

روش جفت‌شدگی نزدیک دومرکزی در فرآیند انتقال بار

رضا باقری و فریده شجاعی

دانشکده فیزیک دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۹/۱۵؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۵/۵/۱۶)

چکیده

در کار حاضر عناصر ماتریس گذار، سطح مقطع دیفرانسیلی و کل پراکندگی مربوط به تشکیل پوزیترونیم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و همچنین تشکیل هیدروژن در برخورد پوزیترونیم با یون اتم هیدروژن، در کانال انتقال بار توسط روش جفت‌شدگی نزدیک دومرکزی تا تقریب مرتبه اول محاسبه شده‌اند. مسئله به صورت سه جسمی و پرتابه توسط موج تخت در نظر گرفته شده همچنین حالات هیدروژن و پوزیترونیم پایه فرض شده‌است. در مسئله پراکندگی پوزیترون توسط اتم هیدروژن نمودار سطح مقطع دیفرانسیلی بر حسب انرژی در دامنه $10\text{keV} - 50\text{eV}$ ترسیم شده و قله توماس در این دامنه به خوبی قابل تشخیص است، در نهایت سطح مقطع کل پراکندگی مربوط به هر دو مسئله پوزیترون-هیدروژن و پوزیترونیم-یون هیدروژن، بر حسب انرژی‌های مختلف ترسیم و با سایر روش‌های مربوط به کانال انتقال بار مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: جفت‌شدگی دومرکزی، ربایش الکترون، قله توماس، ماتریس گذار، سطح مقطع پراکندگی

۱. مقدمه

پراکندگی از مهمترین مسائل در فیزیک به خصوص فیزیک مربوط به ساختار کوانتومی و میکروسکوپی است، با پیشرفت فیزیک جدید به همراه مکانیک کوانتومی شناخت گسترده‌ای در زمینه‌هایی چون برهم‌کنش ذرات با یکدیگر، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی مؤثر بین آنها، اسپین ذرات، بقای انرژی، اندازه حرکت خطی و زاویه‌ای برای ساختارهای کوانتومی حاصل شده است و درک بهتری از سینماتیک پراکندگی چه به صورت نسبی و غیر نسبی و توجیه دینامیک برخورد در طول فرآیند امکان‌پذیر گردیده است. این پیشرفت‌ها مختص به

دیدگاه نظری نبوده و در روش‌های تجربی نیز موجب تکمیل

شناخت بشر از طبیعت شده است.

پس از کشف پرتوی ایکس در سال ۱۸۹۵ توسط رونتگن^۱، پراکندگی ذرات مادی و امواج الکترومغناطیسی توسط هدف‌های مختلف به عنوان ابزاری برای شناخت بیشتر طبیعت به کار گرفته شدند. پدیده‌هایی همانند فوتوالکتریک (هرتز^۲ ۱۸۸۷) و اثر کامپتون^۳ (۱۹۲۷) در بنیاد نهادن و توسعه نظریه فیزیک کوانتومی نقش بزرگی را ایفا نمودند. همچنین می‌توان به

۱. Wilhelm Conrad Röntgen

۲. Heinrich Rudolf Hertz

۳. Arthur Holly Compton

است متناسب با انرژی برخورد، انتقال بار، یونش^۵، شکافت و ... صورت گیرد.

پنج سازوکار برای ربایش الکترون وجود دارد که دو مورد رودرو و تابشی سازوکارهایی یگانه بوده و سه سازوکار دوگانه مربوط به توماس می‌باشد، اولین بار توماس این موضوع را در سال ۱۹۲۷ دریافت و متوجه شد که انتقال جرم تنها زمانی رخ می‌دهد که حداقل سه جسم موجود باشد [۳]. ساده‌ترین فرآیند مجاز برای انتقال جرم یک فرآیند دو مرحله‌ای است که فرآیند متعارف توماس نامیده می‌شود.

در محاسبات این مقاله از روش جفت‌شدگی دومرکزی^۶ استفاده شده است. روش مذکور شباهت‌های زیادی با روش جفت‌شدگی نزدیک همگرا^۷ دارد. در این روش نیز مسئله به صورت سه جسمی بررسی شده و از پایه‌های لگر برای قطری‌سازی هامیلتونی استفاده می‌شود با این تفاوت که در جفت‌شدگی نزدیک دومرکزی دیگر همگرایی در کار نبوده و به تعداد محدودی پایه در بسط بسنده می‌شود افزایش تعداد پایه‌ها از یک مقدار خاص به بعد تأثیر چشمگیری ندارد. همچنین علاوه بر بسط حالت هدف، حالت نهایی را هم توسط پایه‌های لگر بسط می‌دهند بنابراین تابع حالت کلی دستگاه توسط حالات ابتدایی و نهایی که خود با پایه‌های لگر نشان داده شده‌اند بسط داده می‌شود.

در طی سال‌های ۱۹۹۷-۱۹۹۰ محاسبات مربوط به جفت‌شدگی نزدیک دومرکزی پیشرفت‌های چشمگیری داشت [۴ و ۵]. هیگنز^۸ و بورک^۹ در سال ۱۹۹۱ از مدل (۱۰۱) CC برای محاسبه پراکندگی اتم هیدروژن توسط پوزیترون استفاده کردند [۶]. در اینجا نماد $CC(N, N')$ نمایانگر روش جفت‌شدگی نزدیک دومرکزی است که در آن حالت ابتدایی (یا نهایی) مربوط به اتم هیدروژن (یا پوزیترون) توسط N (یا N') پایه لگر بسط داده شده است. روش CCC نسبت به

آزمایش رادرفورد^۱ در سال ۱۹۱۱ و چادویک^۲ [۱] در سال ۱۹۳۲ اشاره کرد که به ترتیب به کشف هسته اتم و نوترون منجر شدند.

نتایج آزمایشات پراکندگی در مورد شناخت، بررسی خواص و برهم‌کنش‌های موجود میان ساختار هسته‌ها، اتم‌ها، مولکول‌ها و ذرات بنیادی کاربرد وسیعی دارد. کانال ابتدایی اجزای تشکیل دهنده برخورد و کانال نهایی آنچه که بعد از برخورد حاصل می‌شود را شامل می‌شوند، در کانال ابتدایی اگر به صورت نمادین پرتابه، A و هدف، B در نظر گرفته شوند یکی از حالات

$$A + B \rightarrow A + B \quad (1)$$

$$A + B \rightarrow \begin{cases} A^* + B \\ A + B^* \\ A^* + B^* \end{cases} \quad (2)$$

یا

$$A + B \rightarrow C + D + \dots \quad (3)$$

در کانال نهایی رخ خواهد داد [۲]. در رابطه (۱) که نمایشگر یک برخورد کشسان می‌باشد، مجموع انرژی جنبشی در کانال ابتدایی با مقدار آن در کانال نهایی برابر است. در برخورد کشسان انرژی جنبشی بقاء خواهد داشت و در کانال نهایی همان اجزای کانال ابتدایی موجودند با این تفاوت که برخورد صورت گرفته و تغییر در تکانه (مقدار و جهت تکانه) مشاهده می‌شود. رابطه (۲) مربوط به تهییج است. برانگیختگی ممکن است برای پرتابه، هدف و حتی هردوی آنها اتفاق بیفتد. فرآیند تهییج ناکشسان بوده و می‌توان سهم تفاوت انرژی قبل و بعد از برخورد را به انرژی لازم به برانگیختگی نسبت داد.

فرآیندی که در این مقاله به بررسی آن پرداخته می‌شود انتقال بار^۳ یا دوباره بازچینی است که جزء فرآیند واکنش^۴ محسوب می‌شود (رابطه (۳)). فرآیند واکنش کمی از دو حالت بالا کلی‌تر است. در این فرآیند ماهیت و ساختار اجزای تشکیل دهنده کانال ابتدایی تغییر می‌کند و می‌توان گفت که یک واکنش رخ داده است. در کانال نهایی می‌توان اجزایی متفاوت با آنچه قبل از برخورد وجود داشته است مشاهده کرد. به عنوان مثال ممکن

۵. Ionization

۶. Two-center close-coupling

۷. Convergent close-coupling

۸. Higgins

۹. Burke

۱. Ernest Rutherford

۲. Sir James Chadwick

۳. Charge transfer

۴. Reaction

و

$$\xi_{kl}(r) = \left(\frac{\lambda_l (k-1)!}{(\nu l + l + k)!} \right)^{\frac{1}{2}} \times (\lambda_l r)^{l+1} \exp(-\lambda_l r / \nu) L_{k-1}^{\nu l + \nu}(\lambda_l r), \quad (7)$$

خواهند بود [۸ و ۹]. در رابطه (۷)، $L_{k-1}^{\nu l + \nu}(\lambda_l r)$ معرف پایه لگر بوده و N_l تعداد پایه‌های به کار رفته در بسط رابطه (۶) است که بنابر مقدار تکانه زاویه‌ای l متفاوت خواهد بود. معادله شرودینگر برای تابع حالت کلی دستگاه به صورت

$$(E^{(+)} - H) |\Psi\rangle = 0, \quad (8)$$

خواهد بود که H هامیلتونی و $E^{(+)}$ انرژی کل دستگاه است. علامت + معرف موج تخت ورودی و متعاقباً موج پراکنده شده خروجی است. بر اساس این واقعیت که تابع حالت نهایی چگونه باشد می‌توان معادله ویژه مقداری (۸) را با استفاده از رابطه (۴) به صورت

$$\left\langle \Psi_{\gamma'} \left| (E^{(+)} - H) \left| \sum_{\gamma} F_{\gamma} \Psi_{\gamma} \right. \right. \right\rangle = 0, \quad (9)$$

نمایش داد که شاخص γ می‌تواند به هرکدام از حالات α و β تعلق داشته باشد. با در نظر گرفتن شاخص‌های γ و γ' تحت عنوان کانال ابتدایی و نهایی در رابطه (۹) می‌توان به معادله انتگرالی لیپمن شونینگر

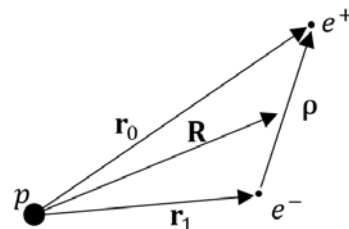
$$T_{\gamma', \gamma}(k_{\gamma'}, k_{\gamma}) = V_{\gamma', \gamma}(k_{\gamma'}, k_{\gamma}) + \sum_{\gamma''}^{N_{\alpha} + N_{\beta}} \int \frac{dk_{\gamma''}}{(\nu \pi)^{\nu}} \times V_{\gamma', \gamma''}(k_{\gamma'}, k_{\gamma''}) G_{\gamma''}(k_{\gamma''}) T_{\gamma'', \gamma}(k_{\gamma'', k_{\gamma}}), \quad (10)$$

دست یافت. باید متذکر این موضوع شد که در رابطه (۱۰) مسئله به حالت دوجسمی تقلیل یافته و جسم سوم به عنوان ذره آزاد به صورت موج تخت نمایش داده خواهد شد

$$G_{\gamma''}(k_{\gamma''}) = (\mathbf{k}), \quad \text{تابع گرین آزاد دوجسمی به صورت}$$

$$G_{\gamma''}(k_{\gamma''}) = (E + i0 - k_{\gamma''}^2 / \nu - \varepsilon_{\gamma''})^{-1} \quad (11)$$

معرفی می‌شود، در اینجا $\nu_{\gamma''}$ معرف جرم کاهیده در کانال ابتدایی (یا نهایی) بوده و $\varepsilon_{\gamma''}$ برابر با انرژی اتم هیدروژن (یا پوزیترونوم) می‌باشد. در این مقاله تنها جمله اول رابطه (۱۰) در نظر گرفته شده است به همین دلیل این روش تحت عنوان



شکل ۱. مختصات هندسی مکان پوزیترون (e^+) و الکترون (e^-) نسبت به پروتون (p).

روش CC که تعداد پایه‌ها در آن محدود است و ممکن است همگرایی مطلوبی صورت نگیرد، از دقت بالاتری برخوردار است. با این وجود در روش CCC به علت این که در بسط تابع حالت کلی دستگاه تنها از یک مرکز (حالات هدف) استفاده می‌شود کلیت کافی نداشته و همواره روش دومرکزی از روش تک مرکز عمومیت بیشتری به دلیل استفاده از دو مرکز متفاوت، دارد.

۲. نظریه

همان طور که گفته شد تابع حالت کلی را می‌توان به صورت مجموعی از دو بسط متشکل از حالات در کانال ابتدایی (α) و نهایی (β) به صورت

$$\Psi \approx \sum_{\alpha}^{N_{\alpha}} F_{\alpha}(r_i) \Psi_{\alpha}^{N_{\alpha}}(r_i) + \sum_{\beta}^{N_{\beta}} F_{\beta}(R) \Psi_{\beta}^{N_{\beta}}(\rho), \quad (4)$$

نمایش داد، در این رابطه F_i تابع وزنی و $\Psi_i^{N_i}$ توابع حالت مربوط به کانال مربوطه خود می‌باشند [۷]، در شکل ۱ مختصات هندسی مسئله ترسیم و مبدأ مختصات به علت جرم زیاد پروتون نسبت به الکترون و پوزیترون در مکان فرضی پروتون در نظر گرفته شده است.

هرکدام از توابع حالات هیدروژن و پوزیترونوم با استفاده از رابطه:

$$\langle r | i^{N_l} \rangle = r^{-1} \varphi_{nl}^{N_l}(r) Y_{lm}(\hat{r}), \quad (5)$$

قابل حصول بوده که

$$\varphi_{nl}^{N_l}(r) = \sum_{k=1}^{N_l} C_{nk}^l \xi_{kl}(r) \quad (6)$$

گذار مستقیم Ps-Ps

$$I_3 = \langle k'_f \left| \left\langle \Psi_{n_\beta, l_\beta, m_\beta} \right| \frac{Z'}{|R+(\rho/\gamma)|} - \frac{Z'}{|R-(\rho/\gamma)|} \right| \Psi_{n_\beta, l_\beta, m_\beta} \right\rangle |k_f \rangle \quad (18)$$

جمله I_3 حاصل برهم‌کنش‌ها در کانال نهایی است که میان حالات Ps و امواج تخت با اندازه حرکت نسبی k'_f و k_f محاسبه می‌شود، حاصل ضرب جرم کاهیده v_f در سرعت ابتدایی و نهایی به ترتیب k'_f و k_f را نتیجه خواهد داد. همان‌طور که از رابطه (۱۸) مشخص است گذار مطرح در این قسمت دارای تقارن خاصی است، برای درک بهتر ماهیت این گذار می‌توان این‌گونه تصور کرد که در کانال نهایی پوزیترونیم تشکیل شده است ولی هنوز به اندازه کافی از باقیمانده هدف (H^+) دور نشده است، بنابراین برهم‌کنش‌های موجود در این حالت شامل $H^+ - e^-$ و $H^+ - e^+$ خواهد بود در حالت حدی فاصله میان پوزیترون و الکترون نسبت به فاصله آنها تا H^+ خیلی کم است بنابراین H^+ بر اساس بار هرکدام از این دو یکی را جذب و دیگری را دفع می‌کند و در نهایت این دو برهم‌کنش یکدیگر را خنثی می‌کنند. البته باید متذکر این موضوع شد که این نتیجه مربوط به حالت $1s \rightarrow 1s$ است و I_3 در مراتب بالاتر مقدار خواهد داشت.

بازچینی پتانسیل مؤثر این قسمت $V_{\beta, \alpha}$ ، حاصل محاسبه کل برهم‌کنش‌ها در میان کانال ابتدایی و نهایی است، کانال ابتدایی شامل یک موج تخت فرودی (پوزیترون) و اتم هیدروژن پایه بوده و همچنین کانال نهایی از موج تخت خروجی (H^+) و پوزیترونیم تشکیل شده است.

$$V_{\beta, \alpha} = \langle k'_f \left| \left\langle \Psi_{n_\beta, l_\beta, m_\beta} \right| \frac{H_i}{\frac{\nabla_0^2}{I_4} - \frac{\nabla_1^2}{I_5} + \frac{Z'}{I_6} - \frac{Z}{I_7} - \frac{1}{|r_0 - r_1|} - \frac{E}{I_8}} \right| \Psi_{n_\alpha, l_\alpha, m_\alpha} \right\rangle |k_i \rangle \quad (19)$$

تابع حالات هیدروژن و پوزیترونیم بکار رفته در رابطه (۱۹) قبلاً معرفی شده‌اند (روابط (۵) تا (۷))، همچنین k'_f و k_f مشابه آنچه در گذارهای مستقیم بیان شد به دست می‌آیند.

تقریب مرتبه اول خطاب می‌شود.

در محاسبه پارامترهای ماتریس گذار T ، چهار جمله برهم‌کنشی به نام‌های $U_{\alpha, \beta}$ و $U_{\beta, \alpha}$ ، $U_{\beta, \beta}$ ، $U_{\alpha, \alpha}$ وجود دارد که دو جمله اول مربوط به گذار مستقیم^۱ بوده و دو جمله باقیمانده گذارهای بازچینی^۲ را عنوان می‌کنند.

$$U_{\alpha, \alpha} = \frac{Z'}{r_0} - \frac{1}{r_1} \quad (20)$$

$$U_{\beta, \beta} = \frac{Z'}{|R+(\rho/\gamma)|} - \frac{Z'}{|R-(\rho/\gamma)|} \quad (21)$$

$$U_{\beta, \alpha} = U_{\alpha, \beta} = H - E \quad (22)$$

که H هامیلتونی و E انرژی دستگاه بوده و Z' بار مؤثر هسته به صورت

$$Z' = Z - \lambda_i \quad (23)$$

محاسبه می‌شود که در آن λ_i ضریب پوشانندگی است و برای حالات مختلف مقادیر متفاوتی دارد، با توجه به این که محاسبات در حالت $1s \rightarrow 1s$ در نظر گرفته شده است $Z' = 0.69$ خواهد بود. برای محاسبه هریک از پتانسیل‌های مؤثر که ناشی از چهار برهم‌کنش معرفی شده در روابط (۱۲) تا (۱۴) است، می‌توان از رابطه

$$V_{\gamma', \gamma} (k_{\gamma'}, k_\gamma) = \langle k_{\gamma'} \left| \left\langle \Psi_{\gamma'} \right| U_{\gamma', \gamma} \right| \Psi_{\gamma} \right\rangle |k_\gamma \rangle \quad (24)$$

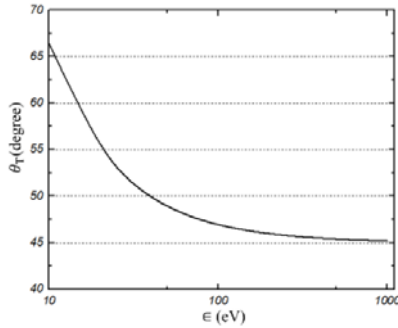
استفاده نمود، در این رابطه $k_{\gamma'}$ و k_γ به ترتیب بیانگر امواج تخت در کانال‌های γ و γ' می‌باشند و از آنها تحت عنوان اندازه حرکت نسبی یاد می‌شود که از نظر مقداری برابر حاصل ضرب جرم کاهیده (v_i یا v_f) در سرعت (V_i یا V_f) هستند.

گذار مستقیم اتم-اتم: این گذار دارای دو جمله است، این جملات به ترتیب ناشی از پتانسیل مؤثر پوزیترون-اتم و پوزیترون-الکترون بوده و با نام‌های I_4 و I_5 نمایش داده شده‌اند. I_4 و I_5 در میان حالات هیدروژن و امواج تخت متشکل از حاصل ضرب جرم کاهیده v_i در سرعت ابتدایی (نهایی) محاسبه می‌شوند.

$$V_{\alpha, \alpha} = \langle k'_i \left| \left\langle \Psi_{n'_\alpha, l'_\alpha, m'_\alpha} \right| \frac{Z'}{r_0} - \frac{1}{r_1} \right| \Psi_{n_\alpha, l_\alpha, m_\alpha} \right\rangle |k_i \rangle \quad (25)$$

۱. Direct transition

۲. Rearrangement



شکل ۳. ترسیم زاویه توماس بر حسب انرژی پرتابه در کانال ورودی در گذار بازچینی $e^+ - H$.

به دست خواهد آمد

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (22)$$

رابطه (۲۲) در مختصات مرکز جرم نوشته شده‌است، برای مقایسه نتایج با موارد تجربی نیاز است که در دستگاه آزمایشگاهی بازنویسی شود بنابراین سطح مقطع دیفرانسیلی در مختصات مرکز جرم توسط رابطه

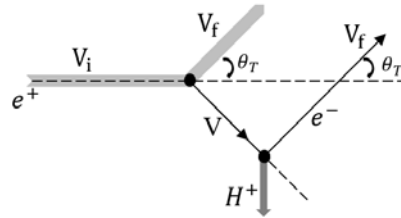
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Lab}} = \frac{(1 + \tau^2 + 2\tau \cos\theta)^{3/2}}{(1 + \tau \cos\theta)} \frac{d\sigma}{d\Omega}_{\text{C.M.}} \quad (23)$$

$$\tau = \frac{m_{e^+}}{m_H}$$

به مختصات آزمایشگاهی تبدیل می‌شود که انتگرال‌گیری از آن منجر به سطح مقطع کل در دستگاه آزمایشگاهی می‌شود.

زاویه توماس: در این زاویه به علت پراکندگی دوگانه‌ای که اتفاق می‌افتد سطح مقطع دیفرانسیلی بهینه شده و موجب می‌شود یک قله در نمودارها دیده شود. این زاویه بر حسب جرم و انرژی پرتابه و هدف مقادیر مختلفی دارد که البته با افزایش انرژی به یک زاویه خاص همگرا شده و پس از آن وابستگی خاصی به انرژی نخواهد داشت.

مطابق فرآیند متعارف توماس حالتی در نظر گرفته شود که پوزیترون به عنوان پرتابه ابتدا به الکترون فعال برخورد کرده و تحت زاویه θ_T منحرف می‌شود، در ادامه الکترون به هسته برخورد می‌کند و آن هم تحت همان زاویه منحرف می‌شود. درنهایت این دو الکترون و پوزیترون یکدیگر را جذب کرده و



شکل ۲. نمایش سازوکار متعارف ربایش بار توماس در گذار بازچینی $e^+ - H$ ، فرض شده است که سرعت پوزیترون منحرف شده با سرعت پوزیترونیم تشکیل شده برابر است، جرم واسط الکترون است.

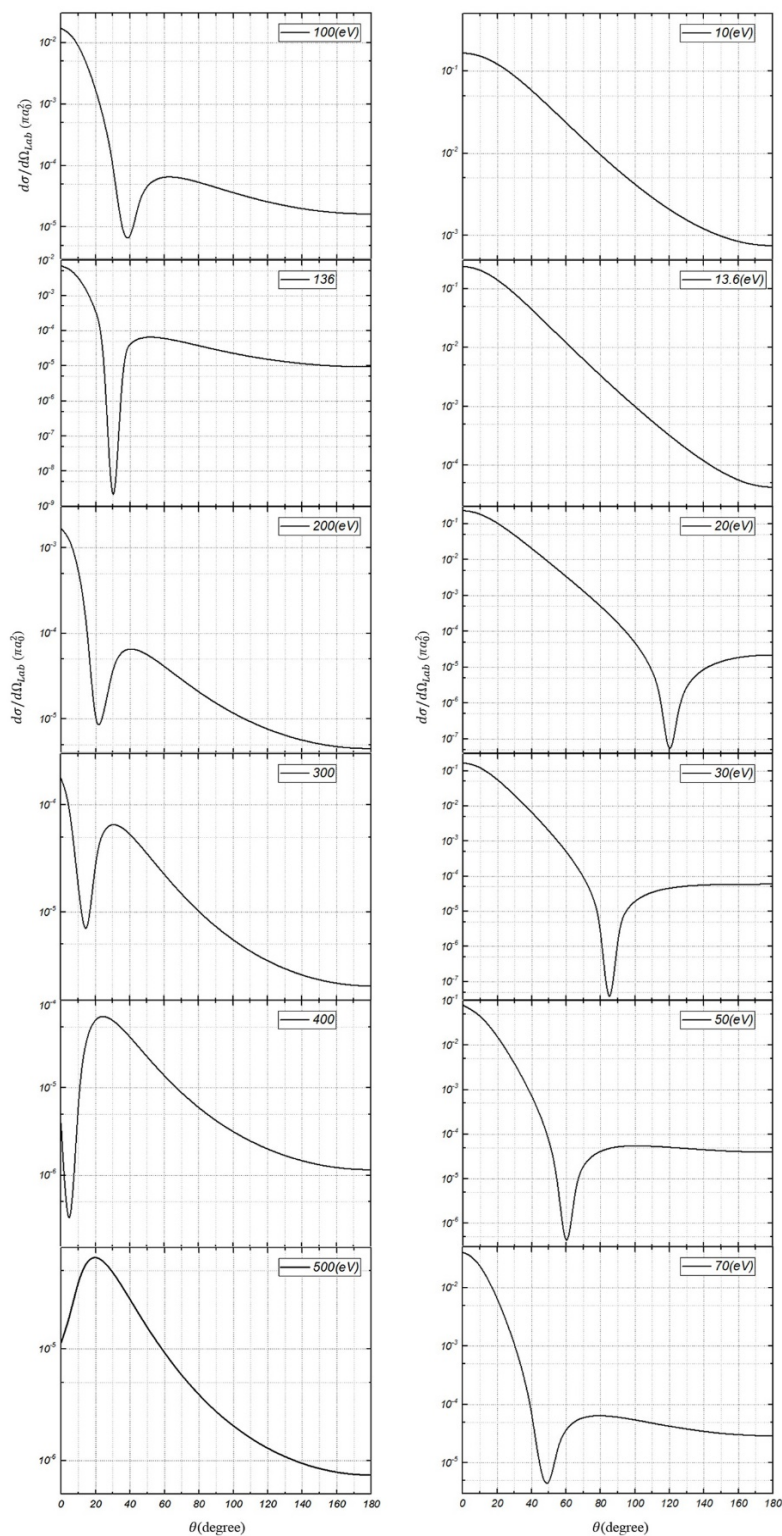
بازچینی جملات برهم‌کنشی $V_{\alpha,\beta}$ مربوط به این بازچینی دقیقاً با جملات بازچینی $V_{\beta,\alpha}$ برابر است، تفاوتی که میان پتانسیل‌های مؤثر این دو بازچینی وجود دارد ناشی از جابه‌جا شدن کانال‌های ابتدایی و نهایی در این دو بازچینی است. در این بازچینی کانال ابتدایی متشکل از پوزیترونیم و H^+ فرودی است همچنین در کانال نهایی اتم پایه هیدروژن و پوزیترونی که به صورت موج تخت دور می‌شود به چشم می‌خورند. به دلیل شباهت‌های فراوان میان جملات دو بازچینی $V_{\beta,\alpha}$ و $V_{\alpha,\beta}$ دامنه‌های گذار در این مورد با علامت پریم نمایش داده شده‌اند

$$V_{\alpha,\beta} = \langle k_i | \langle \Psi_{n_a, l_a, m_a} | \frac{H_f}{\underbrace{\left[\frac{\nabla_R^2}{I'_R} - \frac{\nabla_\rho^2}{I'_\rho} + \frac{Z'}{[R + (\rho/\tau)]} - \frac{Z'}{[R - (\rho/\tau)]} - \frac{1}{I'_\alpha} - \frac{E}{I'_\alpha} \right]} | \Psi_{n'_\beta, l'_\beta, m'_\beta} \rangle | k'_f \rangle \quad (20)$$

برای هریک از چهار گذار مطرح شده امکان محاسبه سطح مقطع دیفرانسیلی و به دنبال آن سطح مقطع کل به صورت جداگانه وجود دارد

$$\frac{d\sigma^S}{d\Omega} = (\tau S + 1) \pi^2 \frac{k_{\gamma'}}{k_\gamma} |T_{\gamma', \gamma}|^2 \quad (21)$$

در رابطه (۲۱)، S معرف اسپین کل است که برابر صفر در نظر گرفته شده است، محاسبات بدون احتساب اسپین و در واحد πa_0^2 می‌باشد [۱۰]. با انتگرال‌گیری بر روی سطوح مقطع دیفرانسیلی هریک از گذارها سطح مقطع کل مربوط به آن گذار



شکل ۴. سطح مقطع دیفرانسیلی در گذار مستقیم اتم-اتم به ازای انرژی ۵۰۰-۱۰ eV.

لذا با توجه به این که فرآیند دوگانه توماس شامل دو

تشکیل پوزیترونیم می‌دهند.

مشاهده نمود. باید به این نکته اشاره داشت که در این نمودارها قله‌ای همانند قله توماس از انرژی ۲۰ الکترون ولت به بالا مشاهده می‌شود مکان این قله طبق رابطه (۲۶) با انرژی پرتابه متناسب بوده و با تغییر انرژی محل آن نیز تغییر می‌کند. این قله در انرژی‌های بالاتر از ۲۰۰ eV مقدار زاویه از مقدار زاویه توماس، ۴۵° کمتر می‌شود. از طرفی در زاویه توماس با وجود این که پراکندگی دوگانه صورت می‌گیرد و انتظار بیشینه بودن در این زاویه می‌رود، همچنان این بیشینه نمی‌تواند از مقدار سطح مقطع دیفرانسیلی در زاویه صفر درجه بیشتر باشد. بنابراین نامتعارف بودن رفتار نمودارها در دامنه انرژی‌های بالاتر از ۲۰۰ eV می‌تواند به این دلیل باشد که زاویه توماس بر خلاف انتظار مقدار ثابتی نبوده و انرژی پرتابه، سرعت پوزیترونوم تشکیل شده، انرژی الکترون قیدی در اتم هیدروژن و پوزیترونوم در مقدار آن نقش بسزایی دارد همچنین به این نکته می‌توان اشاره نمود که با بالا رفتن انرژی و کماکان زیاد شدن سرعت پرتابه احتمال دو برخوردی که ایجاد قله توماس را شامل می‌شود کاهش می‌یابد. با افزایش انرژی فردی احتمال جذب الکترون و در نتیجه سطح مقطع جزئی پراکندگی کاهش می‌یابد.

با سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونوم پایه [۱۱]، شکل ۵ نمونه‌ای از مقایسه نتایج گذار مستقیم اتم-اتم با سایر روش‌های مربوط به محاسبه سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونوم در حالت پایه می‌باشد. همان طور که ملاحظه می‌کنید نتایج در دامنه انرژی ۱۰-۳۰۰ eV در حد قابل قبولی با سایر روش‌ها در تطبیق است، تغییر رفتار در انرژی‌های بالا همان گونه که گفته شد دور از انتظار نبوده و علت این امر می‌تواند تک جمله‌ای بودن بسط توابع حالت و یا استفاده از امواج تخت باشد. در قسمت نتیجه‌گیری به صورت دقیق‌تری به بررسی دلایل پرداخته خواهد شد.

دامنه‌های گذار مربوط به بازچینی $V_{\beta\alpha}$ شامل جملات I_4 الی I_6 می‌باشد، مقادیر مربوط به دو دامنه I_5 و I_6 مختلط هستند لیکن بیشترین سهم در میان برهم‌کنش‌ها مربوط به مقادیر حقیقی است. آنچه در مسائل پراکندگی مطرح است یافتن احتمال و در این گذار به خصوص، احتمال تشکیل

برخورد بوده و با استفاده از اصل بقای تکانه و انرژی جنبشی می‌توان زاویه توماس را محاسبه کرد. در برخورد پوزیترون به الکترون روابط

$$m_e^2 V^2 = m_e^2 V_i^2 + m_e^2 V_f^2 - 2m_e^2 V_i V_f \cos\theta_T, \quad (24)$$

$$\frac{1}{2} m_e^2 V_i^2 = \frac{1}{2} m_e^2 V_f^2 + \frac{1}{2} m_e^2 V^2, \quad (25)$$

صادق هستند که به ترتیب مربوط به بقای تکانه و بقای انرژی جنبشی می‌باشند. به سادگی با ترکیب این دو رابطه

$$\cos\theta_T = \frac{(m_{e^+} - m_{e^-})V_i}{2m_{e^+}V_f} + \frac{(m_{e^+} + m_{e^-})V_f}{2m_{e^+}V_i} \quad (26)$$

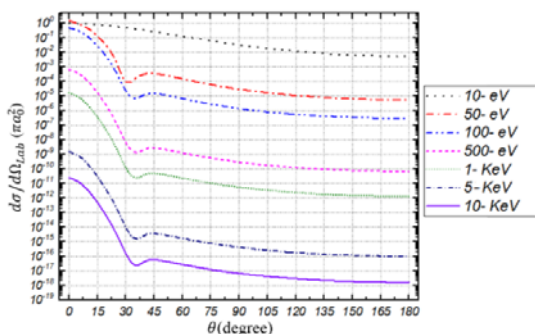
نتیجه خواهد شد، که در اینجا به علت سادگی مسئله که ناشی از برابری جرم پرتابه با جرم الکترون است رابطه (۲۶) ساده شده و با ترسیم θ_T بر حسب انرژی در کانال ورودی مشخص می‌شود که با افزایش انرژی این زاویه به ۴۵° همگرا می‌شود. مقادیر V_i و V_f توسط قانون بقای انرژی با انرژی پرتابه مرتبطند.

۳. نتایج

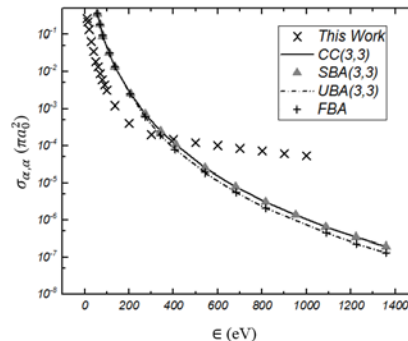
در این قسمت هرکدام از دامنه‌های معرفی شده در دامنه انرژی ۱۰ keV-۱۰ eV به ازای زوایای ۱۸۰-۰ درجه محاسبه شده است، بنابر انتظار جمله I_3 با در نظر گرفتن اتم پوزیترونوم در حالت پایه برابر صفر به دست آمد. همچنین سطح مقطع کل که به دست آمده از انتگرال گیری بر روی مجذور دامنه‌ها است، نیز در هرکدام از سه گذار $V_{\alpha,\alpha}$ ، $V_{\beta,\alpha}$ و $V_{\alpha,\beta}$ با نتایج سایرین مقایسه و در فرآیند ربایش بار توسط پوزیترون به بررسی زاویه توماس پرداخته شده است.

گذار $V_{\alpha,\alpha}$ شامل دو جمله I_1 و I_4 می‌باشد، مقادیر به دست آمده برای دامنه I_1 مثبت و دامنه I_4 منفی است. شکل ۴ نمودارهای سطح مقطع دیفرانسیلی گذار مستقیم اتم-اتم را برای دامنه انرژی ۱۰ تا ۵۰۰ eV نمایش می‌دهند.

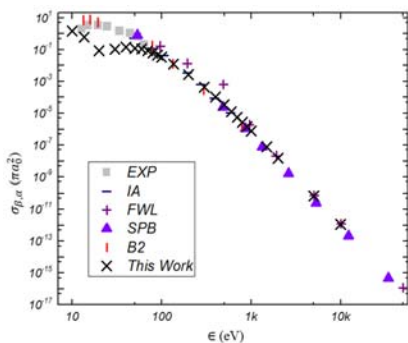
نکته قابل توجه در نمودارهای شکل ۴ بیشینه بودن مقدار سطح مقطع دیفرانسیلی در انرژی خاص ۱۳/۶ eV می‌باشد. با افزایش انرژی از میزان سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی کاسته خواهد شد که این موضوع را می‌توان در نمودارهای مربوطه



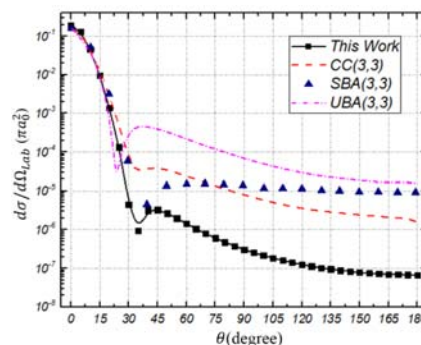
شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) سطح مقطع دیفرانسیلی تشکیل پوزیترونیم بر حسب زاویه پراکندگی برای دامنه انرژی ۱۰ eV-۱۰ keV.



شکل ۵. مقایسه سطح مقطع کل گذار مستقیم (۱s) - (۱s) اتم حاصل از روش (۱) و CC با سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونیم پایه [۱۱].



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسه سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونیم پایه بر حسب انرژی در کانال ورودی حاصل از روش (۱) و CC (x) با سایر روش‌ها □، از منبع [۱۲] و [۱۳] -، از منبع [۱۴] +، از منبع [۱۵] Δ، از منبع [۱۶] | از منبع [۱۷].



شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسه سطح مقطع دیفرانسیلی تشکیل پوزیترونیم پایه بر حسب زاویه پراکندگی برای انرژی ۱۳۶ eV با سایر روش‌های منبع [۱۱].

خوبی است. در دامنه انرژی ۵۰ eV-۱۰ eV پس از بررسی تک تک دامنه‌ها در گذار مطرح به دلیل رفتار نامطلوب دامنه I₀ از احتساب دامنه مذکور صرف نظر شده است. نمودار سطح مقطع پراکندگی به صورت اصلاح شده را می‌توان در شکل ۹ مشاهده نمود.

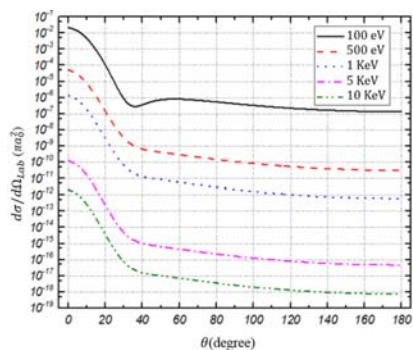
با وجودی که تطابق حاصله پس از حذف اثر دامنه I₀ در دامنه انرژی کمتر از ۵۰ eV به خوبی سایر انرژی‌ها نیست، ولی حذف این جمله در بهبود نتیجه اثرگذار بوده است.

در گذار V_{β,α} تنها جمله I'_β مختلط می‌باشد که از نظر مقداری تأثیر خیلی کمی در محاسبات دارد، پس از محاسبات مشخص شد که همانند دو گذار قبل با افزایش انرژی از مقدار

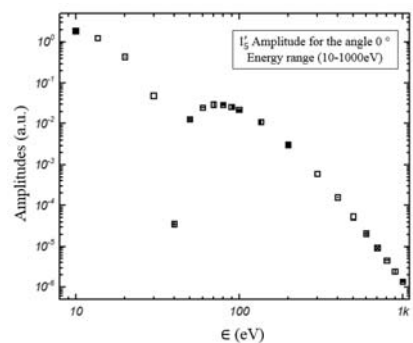
پوزیترونیم مطابق رابطه

$$e^+ + H \rightarrow Ps + H^+ \quad (27)$$

است. برای دسترسی به این احتمال از رابطه (۲۱) و (۲۳) کمک گرفته و نتایج برای دامنه انرژی ۱۰ keV-۱۰ eV در شکل ۶ ترسیم شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی احتمال تشکیل پوزیترونیم کاسته می‌شود همچنین زاویه توماس در شکل ۶ به خوبی در زاویه ۴۵° مشخص است. برای مقایسه نتایج این مقاله با سایر روش‌های انجام شده شکل ۷ ترسیم شده است، با وجود تک جمله‌ای بودن بسط توابع حالت اتمی نتیجه مشاهده شده در شکل ۷ تا اندازه زیادی قابل قبول است. در شکل ۸ نتیجه برای انرژی‌های بالاتر از ۵۰ eV دارای تطابق



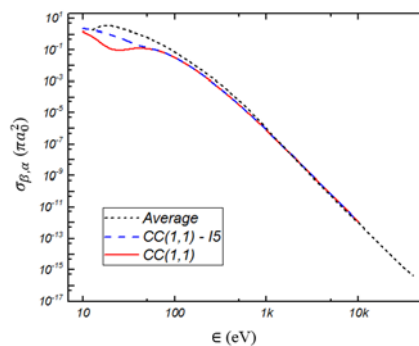
شکل ۱۰. (رنگی در نسخه الکترونیکی) سطح مقطع دیفرانسیلی تشکیل هیدروژن بر حسب زاویه پراکندگی برای دامنه انرژی ۱۰ keV-۱۰۰ eV (کانال ورودی).



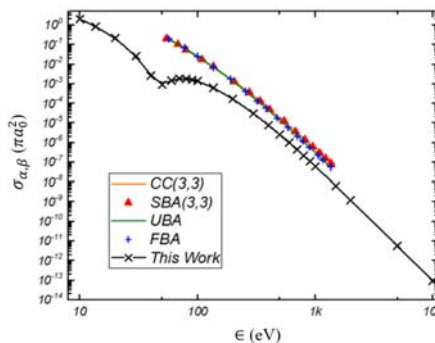
شکل ۱۲. دامنه پراکندگی I'_0 در زاویه 0° بر حسب انرژی ۱ keV-۱۰ eV (کانال ورودی).

در شکل ۱۱ سطح مقطع کل پراکندگی در گذار بازچینی $V_{\beta,\alpha}$ ترسیم شده است همان طور که مشاهده می‌نمایید جدای از اختلالات کمتر از ۱۰۰ eV، نتایج نسبتاً با سایر روش‌ها هماهنگ است. پس از بررسی دامنه‌ها در گذار مورد نظر بدرفتاری جمله I'_0 به چشم می‌خورد، علاوه بر این که در دامنه انرژی پایین (کمتر از ۱۰۰ eV) باعث ایجاد نارسایی در نتایج می‌شود در دامنه انرژی‌های بالاتر از ۱۰۰ eV نیز باعث می‌شود که نمودار سطح مقطع از حالت مطلوب فاصله داشته باشد. درباره علت بد رفتاری این دامنه و منشأ آن در قسمت نتیجه‌گیری بیشتر بحث خواهد شد.

دو شکل ۱۲ و ۱۳ به ترتیب مربوط به مقایسه رفتار I'_0 نسبت به تغییرات انرژی در زاویه صفر درجه و نمودار سطح



شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مشابه نمودار شکل ۱۰ با این تفاوت که دامنه I'_0 از نتایج روش (۱) حذف شده و نتیجه با میانگین سایر روش‌ها مقایسه شده است.



شکل ۱۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) سطح مقطع پراکندگی مربوط به تشکیل هیدروژن بر حسب انرژی ۱۰ keV-۱۰ eV (کانال ورودی) [۱۱].

دامنه‌ها کاسته می‌شود همچنین رفتار قسمت موهومی I'_ϵ نیز تناوبی است. احتمال (سطح مقطع دیفرانسیلی) تشکیل هیدروژن در فرآیند



محاسبه شده و ملاحظه می‌شود که نتایج با وجود تنش‌هایی در دامنه انرژی‌های پایین‌تر از ۱۰۰ eV در سایر انرژی‌ها رفتار متعارفی دارند.

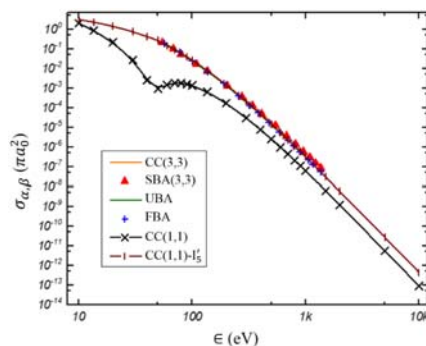
در شکل ۱۰ سطح مقطع دیفرانسیلی تشکیل اتم هیدروژن پایه بر حسب زاویه پراکندگی به ازای انرژی‌های ۱۰۰ eV، ۵۰۰ eV، ۱ keV و ۱۰ keV ترسیم شده است. لازم به ذکر است که در تمامی محاسبات و نمودارهای گذار $V_{\beta,\alpha}$ ، انرژی‌های ذکر شده مربوط به کانال ورودی است.

نارسایی روش مربوط به گذار $V_{\alpha,\alpha}$ در انرژی‌های بالا ناشی از تک جمله‌ای بودن بسط توابع حالت است بنابراین روش ذکر شده مختص به انرژی‌های پایین بوده و می‌توان قله‌های مشاهده شده در شکل ۴ را قله توماس در نظر گرفت که به محض همگرا شدن با نارسایی‌های ناشی از انرژی بالا روبرو شده‌اند. علاوه بر تک جمله‌ای بودن بسط توابع حالت می‌توان تقریب یکسان بودن شکل کانال ابتدایی و نهایی را نیز دلیلی بر نارسایی روش فوق در انرژی‌های بالا دانست.

جمله I_0 طبق رابطه (۱۹) حاصل از انرژی جنبشی الکترون فعال است که باعث ناهنجاری‌هایی در دامنه انرژی‌های پایین می‌شود. این رفتار به این علت است که سرعت پرتابه پایین بوده و در نتیجه زمان برخورد طولانی‌تر است بنابراین به الکترون فرصتی برای حرکت داده می‌شود. هر چند که این رفتار کاملاً فیزیکی است، اما این شدت رفتاری ناشی از استفاده موج تخت برای پوزیترون بجای امواج کولنی و یا واپیچیده است. در نتایج حاصله می‌توان از این جمله در انرژی‌های پایین صرف نظر کرد و به جواب مقبول‌تری دست یافت. روش انجام گرفته در این مقاله برای انرژی‌های بالاتر از 10^3 eV تطابق بسیار خوبی با نتایج سایر روش‌ها داشته و می‌توان از آن به عنوان روشی سریع برای محاسبه سطح مقطع پراکندگی در دامنه مذکور یاد کرد.

ماهیت جمله I_0 همانند I_0 مربوط به انرژی جنبشی الکترون فعال است با این تفاوت که در محاسبه I_0 عملگر ∇_1^2 تنها بر تابع نمایی (موج تخت) عمل می‌کند، به همین دلیل نارسایی‌های ایجاد شده توسط این دامنه را می‌تواند ناشی از فرض کردن پرتابه به صورت موج تخت دانست. هرچند موضوعی که در مورد دامنه I_0 در انرژی‌های پایین بحث شد در مورد I_0 نیز صادق است لیکن تأثیر نارسایی‌های استفاده از موج تخت با افزایش انرژی بیشتر شده و جای خالی اثرات رفع شده ناشی از حرکت الکترون را می‌پوشاند در نتیجه حذف این دامنه باعث تطابق سطح مقطع پراکندگی پوزیترونیم از یون اتم هیدروژن با سایر نمودارها می‌شود.

شکل ۱۴ بیانگر مقایسه‌ای میان سطح مقطع کل پراکندگی



شکل ۱۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) سطح مقطع پراکندگی مربوط به تشکیل هیدروژن بر حسب انرژی 10^3 eV- 10^4 eV (کانال ورودی) [۱۱]، نتیجه I_0 بدون احتساب I_0 می‌باشد.

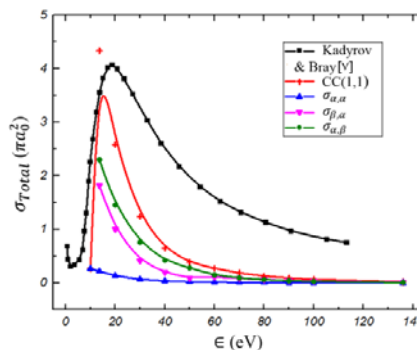
مقطع تشکیل هیدروژن که یک بار با در نظر گرفتن I_0 و بار دیگر بدون احتساب آن ترسیم شده است می‌باشند. علت بررسی رفتار I_0 در شکل ۱۲ در زاویه صفر درجه بیشینه بودن دامنه‌ها در این زاویه است، همان طور که عنوان شد در شکل ۱۲ مشاهده می‌نماید که I_0 نسبت به تغییرات انرژی رفتاری همانند نارسایی‌های شکل ۱۱ دارد.

۴. نتیجه‌گیری

عناصر ماتریسی $T_{\alpha,\alpha}$ ، $T_{\beta,\beta}$ ، $T_{\beta,\alpha}$ و $T_{\alpha,\beta}$ که با در نظر گرفتن تنها جمله اول رابطه (۱۰) با پتانسیل‌های مؤثر $V_{\alpha,\alpha}$ ، $V_{\beta,\beta}$ و $V_{\beta,\alpha}$ ، $V_{\alpha,\beta}$ برابری می‌کنند به ترتیب مربوط به برهم‌کنش‌های قبل، بعد و در حین برخورد می‌باشند، تفاوت میان $V_{\beta,\alpha}$ و $V_{\alpha,\beta}$ در جهت انجام برخورد است. در مورد گذار مستقیم اتم-اتم می‌توان نتایج مربوط به دامنه انرژی 10^3 eV- 2×10^4 eV را تأیید نمود و از نتایج سایر انرژی‌ها به سه دلیل:

- ۱- عدم قفل شدن زاویه توماس در زاویه 45° با وجود کوچک شدن زاویه با افزایش انرژی (همگرایی همانند شکل (۷) قابل انتظار است).
- ۲- بیشتر بودن مقدار سطح مقطع دیفرانسیلی در قله توماس در مقایسه با مقدار آن در زاویه صفر درجه.
- ۳- رفتار غیر عادی سطح مقطع پراکندگی در انرژی‌های بالاتر از 2×10^4 eV صرف نظر کرد.

است همچنین در دامنه انرژی‌های پایین‌تر از 13.6 eV به دلیل عدم امکان جدا شدن الکترون از هسته تنها گذار مستقیم در نظر گرفته شده است، نتیجه مشاهده شده در شکل ۱۴ تا حد قابل قبولی با محاسبات انجام گرفته توسط کدیروف^۱ و بری [۷] در تطابق است. تفاوت ناچیز این دو نمودار را می‌توان ناشی از این مسئله دانست که محاسبات حاضر تنها ناشی از احتساب حالت پایه $1s$ بوده و حالات برانگیختگی بر خلاف کار کدیروف و بری در نظر گرفته نشده‌اند. روش جفت‌شدگی به بررسی تمامی برهم‌کنش‌های موجود می‌پردازد و از این جهت نسبت به سایر روش‌ها در محاسبات مربوط به پراکندگی از اهمیت بیشتری برخوردار است همچنین دقت در نتایج به دست آمده از این روش بخصوص در انرژی‌های پایین غیر قابل چشم داشت بوده و همواره از آن به نام روشی مناسب برای انرژی‌های پایین یاد می‌شود. در راستای کار انجام شده می‌توان با در نظر گرفتن سایر ترازهای اتمی گذارهای ممکن به ترازهایی غیر از پایه را نیز مورد بررسی قرار داد که البته از نظر محاسباتی کاری بسیار دشوارتر از کار صورت گرفته است.



شکل ۱۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمایش سطوح مقطع ناشی از گذارهای مستقیم و بازچینی و مقایسه میان سطح مقطع کل برخورد $e^+ - H$ و نتایج منبع [۷] بر حسب انرژی $13.6 - 10 \text{ eV}$ ، در محاسبات از جملات I_0 و I_0' صرف نظر شده است و در انرژی‌های پایین‌تر از 13.6 eV تنها $\sigma_{\alpha, \alpha}$ در نظر گرفته شده است.

پوزیترون توسط اتم هیدروژن (محاسبه شده توسط پایه s) و مجموع برهم‌کنش‌های بررسی شده در این مقاله است، این سطح که به نام سطح مقطع کل برخورد σ_{Total} شناخته می‌شود حاصل جمع تمامی برهم‌کنش‌ها بوده و بنابراین از تک تک سطوح $(\sigma_{\beta, \beta}, \sigma_{\alpha, \beta}, \sigma_{\beta, \alpha}, \sigma_{\alpha, \alpha})$ بیشتر خواهد بود، لازم به ذکر است که در محاسبه σ_{Total} در دامنه انرژی $13.6 \text{ eV} - 10 \text{ eV}$ از دامنه‌های I_0 و I_0' به دلایل ذکر شده صرف نظر شده

مراجع

1. J Chadwick, *Proc. Roy. Soc. A* **136** (1932) 692.
2. C J Joachain, "Quantum Collision Theory", North-Holland Publishing Company Amsterdam (1975).
3. L H Thomas, *Proc. Soc. A* **114** (1927) 561.
4. N R Hewitt, C J Noble, and B H Bransden, *J. Phys. B* **23** (1990) 4185.
5. H R J Walters, A A Kernoghan, M T McAlinden, and C P Campbell, "Photon and Electron Collisions with Atoms and Molecules", edited by P G Burke and C J Joachain Plenum Press, New York (1997) 313.
6. K Higgins and P G Burke, *J. Phys. B* **24** (1991) 343.
7. S Kadyrov and I Bray, *Phys. Rev. A* **66** (2002) 012710.
8. I Bray, *Phys. Rev. A* **49** (1994) 1069.
9. I Bray and A T Selbovics, *Advances in At. Mol. Opt. Phys.* **35** (1995) 221.
10. Bray and A T Stelbovics *Computer Physics Communications* **85** (1995) 1.
11. K Ratnavelu, J Mitroy and A T Stelbovics, *J. Phys.*
12. W Sperber, "Measurement of positronium Formation in the Control of Positronium on Atomic Hydrogen", University Bielefeld, Germany (1993).
13. W Sperber, D Becke, K G Lynn, W Raith, A Schweb, A Sinapius, G Spicher, and M Weber, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 3690.
14. S J Ward and J H Macek, *Hyperfine Interactions* **89** (1994) 477.
15. ف شجاعی، «ربایش الکترون در برخورد پوزیترون و پروتون با اتم-مولکول به روش سه ذره ای فادیف»، پایان نامه دکتری، دانشگاه شهید باهنر کرمان، دانشکده علوم (۱۳۸۷).
15. H McGuier, N C Sil and N C Deb, *Phys. Rev. A* **34** (1986) 685.
16. A Igarashi and N Toshima, *Phys. Rev. A* **47** (1993) 2386.