV. In questo caso abbiamo utilizzato il metodo SE. Infatti noti i liberi cammini medi elastici ed anelastici, calcolati nel capitolo 4, è possibile calcolare le relative sezioni d'urto totali. Il moto del positrone procede quindi per tratti rettilinei lunghi un'opportuna frazione del libero cammino medio totale<sup>3</sup>. In ogni vertice si avrà, con una certa percentuale, scattering di tipo elastico ( $\Delta E = 0$ ) od anelastico ( $\Delta E = 0.1$  eV)<sup>4</sup>. La simulazione nell'intero intervallo di energie [1 eV, 5000 eV] termina quando si verifica una delle seguenti situazioni:

1. il positrone si è fermato nel materiale (energia del positrone inferiore al cut-off). In tal caso il positrone delocalizzato sarà destinato ad annichilirsi con gli elettroni del mezzo;
2. il positrone è tornato in superficie. Si parla allora di positroni back-scatterati. Tali positroni saranno oggetto di studio nella terza fase della simulazione.

La simulazione di formazione di positronio in Allumina termina con la terza ed ultima fase in cui si calcola la probabilità di formazione di positronio in funzione dell'energia del fascio incidente. È stato possibile infine calcolare lo spettro energetico e la distribuzione angolare del positronio emesso in funzione dell'energia del fascio incidente. Il listato del programma, sviluppato in linguaggio C per ROOT è riportato in appendice B.

<sup>2</sup>Con i dati sperimentali oggi a disposizione

<sup>3</sup>Somma dei liberi cammini medi elastici ed anelastici

<sup>4</sup>L'unico processo anelastico nel bulk del materiale è la creazione di un fonone LO da parte del positrone incidente

## 5.2 I Risultati della Simulazione Monte Carlo

In questo paragrafo riportiamo i risultati ottenuti dalla simulazione Monte Carlo da noi sviluppata. Tali risultati sono stati ottenuti simulando 1000 positroni ad energie di 100,200,500,1000,2000 e 3000 eV. In figura 5.1 è riportato il profilo di impiantazione<sup>5</sup> dell'Allumina per energie del fascio pari a 3000 eV. La lunghezza media di impiantazione è pari a circa 537 Amstrong.

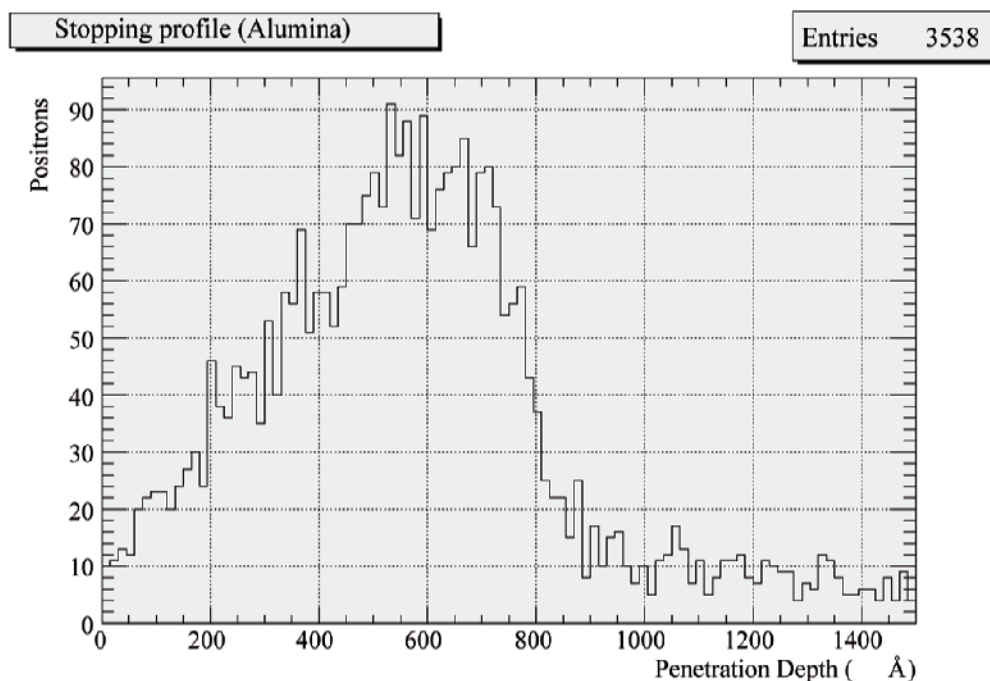


Figura 5.1: Profilo di impiantazione di positroni con energia pari a 3 keV in Allumina.

In figura 5.2 è riportata la distribuzione angolare media del positronio rispetto all'asse  $z$ , ad energia del fascio di 500eV. Tale distribuzione presenta un picco a  $\theta_z = 2.40 \text{ rad}$  pari a circa  $137^\circ$ . Questo significa che gli atomi di positronio escono dal materiale con una direzione preferenziale inclinata di circa  $47^\circ$  rispetto alla superficie della targhetta.

Il raggio della nube di positronio prodotta ha una dimensione che varia da circa 20 Å con positroni di energia 100 eV sino a circa 70 Å con positroni di energia 3000 eV. In figura 5.3 è riportata la distanza di emissione del positronio misurata dal punto di incidenza del fascio di positroni.

<sup>5</sup>Con profilo di impiantazione intendiamo il numero di positroni che si sono fermati nel materiale ad una profondità  $z$  dalla superficie.

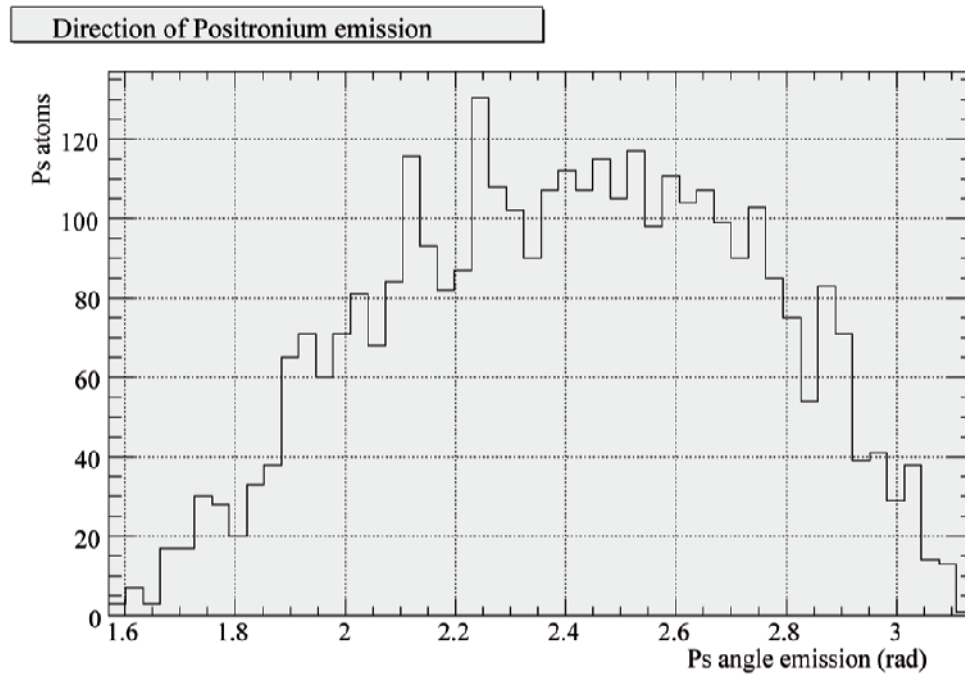


Figura 5.2: Distribuzione angolare (misurata rispetto all'asse  $z$ ) degli atomi di positronio prodotti facendo incidere positroni con energia pari a  $500\text{ eV}$  su Allumina.

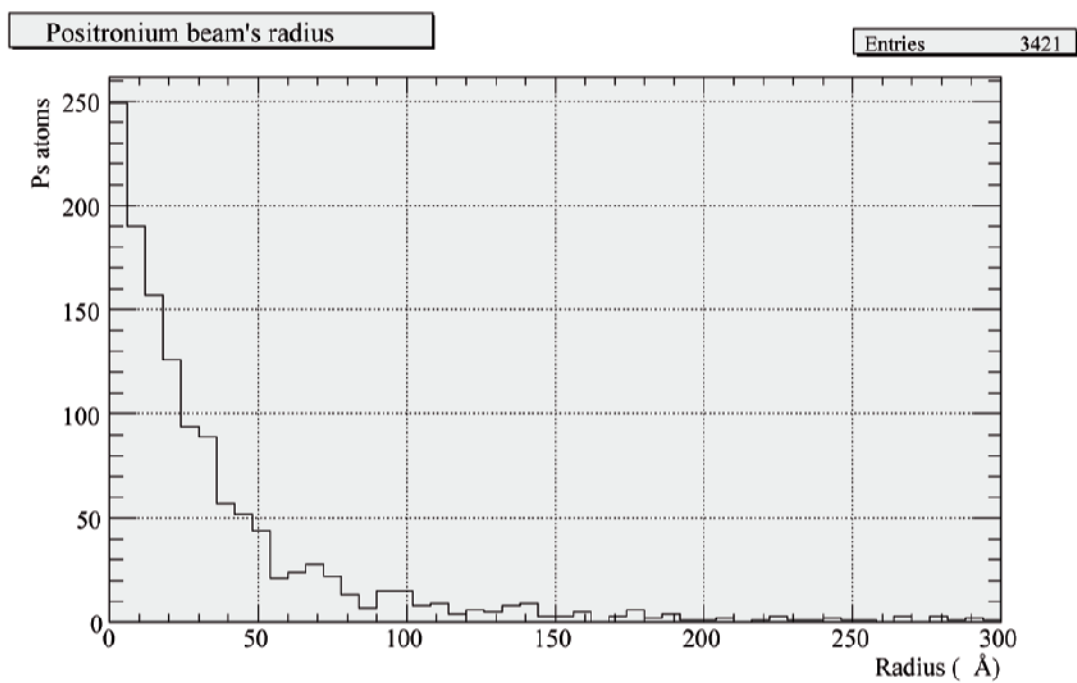


Figura 5.3: Distribuzione della distanza di emissione di positronio da Allumina rispetto al punto di incidenza del fascio di positroni da 500 eV

In figura 5.4 è riportata lo spettro del positronio uscente per energie del fascio pari a 500 eV.

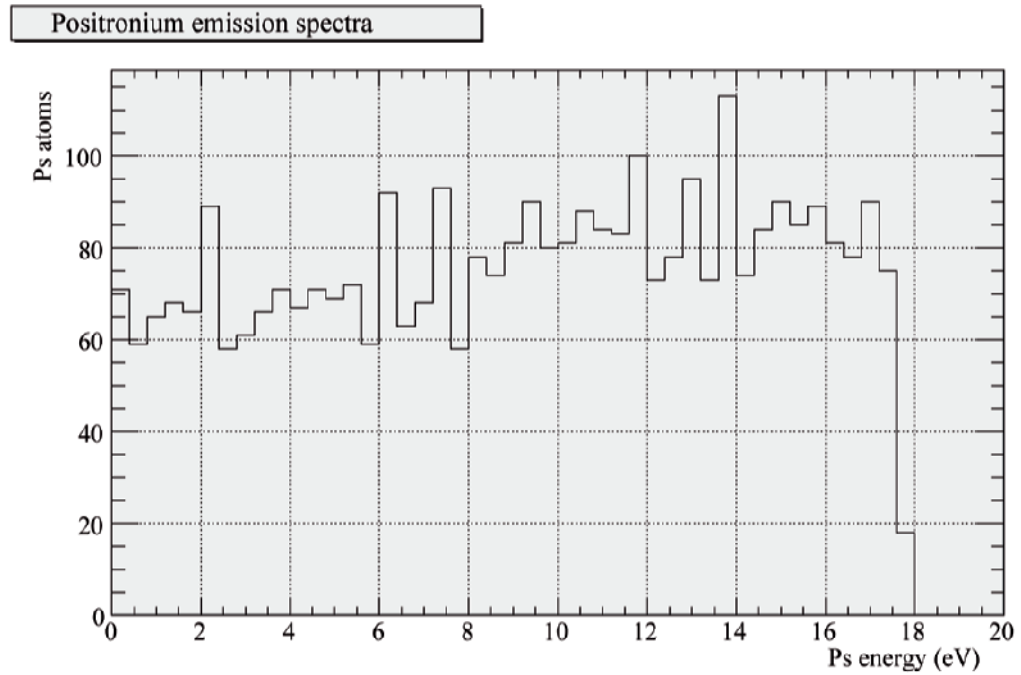


Figura 5.4: Spettro in energia del positronio emesso da Allumina con energia dei positroni incidenti pari a 500 eV.

In tabella 5.1 sono riportati rispettivamente, per valori dell'energia dei positroni incidenti  $E$  pari a 100,200,500,1000,2000 e 3000 eV : il numero  $N_b$  di positroni backscatterati, il numero  $N_{OG}$  di positroni che, una volta raggiunta la superficie hanno energia compresa nell'Öre gap, la probabilità  $P$  che un positrone con energia nell'Öre gap ha di formare positronio, il numero di atomi di positronio prodotto  $N_{Ps}$  ed infine la probabilità di formazione di positronio in Allumina  $P_{Ps}$ . È indicato unicamente l'errore dovuto all'incertezza sul valore della forza lavoro del positronio  $W_{Ps} \simeq -3 \pm 1$ . In figura 5.5 è infine rappresentata la percentuale di formazione di positronio in funzione dell'energia del fascio di positroni incidenti.

### 5.3 Conclusioni

In assenza di dati sperimentali la simulazione Monte Carlo sviluppata in questo lavoro è l'unico mezzo a nostra disposizione per studiare la formazione di positronio in Allumina. I valori numerici assunti da alcuni parametri possono essere ottimizzati da future misure quali la funzione lavoro del posi-

E	N <sub>b</sub>	N <sub>OG</sub>	P	N <sub>Ps</sub>	P <sub>Ps</sub>
100	489	390 <sup>+13</sup> <sub>-12</sub>	0.35 <sup>+0.01</sup> <sub>-0.01</sub>	137 <sup>+5</sup> <sub>-4</sub>	0.137 <sup>+0.005</sup> <sub>-0.004</sub>
200	516	386 <sup>+15</sup> <sub>-18</sub>	0.37 <sup>+0.02</sup> <sub>-0.01</sub>	144 <sup>+6</sup> <sub>-7</sub>	0.144 <sup>+0.006</sup> <sub>-0.007</sub>
500	485	337 <sup>+18</sup> <sub>-13</sub>	0.40 <sup>+0.02</sup> <sub>-0.02</sub>	136 <sup>+7</sup> <sub>-5</sub>	0.136 <sup>+0.007</sup> <sub>-0.005</sub>
1000	461	296 <sup>+21</sup> <sub>-14</sub>	0.44 <sup>+0.02</sup> <sub>-0.03</sub>	129 <sup>+9</sup> <sub>-6</sub>	0.129 <sup>+0.009</sup> <sub>-0.006</sub>
2000	390	238 <sup>+12</sup> <sub>-21</sub>	0.46 <sup>+0.04</sup> <sub>-0.02</sub>	109 <sup>+6</sup> <sub>-10</sub>	0.109 <sup>+0.006</sup> <sub>-0.010</sub>
3000	300	142 <sup>+10</sup> <sub>-11</sub>	0.59 <sup>+0.05</sup> <sub>-0.04</sub>	84 <sup>+6</sup> <sub>-7</sub>	0.084 <sup>+0.006</sup> <sub>-0.007</sub>

Tabella 5.1: Risultati della simulazione dell'interazione di 1000 positroni con un campione di Allumina

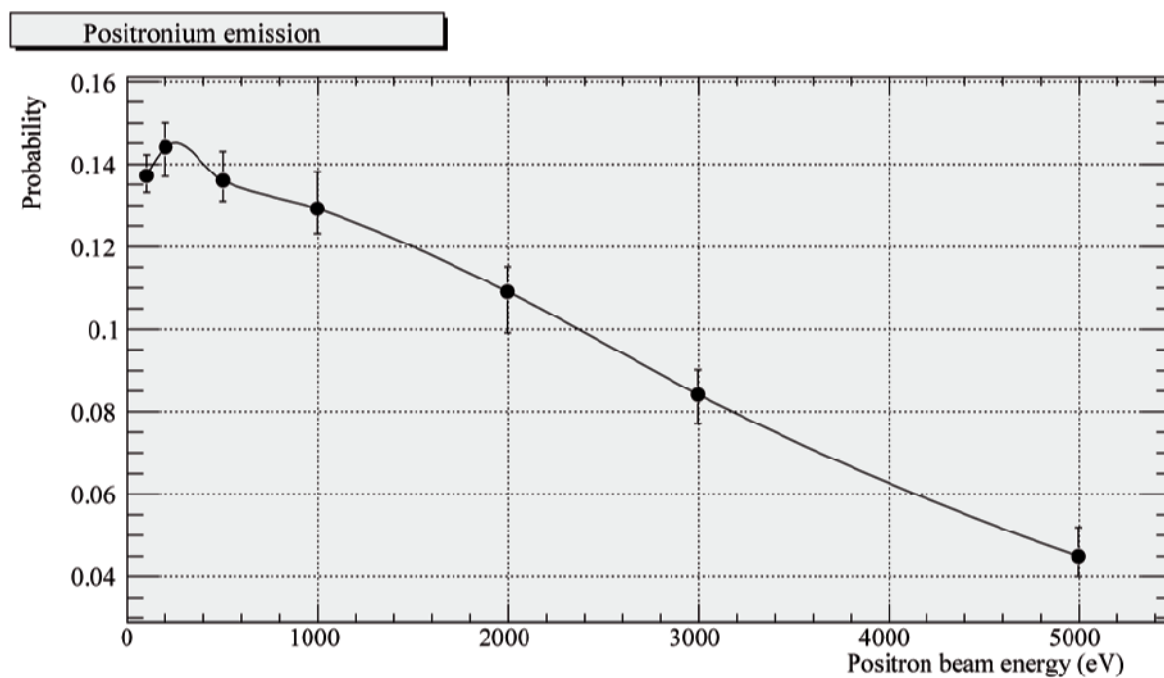


Figura 5.5: Probabilità di formazione di positronio in Allumina in funzione dell'energia del fascio di positroni incidente.

tronio, l'energy-gap e l'energia di legame dell'Allumina. La determinazione di sezioni d'urto per processi anelastici tra cui la formazione di positronio dal punto di vista teorico e/o sperimentale permetteranno di avere simulazioni ben più precise. I dati sperimentali permetteranno inoltre di avere misure dirette dell'angolo medio di emissione di positronio da Allumina in modo da verificare o confutare quanto ottenuto dalla nostra simulazione Monte Carlo. Come mostrato in figura 5.1 i profili di impiantazione di positroni in Allumina non sono del tutto gaussiani, in particolare nella regione di profondità elevate. Tale fatto è imputabile all'utilizzo del metodo CELA invece del ES nella regione di energie intermedie. Data l'impossibilità di utilizzare il metodo ES per Allumina, uno sviluppo futuro della nostra simulazione potrà essere quello di trovare modelli per la determinazione dell'Energy Stopping Power migliori di quello utilizzato nel nostro lavoro. Il limitato numero di eventi simulato è dovuto sostanzialmente alle potenzialità di calcolo richiesta dal programma. Per simulare 1000 eventi con un microprocessore Intel Pentium 4 3.20 GHz sono necessari dai 30 min a 3 h a seconda dell'energia del fascio di positroni considerata. Un futuro sviluppo potrà essere quello di ottimizzare gli algoritmi di calcolo del programma. Una volta migliorata opportunamente la simulazione di formazione di positronio in Allumina, sarà possibile studiare l'eventuale termalizzazione del positronio nelle membrane Whatman.

# Appendice A

## Effetto Pick-off

La vita media dell'ortopositronio in un mezzo materiale poroso è diversa da quella misurata in condizione di vuoto a seguito di un effetto fisico che prende il nome di “effetto pick-off”. Dal punto di vista intuitivo l'effetto pick-off si manifesta nelle cavità (pori o canali) dove il positrone che costituisce l'atomo di ortopositronio ha una probabilità non nulla di scambiare il proprio elettrone con uno di quelli che costituiscono la superficie interna della cavità. In particolare l'effetto di riduzione di vita media è dovuto allo scambio dell'elettrone che costituisce l'atomo di ortopositronio con un elettrone del mezzo di spin opposto. Tale scambio non fa nient'altro che trasformare l'originario atomo di ortopositronio in un atomo di parapositronio. Al fine di quantificare l'effetto pick-off sono stati sviluppati sino ad oggi numerosi modelli fenomenologici di cui alcuni saranno trattati in questa appendice. Il problema dello studio dell'effetto pick-off può essere affrontato sia classicamente che quantisticamente. L'uno o l'altro approccio dipende unicamente dalle dimensioni della cavità considerata. Nel caso in cui il libero cammino medio  $\mathcal{L}$  del positronio all'interno della cavità sia dell'ordine di alcune decine di nanometri allora l'effetto pick-off può essere affrontato classicamente ed il rate  $\lambda^1$  di decadimento dell'ortopositronio sarà dato da<sup>2</sup>:

$$\lambda = \lambda_T + \frac{vP_A}{\mathcal{L}} \quad (\text{A.1})$$

dove  $\lambda_T$  è il rate di decadimento dell'ortopositronio nel vuoto e  $vP_A$  la probabilità di annichilazione per collisione moltiplicata per la velocità termica dell'ortopositronio<sup>3</sup>. Nel caso in cui le dimensioni del poro raggiungono invece valori sub-nanometrici, allora l'ortopositronio avrà lunghezza d'onda di De Broglie superiore alla dimensione del poro e gli effetti quantistici diventano dominanti. Tra i modelli in grado di descrivere l'effetto pick-off in

---

<sup>1</sup>La vita media dell'ortopositronio sarà  $\tau = 1/\lambda$

<sup>2</sup>D.W. Gidley et al., *Phys. Rev. B*, **60** (1999) R5157

<sup>3</sup>Determinata sperimentalmente. Per Silice in polvere vale per esempio  $vP_A = (0.021 \pm 0.002) \text{ nm/s}$ .

questo regime vedremo ora brevemente il modello di Tao-Eldrup<sup>4</sup> e la versione modificata<sup>5</sup> dello stesso. Si consideri quindi il positronio nella cavità come una particella puntiforme, neutra, scalare e di massa  $2m$ . La funzione d'onda dell'ortopositronio descriverà perciò una particella puntiforme in una buca di potenziale sferica a pareti infinite nello stato fondamentale. Nella parte centrale della buca il l'orto-positronio è supposto avere vita media infinita, mentre ad una distanza  $\Delta R$  dalle pareti della buca di potenziale, l'orto-positronio è supposto avere vita media pari alla media sugli spin di quella del positronio nel vuoto, ovvero:

$$\lambda_A = \frac{\lambda_S + 3\lambda_T}{4} \quad (\text{A.2})$$

dove  $\lambda_S$  è il rate di decadimento del parapositronio nel vuoto. Il rate di annichilazione per pick-off nel modello di Tao-Eldrup è ottenuto moltiplicando il quadrato della funzione d'onda compresa nello strato  $\Delta R$  per il rate di decadimento dell'ortopositronio in questa regione  $\lambda_A$ . Altrove, come già affermato consideriamo il positronio stabile. Quindi:

$$\lambda_{TE}(R) = \lambda_A \left[ 1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) \right] \quad (\text{A.3})$$

dove  $R$  è il raggio della sfera (poro). Il modello originale di Tao-Eldrup non è però soddisfacente in quanto non considera la dipendenza dalla temperatura del campione. Per fare questo è necessario calcolare gli stati eccitati nella buca di potenziale. Per fare questo si è pensato di utilizzare una buca di forma rettangolare. Questa assunzione prende il nome di "modello di Tao-Eldrup" modificato. Come si osserverà in seguito la forma del potenziale non influenza sensibilmente l'effetto pick-off: la variabile dominante è la dimensione della cavità. Assumendo inoltre che la vita media dell'ortopositronio nella zona centrale della buca non sia infinita ma pari a quella dell'ortopositronio nel vuoto e che il l'ortopositronio si trovi in equilibrio termico con la cavità si ottiene:

$$\lambda_{RTE} = \lambda_A - \frac{\lambda_S - \lambda_T}{4} F(a, \Delta R, T) F(b, \Delta R, T) (c, \Delta R, T) \quad (\text{A.4})$$

con  $a, b, c$  lati della buca rettangolare, ed

$$F(u, \Delta R, T) = 1 - \frac{2\Delta R}{u} + \frac{\sum_n \frac{1}{n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi\Delta R}{u}\right) e^{-\frac{\beta n^2}{u^2 k T}}}{\sum_n e^{-\frac{\beta n^2}{u^2 k T}}} \quad (\text{A.5})$$

con  $T$  temperatura del campione,  $k$  costante di Boltzman e  $\beta = \hbar^2/16m$ . La figura A.1 mostra il buon accordo dei modelli presentati con i dati sperimentali.

<sup>4</sup>S.J. Tao, *J. Phys. Chem.*, **56** (1972) 5499

<sup>5</sup>T.L. Dull et al., *J. Phys. Chem. B*, **105** (2001) 4657





## Appendice B

# Listato del Programma

```
{
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <iostream>

printf("*****\n");
printf("*           AEGIS/ATHENA           *\n");
printf("* A Monte Carlo Simulation of Positronium *\n");
printf("*           formation in Allumina           *\n");
printf("*                                           *\n");
printf("*      Universita' degli Studi di Milano      *\n");
printf("*           28th September 2007           *\n");
printf("*           datrezzi@libero.it           *\n");
printf("*****\n");

/***** VARIABILI *****/
UInt_t seed; //seme del generatore di numeri casuali
int N = 1000; //NUMERO DI POSITRONI DA SIMULARE
int iN; //contatore elettroni simulare
double xpositron = 0; //coordinata x del positrone
double zpositron = 0; //coordinata z del positrone
double Epositron = 0; //energia del positrone in eV
double mpositron = 511000; //massa del positrone in eV
double thetaz = 0; //angolo del moto del positrone
rispetto all'asse z
double vpositron = 0; //modulo della velocita' del
positrone in c-unit
double vxpositron = 0; //velocita' del positrone lungo
la direzione x in c-unit
double vzpositron = 0; //velocita' del positrone lungo
```

```

la direzione z in c-unit
double elcross = 0; //sezione d'urto totale elastica in
A^2
double ellambda = 0; //libero cammino medio elastico in
A
double NA = 6.0221367 * pow(10,23); //numero di
Avogadro
double rho = 3.97; //densita' del mezzo in g/cm^3
double A = 101.9612; //numero di massa atomica del
mezzo
double aux = 0; //variabile ausiliaria di tipo double
double L = 0; //distanza percorsa tra due vertici in A
double RND = 0; //numero casuale
TRandom Generator; //generatore di numeri casuali
double etaAl = 0; //eta function Alluminio
double etaO = 0; //eta function Ossigeno
double ZA1 = 13; //numero atomico dell'Alluminio
double ZO = 8; //numero atomico dell'Ossigeno
double AA1 = 26; //numero di massa atomica dell'Al
double AO = 16; //numero di massa atomica dell'O
double IstarAl = 0; //energia media di eccitazione
dell'Alluminio
double IstarO = 0; //energia media di eccitazione
dell'Ossigeno
double ZstarAl = 0; //Z efficace Alluminio
double ZstarO = 0; //Z efficace Ossigeno
double zstar = 0; //carica efficace del positrone
double tau = 0; //tau variable
double dEdxAl = 0; //Energy Stopping Power Alluminio
double dEdxO = 0; //Energy Stopping Power Ossigeno
double dEdx = 0; //Energy Stopping Power materiale
double kG = 0.307075; //costante della formula
dell'Energy Stopping Power
double dE = 0; //Energia persa in eV
double iS = 0; //Variabile booleana di positroni
in superficie
double theta = 0; //Angolo polare di scattering
double phi = 0; //Angolo azimutale di scattering
double Gamma = 0; //Gamma function del modello di
Dapor
double EF = 0; //variabile formula fenomenologica
del libero cammino medio
double alpha = 0.1; //costante fenomenologica
double R = 0; //funzione fenomenologica

```

```

double phlambda = 0; //libero cammino medio fononico
double a = 0.5291772108; //raggio di Bohr
double lambda = 0; //libero cammino medio nel range
a basse energie
double Pel = 0; //probabilita' di avere un evento
elastico a basse energie
/*****FILES*****/
FILE *foutput;
foutput = fopen("output.txt", "w");
TFile f("output.root","RECREATE");
/*****HISTOGRAMS*****/
TH1F *hmakov = new TH1F("hmakov","Al203 Makov Profile",
50,0,1500);
TH1F *hEnergy = new TH1F("hEnergy","Energy Spectrum",20,
8,30);
TH1F *hAngle = new TH1F("hAngle","Angle distribution",20,
1.57,3.14);
TH1F *hposition = new TH1F("hposition","Radius",20,0,500);
/*****FUNCTIONS*****/
TF1 *fphonon = new TF1("fphonon","pow(((1/2)*(1/sqrt([0]
*([0]-0.1)))*log((([0]+([0]-0.1)+2*sqrt([0]*([0]-0.1)))/
([0]+([0]-0.1)-2*sqrt([0]*([0]-0.1))))),-1)*(sin(x)/([0]
+([0]-0.1)-(2*sqrt([0]*([0]-0.1))*cos(x))))",0,3.14);
/*****

gRandom.SetSeed(0.);
seed = (int)(gRandom.Rndm()*65539);

for(iN = 0; iN<N; iN++)
{
iS = 0;
seed = (int)(gRandom.Rndm()*65539);
gRandom.SetSeed(seed);
if(iN%10 == 0) printf("Numero positroni simulati: %d
\n",iN);

/**** condizioni prima dell'ingresso nel mezzo ****/
Epositron = 3000; //ENERGIA DEL FASCIO IN eV
xpositron = 0;
zpositron = 0;
thetaz = 0;
theta = 0;
phi = 0;
vpositron = sqrt((2*Epositron)/mpositron);

```

```

/***** ingresso nel mezzo *****/
aux = 0.00354004756176 * pow(log10(Epositron),3) -
0.15500903537724 * pow(log10(Epositron),2) + 0.151015966
31289 * log10(Epositron) + 1.38684873247398;
elcross = pow(10,aux);
ellambda = (pow(10,24)*A)/(NA*rho*elcross);
RND = Generator.Rndm();
L = - ellambda*log(1-RND);
xpositron = xpositron;
zpositron = zpositron + L;
etaA1 = -0.0000004975121 * pow(log(Epositron),6) + 0.0
00484364238 * pow(log(Epositron),5) - 0.0017629640352 *
pow(log(Epositron),4) + 0.0280636098977 * pow(log(Epositro
n),3) - 0.1337781606948 * pow(log(Epositron),2) - 1.132811
0510164 * log(Epositron) + 10.5618761527616;
eta0 = -0.0000005230183 * pow(log(Epositron),6) + 0.00
00488506766 * pow(log(Epositron),5) - 0.0016925222798 * pow
(log(Epositron),4) + 0.0251282035127 * pow(log(Epositron),3)
- 0.0957481285974 * pow(log(Epositron),2) - 1.2267842838730
* log(Epositron) + 9.7288658162983;
IstarA1 = 0.00100255261 * pow(etaA1,6) + 0.00448005165 *
pow(etaA1,5) - 0.50463949950 * pow(etaA1,4) + 5.88949032043 *
pow(etaA1,3) - 24.57941371758 * pow(etaA1,2) + 10.62404002364
* etaA1 + 138.38281591820;
Istar0 = 0.0006036094657 * pow(eta0,6) + 0.0030667115504
* pow(eta0,5) - 0.3132742037651 * pow(eta0,4) + 3.635576723
6746 * pow(eta0,3) - 15.1476905449090 * pow(eta0,2) + 6.5554
441743152 * eta0 + 85.1534928592882;
ZstarA1 = ZA1 * (exp(-etaA1)/2) * (0.00265 * pow(etaA1,5)
+ 0.04321 * pow(etaA1,4) + 0.28 * pow(etaA1,3) + pow(etaA1,2)
+ 2 * etaA1 + 2);
Zstar0 = Z0 * (exp(-eta0)/2) * (0.00265 * pow(eta0,5) +
0.04321 * pow(eta0,4) + 0.28 * pow(eta0,3) + pow(eta0,2) + 2
* eta0 + 2);
zstar = 1 - exp(-2200 * pow(vpositron,1.78));
tau = Epositron / mpositron;
aux = 2 * log(2) - ((vpositron * ((23) + (14/(tau+2)) +
(10/pow((tau+2),2)) + (4/pow((tau+2),3))))/12));
dEdxA1 = kG * (zstar)/(AA1*pow(vpositron,2)) * ZstarA1 *
( log((Epositron)/(IstarA1)) + (1/2)*log(1 + (tau/2)) +
(aux/2) );
dEdx0 = kG * (zstar)/(A0*pow(vpositron,2)) * Zstar0 *
( log((Epositron)/(Istar0)) + (1/2)*log(1 + (tau/2)) +
(aux/2) );

```

```

dEdx = 0.4 * dEdxA1 + 0.6 * dEdx0; //in MeVcm^2/g
dEdx = dEdx * rho; //in MeV/cm
dEdx = dEdx * 0.01; //in eV/A
dE = dEdx * L;
Epositron = Epositron - dE;
while (Epositron > 20)
  if(zpositron < 0)
    {
    if(Epositron < 0){Epositron = 0;}
    iS = 1;
    break;
    }
  else
    {
    /**** high energy positron slowing down *****/
    aux = -0.038107715163505 * pow(log10(Epositron),
3) + 0.253745149023642 * pow(log10(Epositron),2) - 1.282
80040529507 * log10(Epositron) + 0.848916149010504;
    Gamma = pow(10,aux);
    RND = Generator.Rndm();
    theta = acos( 1 - (2*RND*Gamma)/(2+Gamma-(2*
RND)) );
    RND = Generator.Rndm();
    phi = 2 * acos(-1) * RND;
    thetaz = acos(cos(thetaz)*cos(theta) + sin(thetaz)
*sin(theta)*cos(phi));
    vpositron = sqrt((2*Epositron)/mpositron);
    aux = 0.00354004756176 * pow(log10(Epositron),3) -
0.15500903537724 * pow(log10(Epositron),2) + 0.15101596631
289 * log10(Epositron) + 1.38684873247398;
    elcross = pow(10,aux);
    ellambda = (pow(10,24)*A)/(NA*rho*elcross);
    RND = Generator.Rndm();
    L = - ellambda*log(1-RND);
    xpositron = xpositron + L * sin(thetaz) * cos(phi);
    zpositron = zpositron + L * cos(thetaz);
    etaA1 = -0.0000004975121 * pow(log(Epositron),6) +
0.0000484364238 * pow(log(Epositron),5) - 0.0017629640352 *
pow(log(Epositron),4) + 0.0280636098977 * pow(log(Epositron)
,3) - 0.1337781606948 * pow(log(Epositron),2) - 1.132811051
0164 * log(Epositron) + 10.5618761527616;
    eta0 = -0.0000005230183 * pow(log(Epositron),6) +
0.0000488506766 * pow(log(Epositron),5) - 0.0016925222798 *
pow(log(Epositron),4) + 0.0251282035127 * pow(log(Epositron)

```

```

,3) - 0.0957481285974 * pow(log(Epositron),2) - 1.2267842838
730 * log(Epositron) + 9.7288658162983;
    IstarA1 = 0.00100255261 * pow(etaA1,6) + 0.00448005
165 * pow(etaA1,5) - 0.50463949950 * pow(etaA1,4) + 5.889490
32043 * pow(etaA1,3) - 24.57941371758 * pow(etaA1,2) + 10.62
404002364 * etaA1 + 138.38281591820;
    Istar0 = 0.0006036094657 * pow(eta0,6) + 0.00306671
15504 * pow(eta0,5) - 0.3132742037651 * pow(eta0,4) + 3.6355
767236746 * pow(eta0,3) - 15.1476905449090 * pow(eta0,2) +
6.5554441743152 * eta0 + 85.1534928592882;
    ZstarA1 = ZA1 * (exp(-etaA1)/2) *(0.00265 * pow
(etaA1,5) + 0.04321 * pow(etaA1,4) + 0.28 * pow(etaA1,3) +
pow(etaA1,2) + 2 * etaA1 + 2);
    Zstar0 = Z0 * (exp(-eta0)/2) *(0.00265 *
pow(eta0,5) + 0.04321 * pow(eta0,4) + 0.28 * pow(eta0,3) +
pow(eta0,2) + 2 * eta0 + 2);
    zstar = 1 - exp(-2200 * pow(vpositron,1.78));
    tau = Epositron / mpositron;
    aux = 2 * log(2) - ((vpositron * ((23) + (14/(tau
+2))) + (10/pow((tau+2),2)) + (4/pow((tau+2),3)))/12));
    dEdxA1 = kG * (zstar)/(AA1*pow(vpositron,2)) *
ZstarA1 * ( log((Epositron)/(IstarA1)) + (1/2)*log(1 +
(tau/2)) + (aux/2) );
    dEdx0 = kG * (zstar)/(A0*pow(vpositron,2)) * Zstar0
* ( log((Epositron)/(Istar0)) + (1/2)*log(1 + (tau/2)) +
(aux/2) );
    dEdx = 0.4 * dEdxA1 + 0.6 * dEdx0; //in MeVcm^2/g
    dEdx = dEdx * rho; //in MeV/cm
    dEdx = dEdx * 0.01; //in eV/A
    dE = dEdx * L;
    Epositron = Epositron - dE;
}

if(iS != 1)
{
while (Epositron > 1)
if(zpositron < 0)
{
if(Epositron < 0){Epositron = 0;}
iS = 1;
break;
}
else
{

```

```

/***** low energy positron slowing down *****/
fphonon.SetParameter(0,Epositron);
theta = fphonon.GetRandom();
RND = Generator.Rndm();
phi = 2 * acos(-1) * RND;
thetaz = acos(cos(thetaz)*cos(theta) + sin(thetaz)
*sin(theta)*cos(phi));
vpositron = sqrt((2*Epositron)/mpositron);
aux = 0.00354004756176 * pow(log10(Epositron),3)
- 0.15500903537724 * pow(log10(Epositron),2) + 0.1510159663
1289 * log10(Epositron) + 1.38684873247398;
elcross = pow(10,aux);
ellambda = (pow(10,24)*A)/(NA*rho*elcross);
EF = pow((Epositron/10),2)*alpha;
R = (exp(EF) - exp(-EF))/(exp(EF) + exp(-EF));
ellambda = ellambda/R;
phlamba = (1./2.)*((1./3.)-(1./9.))*(1./a)*(0.1/
Epositron);
phlamba = phlamba * log((1+sqrt(1-(0.1/Epositron)))
/(1-sqrt(1-(0.1/Epositron))));
phlamba = 1./phlamba;
lambda = (1./ellambda) + (1./phlamba);
lambda = 1./lambda;
RND = Generator.Rndm();
L = - lambda*log(1-RND);
xpositron = xpositron + L * sin(thetaz) * cos(phi);
zpositron = zpositron + L * cos(thetaz);
ellambda = 1./ellambda;
phlamba = 1./phlamba;
Pel = ellambda /(ellambda + phlamba);
RND = Generator.Rndm();
if(RND <= Pel)
{
Epositron = Epositron;
}
else
{
Epositron = Epositron - 0.1;
}
}
}
if(iS != 1){hmakov.Fill(zpositron);}
if(iS == 1)
{

```

```
        hEnergy.Fill(Epositron);
        hAngle.Fill(thetaz);
        hposition.Fill(xpositron);
        fprintf(foutput,"%lf %lf %lf\n",Epositron,thetaz,xpositron);
    }
}
fclose(foutput);
hEnergy.Write();
hAngle.Write();
hmakov.Write();
}
```