

Charge Transfer and Pair Production in Relativistic Heavy-Ion Collisions

Dissertation zur Erlangung der Doktorwürde, beim
Fachbereich Physik der Freien Universität Berlin
eingereicht im Mai 2001, von

Carl Ludwig Tim Brunne

ERSTER GUTACHTER: PROF. DR. J. EICHLER
HAHN-MEITNER-INSTITUT BERLIN
GLIENICKER STRASSE 100
D-14109 BERLIN
E-MAIL: eichler@hmi.de

ZWEITER GUTACHTER: PROF. DR. V. LINKE
FACHBEREICH PHYSIK
FREIE UNIVERSITÄT BERLIN
ARNIMALLEE 14
D-14195 BERLIN
E-MAIL: linke@physik.fu-berlin.de

TAG DER DISPUTATION: 2. JULI 2001

ADRESSE DES AUTORS: TIM BRUNNE
HAHN-MEITNER-INSTITUT BERLIN
GLIENICKER STRASSE 100
D-14109 BERLIN
E-MAIL: tim@brunne.de

ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Arbeit werden Ladungsaustausch und Elektron-Positron Paarerzeugung in relativistischen Stößen schwerer Ionen theoretisch untersucht. Dabei werden periphere Stöße von Schwerionen betrachtet, auch als atomare Stöße bezeichnet, bei denen die Atomkerne unverändert bleiben. Bei solchen Stößen ist der minimale Kernabstand beim Stoß genügend groß, so daß die starke Wechselwirkung der Kerne untereinander nicht von Bedeutung ist. Der theoretische Zugang beruht auf einer semiklassischen Näherung. Die Bewegung der Atomkerne, welche als klassische Ladungsverteilungen angesehen werden, wird durch relativistische klassische Trajektorien beschrieben, die Dynamik der Elektronen dagegen durch die Quantentheorie. Wir betrachten Stoßsysteme mit Kernladungszahlen zwischen $Z = 66$ und $Z = 92$ bei Stoßenergien von etwa 1 GeV/Nukleon kinetischer Energie im Ruhesystem eines Stoßpartners. Für solche Systeme ist eine relativistische quantentheoretische Beschreibung der Elektronen- und Positronen-Dynamik notwendig und gegeben durch die Zwei-Zentren-Dirac-Gleichung. Experimentell können derartige Stöße untersucht werden seitdem entsprechende Schwerionen und Energien in Beschleunigeranlagen zur Verfügung stehen, wie z.B. in Berkeley seit Mitte der achtziger Jahre.

Die nicht-störungstheoretische Lösung der zeitabhängigen Zwei-Zentren-Dirac-Gleichung ist Hauptgegenstand der vorliegenden Arbeit. Nach einer Einführung in dieses Modell relativistischer atomarer Stöße wird in Kapitel 3 eine relativistische Vielkanal-Streutheorie der Zwei-Zentren-Dirac-Gleichung formuliert und untersucht. Für eine Klasse von Zwei-Zentren-Dirac-Gleichungen mit abgeschirmten Kernladungen werden die asymptotische Konvergenz und die relativistische Invarianz der Anregungs- und Ladungstransfer-Amplituden nachgewiesen.

Zur numerischen Lösung der Gleichung wird die Methode der gekoppelten Kanäle herangezogen (siehe Kapitel 4). Im Vergleich zu früheren numerischen Rechnungen dieser Art erlaubt der für diese Arbeit neu erstellte numerische Code (siehe Anhang A) erstmals die Lösung der gekoppelte-Kanäle-Gleichungen in einer Vielzahl unterschiedlicher Lorentz-Bezugssysteme. Dadurch kann unter anderem erstmals die Verletzung der Lorentz-Invarianz aufgrund des Lösungsansatzes studiert und die Genauigkeit der Ergebnisse beurteilt werden (siehe Kapitel 6). Es zeigt sich durchgehend, daß die Verwendung von sogenannten Coulomb-verzerrten Basisfunktionen die Bezugssystem-Abhängigkeit der numerischen Ergebnisse deutlich vermindert. Eine weitere Neuerung der hier vorgestellten Rechnungen stellt die benutzte gekoppelte-Kanäle-Basis dar. Unterschiedliche Ansätze früherer Arbeiten werden in Form einer bezüglich der Zentren symmetrischen Basis vereinheitlicht, welche gleichzeitig freie Teilchen beschreiben kann.

Es werden numerische Ergebnisse zum relativistischen Elektronentransfer präsentiert. Wir beginnen mit Rechnungen, die publizierte theoretische Resultate zu diesem Prozeß bestätigen. Darüber hinaus wird erstmalig die Ladungszahl- und Stoßenergie-Abhängigkeit des totalen Ladungstransfer-Wirkungsquerschnittes nicht-störungstheoretisch untersucht. Die berechneten Ergebnisse sind in qualitativer Übereinstimmung mit den experimentellen Daten für schwere Stoßsysteme. Sie unterscheiden sich aber deutlich von den entsprechenden parametrischen Abhängigkeiten, wie sie von Störungstheorien für höhere Stoßenergien vorrausgesagt werden.

Desweiteren betrachten wir gebunden-freie Paarerzeugung, d.h. den Prozeß, in dem ein Elektron in einem gebundenen Zustand und ein Positron in einem freien Zustand erzeugt werden. Der Schwerpunkt der Untersuchungen liegt hierbei auf einem qualitativen Verständnis der Verwendung einer bezüglich der Stoßpartner symmetrischen Basis von Positronen-Zuständen. In der Literatur wird bislang ausschließlich eine unsymmetrische Beschreibung verwendet, was numerisch einfacher zu behandeln ist. Darüber hinaus wurde auch für den Paarerzeugungsprozeß erstmals die Abhängigkeit der numerischen Ergebnisse vom Lorentz-Bezugssystem untersucht. Diese Abhängigkeit erwies sich als sehr ausgeprägt. Aufgrund dieser Tatsache ergibt sich ein vorerst uneinheitliches Bild bezüglich der Frage, ob eine symmetrischen Basis zur Beschreibung des Paarerzeugungs-Prozesses bei mittleren relativistischen Stoßenergien notwendig ist. Das ist allerdings der Fall für die numerischen Rechnungen im Collider-System, die nicht nur dadurch ausgezeichnet sind, daß eine Symmetrie der exakten Streutheorie erhalten ist, sondern auch dadurch, daß sie den experimentellen Befunden am nächsten kommen. Schließlich wird durch numerische Rechnungen die Vermutung bestätigt, daß die Abhängigkeit der berechneten Ladungstransfer-Wahrscheinlichkeiten vom Bezugssystem durch die Hinzunahme von Basisfunktionen für freie Teilchen abgeschwächt wird.

SUMMARY

In this thesis, we investigate the processes of charge transfer and electron-positron pair creation in relativistic collisions of heavy ions. Peripheral collisions are considered, also referred to as atomic collisions, in which the atomic nuclei remain intact. In such collisions the closest approach of the nuclei is large enough such that the strong interaction between the nuclei is of no importance. Electromagnetic interactions of the particles prevail. The theoretical treatment is based on a semiclassical model. The movement of the atomic nuclei, that are regarded as classical charge distributions, is described by relativistic classical trajectories, whereas for electrons a description by quantum theory is required. We consider collision systems with nuclear charge numbers ranging between $Z = 66$ and $Z = 92$. Collision energies, given in terms of the total kinetic energy in a rest frame of either nucleus, are in the 1 GeV/nucleon range. In such collision systems the motion of electrons and positrons is relativistic and a suitable description of their dynamics is given by the two-centre Dirac equation. The experimental investigation of these collision systems became feasible by the use of heavy-ion accelerators, beginning in the mid 1980's in Berkeley.

The nonperturbative solution of the time-dependent two-centre Dirac equation is the principal topic of this work. After introducing this model of relativistic atomic collisions, we formulate and investigate analytically a relativistic multi-channel scattering theory in chapter 3. In particular, asymptotic convergence and relativistic invariance are shown for a class of two-centre Dirac equations with screened nuclear charges.

For the numerical solution of the Dirac equation we use the coupled channel method (see chapter 4). Contrary to similar calculations reported in the literature,

the numerical code newly written for this work (see chapter A) allows for the solution of the coupled channel equations in various different Lorentz frames. Hence, the violation of Lorentz invariance, owing to the coupled channel approximation, can be investigated quantitatively for the first time, thereby allowing for the estimation of the accuracy of relativistic coupled channel calculations (see chapter 6). Generally, we find that the frame dependence of the numerical results is less pronounced if so-called phase-distorted basis functions are used. Another innovation of the present calculations is the type of coupled channel basis used. Different approaches of previously reported calculations are combined to a unified treatment, namely a basis which is symmetric with respect to the centres and which is capable of describing free particles at the same time.

We present numerical results for relativistic electron transfer, beginning with calculations which reproduce previously published theoretical data. For the first time, the parametric dependencies of the charge transfer process on the charge numbers of the nuclei and the collision energy are investigated using a nonperturbative method. The results are in qualitative agreement with experimental measurements for heavy collision systems. However, they are distinctly different from the parametric dependencies obtained by most perturbative calculations for higher collision energies.

Furthermore, we consider the process of bound-free pair production, in which a free positron and a bound electron are created. The emphasis of the theoretical studies is on a qualitative understanding of the importance of a symmetrical basis of positron states for the description of this process at intermediate relativistic collision energies. In the literature only asymmetrical approaches are used, which are computationally less demanding. Furthermore, we investigate the Lorentz frame dependence of the numerical calculations for the pair creation process, which has likewise not been considered before. Owing to the pronounced frame dependence found, the necessity of a symmetrical basis for the description of the pair creation process cannot be assessed unambiguously. However, a symmetrical basis is important in calculations in the collider frame, which not only preserve a symmetry of the exact scattering theory, but are closest to the experimental findings as well. Finally, we confirm the conjecture that the addition of free-particle states to a coupled channel basis of bound states reduces the frame dependence of numerical results for the charge transfer process.

CONTENTS

Chapter 1. Introduction	1
1.1. Relativistic ion-atom collisions	1
1.2. Survey of experiments	3
1.3. General theoretical approach	5
1.4. Aim and context	8
1.5. Outline of this work	11
Chapter 2. Semiclassical Approximation	13
2.1. Relativistic kinematics	13
2.2. Static charge distributions	15
2.3. Two-centre Dirac equation	17
2.4. Symmetry	17
2.5. Homonuclear collisions	21
Chapter 3. Multi-Channel Scattering Theory	23
3.1. Scattering channels	23
3.2. Transition amplitudes	25
3.3. Asymptotic convergence	26
3.4. Asymptotic orthogonality	29
3.5. Relativistic invariance	31
3.6. Remarks	34
3.7. Coulomb boundary conditions	37
Chapter 4. Coupled Channel Approximation	41
4.1. Coupled channel equations for the semiclassical approximation	41
4.2. Fundamental solution and asymptotic unitarity	42
4.3. Approximate transition amplitudes	45
Chapter 5. Implementation of the Coupled Channel Approximation	47
5.1. Reference frames	47
5.2. Spherical symmetry	49
5.3. Basis functions	50
5.4. Numerical tests	54
5.5. Free-particle basis functions	59
Chapter 6. Numerical Results and Discussion	65
6.1. Charge transfer	65
6.2. Collision-energy dependence of capture	69
6.3. Charge-number dependence of capture	75
6.4. Frame dependence	81
6.5. Coulomb boundary conditions	83
6.6. Bound-free pair creation	86
6.7. Free-particle channels and charge transfer	95
Appendix A. Numerical and Algorithmic Details	99

A.1. General definitions	99
A.2. Basis functions	101
A.3. Quadrature formulas	104
A.4. Integration of the coupled channel equations	109
A.5. Distributed computations	110
Appendix B. Mathematical Supplement	113
B.1. Spreading of regular wave packets	113
B.2. Lorentz invariance of the scalar product	114
B.3. Transformations of eigenstates	117
Appendix C. Units, Notation, and Other Conventions	121
C.1. System of units and physical constants	121
C.2. Dirac matrices and discrete symmetry transformations	122
C.3. Symbols and Notation	123
Appendix. Bibliography	127