

## بررسی فرایند انتقال بار در برخورد یون با اتم‌های چند الکترونی با استفاده از تقریب آیکنوال در فرمول‌بندی برینکمن - کرامرز

سعیده امیری بیدوری و رضا فتحی

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

پست الکترونیکی: rfathi@uk.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۵/۲۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۰۲/۱۶)

### چکیده

در کار حاضر سطح مقطع جزئی پراکندگی برای برخورد یون با اتم‌های چند الکترونی در کانال انتقال بار بررسی شده است. به این منظور از مدل الکترون فعال استفاده شده و فرایند به صورت یک برخورد سه‌جسمی و در محدوده انرژی‌های بالا مورد بررسی قرار گرفته است. رهیافت به کار گرفته شده یک روش نیمه کلاسیکی است که در آن تابع موج توصیف‌کننده سیستم به صورت تابع موج واپیچیده آیکنوال در نظر گرفته شده و در محاسبه سطح مقطع جزئی از دامنه پراکندگی برینکمن - کرامرز مرتبه اول و دوم استفاده شده است. در این کار از پتانسیل‌های کولنی پوششی، مؤثر و ایستا برای محاسبه تابع موج آیکنوال استفاده شده است. سطح مقطع جزئی برای برخورد پروتون با اتم‌های هلیوم، کربن، نئون و آرگون با استفاده از تقریب‌های برینکمن - کرامرز ایستا، برینکمن - کرامرز کولنی پوششی، برینکمن - کرامرز پتانسیل مؤثر و برینکمن - کرامرز ایستای مرتبه دوم محاسبه و با نتایج تجربی و نظری در دسترس مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: سطح مقطع جزئی، فرمول‌بندی برینکمن کرامرز، برخورد یون-اتم‌های چند الکترونی، تابع موج آیکنوال

### ۱. مقدمه

فیزیک پلاسما، نجوم و بیوفیزیک بسیار با اهمیت است و در فیزیک انرژی‌های پایین پدیده پراکندگی ابزار استاندارد برای کشف سیستم‌های حالت جامد را با استفاده از فرایندهایی از جمله پراکندگی نوترون، الکترون و اشعه X فراهم می‌کند.

در مطالعه برخورد اتمی که شامل پراکندگی پرتابه (معمولاً الکترون، پروتون، پوزیترون، پاد پروتون و غیره) به وسیله هدف (اتم‌ها، مولکول‌ها و یون‌ها) است با توجه به اصول بقا و وقوع کانال‌های مختلفی از جمله کانال انتقال بار، برانگیزش و یونش امکان پذیر است. از آنجایی که هیچ رهیافتی وجود ندارد که در

مطالعه برخوردهای اتمی نقش بسیار مهمی در پیشرفت فیزیک داشته است و روش‌های پراکندگی یکی از قوی‌ترین و مستقیم‌ترین روش‌ها برای به دست آوردن اطلاعات در ساختار میکروسکوپی است. می‌توان از آزمایش معروف گایگر و مارسدن [۱] و آزمایش رادرفورد [۲] به‌عنوان نخستین آزمایش‌ها برای مطالعه ساختار و برهم‌کنش بین اتم‌ها که از برخوردهای اتمی استفاده کرده‌اند یاد کرد. کاربرد برخوردهای اتمی در سایر شاخه‌های فیزیک از جمله فیزیک هسته‌ای،

تمام محدوده‌های انرژی پاسخ‌گو باشد و پدیده پراکندگی را به‌درستی توصیف کند، لذا رهیافت‌های متفاوتی در محدوده‌های مختلف انرژی و برای بررسی کانال‌های مختلف برخورد عنوان شده است. به طور کلی این رهیافت‌ها در سه دسته روش‌های کلاسیکی، نیمه‌کلاسیکی و کوانتومی تقسیم می‌شوند.

یکی از اولین محاسبات انتقال بار در سال ۱۹۳۰ توسط برینکمن و کرامرز انجام شد [۳]. در این محاسبات تنها پتانسیل بین پرتابه و الکترون انتقال یافته در نظر گرفته شده است. از آنجایی که برهم‌کنش بین هسته‌ای در مسیر پرتابه به‌ویژه برای سطح مقطع انتقال بار در ذرات سنگین اهمیت زیادی دارد، لذا نتایج هم‌خوانی خوبی با نتایج تجربی نداشت. پس از آن جکسون و شیف با استفاده از یک پتانسیل کلی شامل پتانسیل برینکمن - کرامرز و پتانسیل بین هسته‌ای نتایج بهتری برای مورد خاص برخورد پروتون با اتم هیدروژن به دست آوردند [۴]. اما نتایج این روش نیز برای سیستم‌هایی با بار هسته‌ای بزرگ‌تر هم‌خوانی خوبی با نتایج تجربی نداشت. بتس با در نظر گرفتن توابع موج اولیه و نهایی به صورت غیرمعامد توانست نتایج جکسون و شیف را بهبود بخشیده و یک روش فرعی برای هدف‌هایی با بار هسته‌ای بزرگ‌تر از واحد پیشنهاد کند [۵]. از طرف دیگر مک‌کارول و سالین در انتخاب تابع موج اولیه و نهایی از تقریب دو حالت بهره گرفتند [۶] در حالی که سالین و بلکیک با در نظر گرفتن یک فاز آیکونال شامل پتانسیل بین هسته‌ای همراه با روش برینکمن کرامرز نتایج بسیار خوبی را به دست آوردند [۷]. در سال ۱۹۷۷ روگرز و مک‌گایر با در نظر گرفتن پتانسیل استاتیک به جای پتانسیل کولنی سطح مقطع پراکندگی را در برخورد پروتون با اتم هلیوم محاسبه کردند که نسبت به نتایج مک‌کارول و سالین هم‌خوانی بهتری داشت [۸]. پس از آن رهیافت‌های کوانتومی بسیاری از جمله تقریب  $CDW$  [۹] و روش‌های چهار جسمی از جمله  $B - 4B$  [۱۰] و  $BCCIS - 4B$  [۱۱] عنوان شده است که محاسبات پیچیده‌ای را به همراه دارد.

در کار حاضر نیز با استفاده از مدل الکترون فعال، برخورد یون با اتم‌های چند الکترونی به صورت یک فرایند سه جسمی در کانال انتقال بار و در محدوده انرژی‌های بالا مورد بررسی قرار گرفته و در حین حفظ سادگی محاسبات با در نظر گرفتن تابع موج آیکونال به عنوان تابع موج نهایی سیستم و ترکیب آن با تقریب برینکمن - کرامرز یک روش نیمه‌کلاسیکی مطرح شده است. به منظور بهتر برآورده شدن شرایط مرزی مسئله پتانسیل بین هسته‌ای و اثرات پوششی الکترون‌های غیر فعال در هامیلتونین سیستم وارد شده است و پتانسیل مربوط به اثرات پوششی به دو صورت پتانسیل کولنی پوششی و پتانسیل مؤثر در نظر گرفته شده است. با جایگذاری پتانسیل‌های کولنی پوششی و مؤثر در فاز آیکونال و استفاده از دامنه گذار مرتبه اول تقریب برینکمن - کرامرز تقریب‌های برینکمن - کرامرز کولنی پوششی  $(SCBK)$  و تقریب برینکمن کرامرز با استفاده از پتانسیل مؤثر  $(EPBK)$  معرفی شده‌اند. بررسی دیگری که در این کار انجام شده است، جایگذاری پتانسیل ایستا در فاز آیکونال و استفاده از دامنه گذار مرتبه دوم تقریب برینکمن - کرامرز برای محاسبه دامنه پراکندگی است. با این کار سعی شده است نتایج روگرز و مک‌گایر تعمیم داده شود و مشاهده می‌شود که به ویژه در انرژی‌های بالاتر و برای اتم‌های سنگین‌تر نتایج بهبود یافته و قله توماس نمایان می‌شود. در نهایت سطح مقطع حاصل از سه روش عنوان شده برای اتم‌های چند الکترونی نظیر هلیوم، کربن، نئون و آرگون در برخورد با پروتون با نتایج تجربی و نظری در دسترس مقایسه شده است.

## ۲. نظریه

فرایند انتقال بار با استفاده از مدل الکترون فعال به صورت

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

در نظر گرفته می‌شود. شکل ۱ دستگاه مختصات مربوط به این فرایند را توصیف می‌کند که در آن  $A$  یون پرتابه (با اندازه حرکت  $\hbar k_i$  و سرعت  $v_i$ )،  $B$  هدف،  $e$  الکترون فعال

۴. Screening Coulomb Brinkman-Kramers

۵. Effect potential Brinkman-Kramers

۱. Continuum Distorted Wave

۲. Born Distorted Wave

۳. Boundary-Corrected Continuum Intermediate State

پتانسیل بین پرتابه و الکترون هدف و تابع موج اولیه و نهایی سیستم ماتریس گذار برینکمن-کرامرز به صورت

$$T_{BK} = \langle \varphi_f | -\frac{1}{r} | \psi_i \rangle \quad (3)$$

معرفی می‌شود. دامنه گذار در این تقریب با توجه به این که توابع موج اولیه و نهایی به صورت حاصل ضرب تابع موج ذره آزاد به عنوان تابع موج پرتابه در تابع موج زیرسیستم مقید در نظر گرفته می‌شود، از رابطه

$$b_{BK}(\rho) = \left( \frac{v_i}{v_f} \right) (z_a z_b)^{\delta/\gamma} \left( \frac{\rho}{\gamma} \right) K_{\gamma} \left( \gamma^{1/\gamma} \rho \right), \quad (4)$$

$$\gamma = z_b^2 + \left( \frac{v_i}{v_f} + \frac{1}{v_i} (z_a^2 - z_b^2) \right)^2, \quad (5)$$

حاصل می‌شود و برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  محاسبه شده است.

در کار حاضر با در نظر گرفتن تابع موج پرتابه به صورت تابع موج واپیچیده آیکونال تابع موج اولیه به صورت

$$\psi_i = e^{ik_i \cdot \vec{r}_i} e^{i\delta(\rho)} \varphi_b(\vec{x}) \quad (6)$$

و تابع موج نهایی به صورت

$$\varphi_f = \varphi_a(\vec{S}) e^{-ik_f \cdot \vec{r}_f} \quad (7)$$

در نظر گرفته شده است.  $\delta(\rho)$  که پتانسیل بین‌هسته‌ای را وارد مسئله می‌کند فاز آیکونال نامیده می‌شود و از رابطه

$$\delta(\rho) = -\frac{1}{v_i} \int_0^{\infty} V(R) dz, \quad (8)$$

به دست می‌آید [۱۲]. در نهایت سطح مقطع جزئی از عبارت

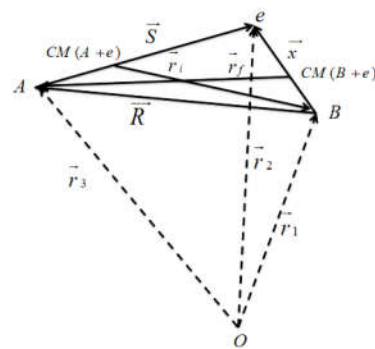
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| i\mu v_i \int_0^{\infty} \rho d\rho J_0(\eta\rho) e^{i\delta(\rho)} b_{BK}(\rho) \right|^2, \quad (9)$$

حاصل می‌شود [۸].

در بررسی برخورد با هدفی که بیش از دو الکترون دارد پتانسیل شامل جملاتی از سایر الکترون‌های قرار گرفته در لایه‌های دیگر و لایه  $k$  است. در نظر گرفتن پتانسیلی که شامل این جملات باشد شرایط مرزی مسئله را به خوبی برآورده می‌کند. لذا در ادامه به این منظور اثرات سایر الکترون‌ها به طور تقریبی با یک پتانسیل کولنی استتار شده

$$V(R) = \frac{z_a z_b}{R} e^{-R/r}, \quad (10)$$

وارد مسئله شده است. قسمت اول رابطه (۱۰) همان جمله بلند برد



شکل ۱. دستگاه مختصات توصیف کننده فرایند انتقال بار.

هدف،  $\vec{R}$  فاصله بین هسته هدف و پرتابه،  $\vec{S}$  فاصله بین پرتابه تا الکترون فعال هدف،  $\vec{x}$  فاصله بین هدف و الکترون فعال است.

از آنجایی که هامیلتونین برای برخورد پرتابه به یک هدف چند الکترونی به صورت مجموع انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی کل سیستم نوشته می‌شود، هامیلتونین کل سیستم را می‌توان به صورت

$$H = \frac{p^2}{2M_a} + \frac{z_a z_b}{R} - \sum_{j=1}^{z_b} \frac{z_a}{|\vec{R} - \vec{r}_j|} + \sum_{j=1}^{z_b} \left( \frac{p_j^2}{2} - \frac{z_b}{r_j} \right) + \sum_{k>j}^{z_b} \frac{1}{|\vec{r}_k - \vec{r}_j|}, \quad (2)$$

نوشت که جملات نوشته شده در آن به ترتیب، انرژی جنبشی پرتابه، پتانسیل بین پرتابه و هدف، پتانسیل بین پرتابه با تک تک الکترون‌های هدف، مجموع انرژی جنبشی الکترون‌های هدف و پتانسیل بین الکترون‌های هدف و هسته؛ و پتانسیل بین الکترون‌ها را نمایش می‌دهند. در رابطه (۴) جرم پرتابه،  $z_b$  بار هسته هدف،  $\vec{R}$  نشان دهنده مختصات نسبی بین پرتابه و هسته هدف،  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{z_b}$  مجموعه‌ای از مختصات الکترون‌های هدف و  $\vec{p}_j$  اندازه حرکت الکترون  $j$  ام است. در دستگاه مختصات استوانه‌ای  $R = \sqrt{\rho^2 + z^2}$  است که در آن  $\rho$  پارامتر برخورد است.

در تقریب برینکمن-کرامرز تنها برهم‌کنش بین پرتابه با الکترون فعال در نظر گرفته می‌شود. به عبارتی این تقریب پتانسیل بین هسته‌ای را وارد نمی‌کند. بنابراین با توجه به

$$V_{eff}(\bar{R}) = V_0 - \frac{1}{R} + (1 - z_b) \frac{e^{\lambda R}}{R}, \quad (17)$$

$V_0$  مقدار ثابتی است و برای تطبیق انرژی پتانسیل حالت پایه بر انرژی مقید انتخاب می‌شود،  $z_b$  بار هسته هدف است و پارامتر  $\lambda$  با تطبیق پتانسیل (۱۷) با پتانسیل حاصل از معادلات هارتری فاک محاسبه شده است و بهترین مقادیر به دست آمده برای اتم‌های هلیوم، کربن، نئون و آرگون عبارتند از [۱۴]:

$$\lambda_{He} = 1/65, \quad \lambda_{Ne} = 1/45, \quad (18)$$

$$\lambda_C = 1/45, \quad \lambda_{Ar} = 3/35,$$

با جایگذاری پتانسیل (۱۷) در رابطه (۸) پس از انجام محاسبات و استفاده از انتگرال (۱۲) فاز آیکونال به صورت

$$\delta(\rho) = \frac{1}{v_i} \ln \rho - \frac{1}{v_i} (1 - z_b) K_0(\lambda \rho), \quad (19)$$

محاسبه می‌شود. بنابراین سطح مقطع جزئی پراکندگی عبارت

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{EPBK} = \left| i\mu v_i \int_0^\infty \rho^{1+i\frac{\gamma}{v_i}} d\rho J_0(\eta\rho) \exp \right. \quad (20)$$

$$\left. \left[ -\frac{2i(1-z_b)}{v_i} K_0(\lambda\rho) \right] b_{BK}(\rho) \right|^2,$$

را نتیجه می‌دهد.

رهیافت دیگری که می‌توان دنبال کرد استفاده از دامنه پراکندگی مرتبه دوم برینکمن - کرامرز برای محاسبه سطح مقطع جزئی است. دامنه پراکندگی مرتبه دوم از عبارت [۱۵]

$$b_{BK2}(\rho) = b_{BK1} + i\gamma^4 - \frac{(z_a z_b)^{\frac{5}{2}}}{v_i^{\frac{5}{2}}} \int_0^\infty dk \frac{k J_0(p v_i k)}{\left(k^2 + \frac{1}{4}\right)^2 \left(k^2 - \frac{3}{4} - \frac{i\varepsilon}{v_i}\right)}, \quad (21)$$

حاصل می‌شود. در تقریب مرتبه دوم برینکمن - کرامرز، در انتخاب تابع موج برای محاسبه ماتریس گذار، جمله دوم بسط نیز در نظر گرفته شده است. لذا انتظار می‌رود نتایج برای دو روش عنوان شده به‌ویژه در انرژی‌های بالا با استفاده از دامنه رابطه (۲۰) بسیار بهبود یابند. اما به علت نوسان توابع بسط ظاهر شده در فازهای آیکونال (۱۲) و (۱۸) و واگرا شدن انتگرال مربوط به سطح مقطع پراکندگی در محاسبات عددی که باعث سنگینی محاسبات می‌شود، دامنه مرتبه دوم برینکمن - کرامرز

کولنی است و قسمت نمایی در واقع اثر پوششی سایر الکترون‌ها را وارد مسئله می‌کند و شرایط مرزی را بهبود می‌بخشد.  $r_0$  شعاع پوششی است که در برخورد اتم - اتم با عبارت

$$r_0 = \left( z_a^{\frac{\gamma}{2}} + z_b^{\frac{\gamma}{2}} \right)^{-\frac{\gamma}{2}} \quad (11)$$

داده شده است [۱۳]. به منظور محاسبه فاز آیکونال، رابطه (۱۰) در رابطه (۸) جایگزین شده و با استفاده از رابطه

$$\int_0^\infty e^{-q(\sqrt{\rho^2+z^2})} dz = K_0(\rho q), \quad (12)$$

نتیجه

$$\delta(\rho) = -\frac{z_a z_b}{v_i} K_0\left(\frac{\rho}{r_0}\right), \quad (13)$$

حاصل می‌شود.  $K_0$  تابع بسط تعدیل یافته مرتبه صفرم است. لازم به ذکر است که در حالت حدی  $r_0 \rightarrow 0$  به نتایج تقریب برینکمن - کرامرز خواهیم رسید که در آن پتانسیل کولنی بین هسته‌ای نادیده گرفته می‌شود.

$$\frac{z_a z_b}{R} e^{-\frac{R}{r_0}} \xrightarrow{r_0 \rightarrow \infty} 0, \quad (14)$$

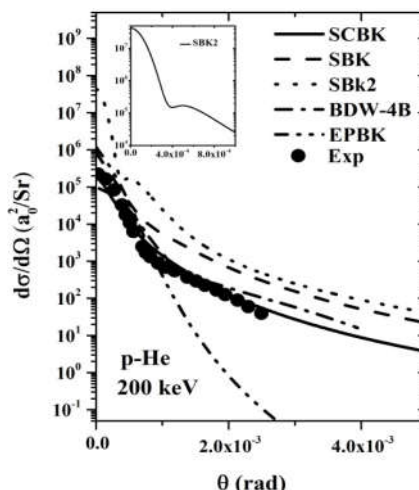
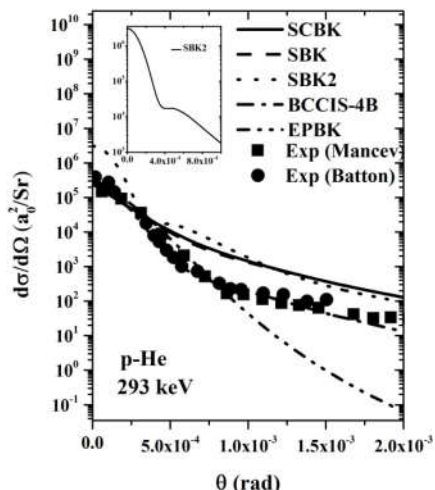
و در حالت  $r_0 \rightarrow \infty$  پتانسیل کولنی

$$\frac{z_a z_b}{R} e^{-\frac{R}{r_0}} \xrightarrow{r_0 \rightarrow \infty} \frac{z_a z_b}{R}, \quad (15)$$

نتیجه می‌شود که در محاسبات سالین و بلکیک استفاده شده است. برای به دست آوردن سطح مقطع جزئی در این تقریب که تقریب برینکمن - کرامرز کولنی پوششی نامیده می‌شود، رابطه (۴) و (۱۳) در رابطه (۹) قرار داده می‌شود؛ بنابراین خواهیم داشت:

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{SCBK} = \left| i\mu v_i \int_0^\infty d\rho \rho J_0(\eta\rho) \exp \left[ -\frac{z_a z_b}{v_i} K_0\left(\frac{\rho}{r_0}\right) \right] b_{BK}(\rho) \right|^2. \quad (16)$$

پیشنهاد دیگری که برای بهبود شرایط مرزی مسئله مطرح می‌شود استفاده از پتانسیل مؤثر به منظور در نظر گرفتن اثرات الکترون‌های غیر فعال است. در این مرحله پتانسیل را به صورت ترکیبی از یک پتانسیل کولنی بلند برد و یک پتانسیل کوتاه برد کولنی پوششی در نظر می‌گیریم.



شکل ۳. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن-کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج رهیافت  $BCCIS-4B$  [۱۱] و نتایج تجربی [۱۰ و ۱۷] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم هلیوم در انرژی  $293 \text{ keV}$ .

شکل ۲. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن-کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج رهیافت  $BDW-4B$  [۱۰] و نتایج تجربی [۱۶] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم هلیوم در انرژی  $200 \text{ keV}$ .

### ۳. نتیجه‌گیری

در این بخش سطح مقطع‌های جزئی به دست آمده برای فرایند انتقال بار در برخورد پروتون با اتم‌های هلیوم، کربن، نئون و آرگون برای حالت پایه با استفاده از تقریب‌های برینکمن-کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) و برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) به صورت عددی محاسبه شده و با نتایج تجربی و نظری در دسترس مقایسه شده است.

سطح مقطع جزئی برای برخورد پروتون با اتم هلیوم به عنوان اولین اتم چند الکترونی برای انرژی‌های  $200 \text{ keV}$  و  $293 \text{ keV}$  محاسبه شده و در شکل‌های ۲ و ۳ نمایش داده شده است. در انرژی  $200 \text{ keV}$  مشاهده می‌شود نتایج حاصل از تقریب برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK) که در آن اثرهای پوششی الکترون فعال به صورت یک جمله‌نمایی در پتانسیل ظاهر شده است هم‌خوانی بسیار خوبی را با نتایج تجربی [۱۶] و نتایج نظری  $BDW-4B$  [۹] نشان می‌دهد.

برای حالتی که فاز آیکونال با استفاده از پتانسیل ایستا [۸]

$$\delta(\rho) = -\frac{z_a z_b}{v_i} \left( K_0(z z^* \rho) + z^* \rho K_1(z z^* \rho) \right), \quad (22)$$

محاسبه شده است، در عبارت (۹) جایگزین شده و برای سطح مقطع پراکندگی عبارت

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{SBK2} = \left| i \mu v_i \int_0^\infty \rho d\rho J_0(\eta\rho) \exp\left[ -\frac{\gamma i z_a z_b}{v_i} \left( K_0(z z^* \rho) + z^* \rho K_1(z z^* \rho) \right) \right] b_{BK2}(\rho) \right|^2, \quad (23)$$

حاصل می‌شود. با فرض بالا بودن انرژی‌ها و با استفاده از انتگرال

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{\nu+1} J_\nu(\alpha x)}{(x^2 + k^2)^{\mu+1}} = \frac{\alpha^\mu k^{\nu-\mu}}{\sqrt{\pi} \Gamma(\mu+1)} K_{\nu-\mu}(\alpha k), \quad (24)$$

دامنه گذار برینکمن-کرامرز مرتبه دوم در رابطه (۲۳) به صورت

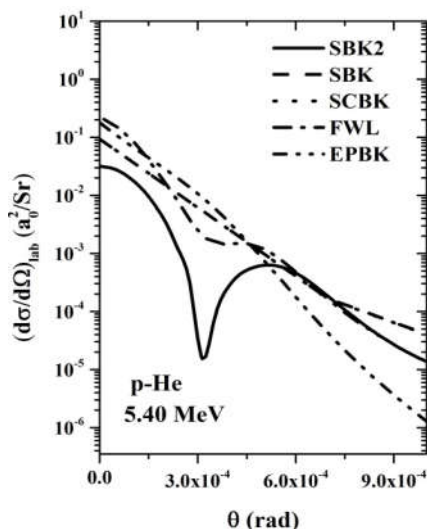
$$b_{BK2} = i \gamma^5 \frac{(z_a z_b)^{\gamma/2}}{v_i^{\gamma/2}} \left[ \left( \frac{1}{\gamma} \rho v_i \right)^{\gamma/2} K_{\gamma/2} \left( \frac{1}{\gamma} \rho v_i \right) - \left( \frac{1}{\gamma} \rho v_i \right)^{\gamma/2} \right] \quad (25)$$

$$K_1 \left( \frac{1}{\gamma} \rho v_i \right) + \frac{1}{\gamma} \left[ K_0(\zeta \rho v_i) - K_0 \left( \frac{1}{\gamma} \rho v_i \right) \right] \right],$$

نتیجه می‌شود به طوری که  $\zeta = \frac{\varepsilon}{\sqrt{3} v_i} - i \frac{\sqrt{3}}{2}$  است.

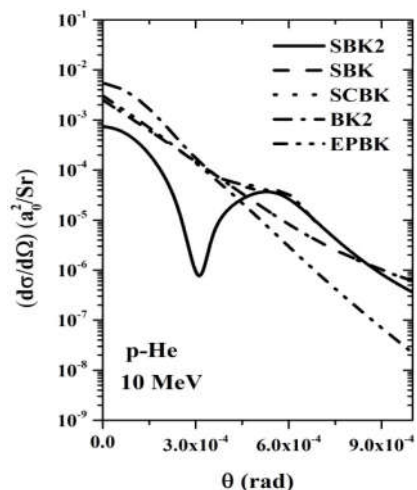
تقریب‌های  $SBK$  و  $SCBK$  بر یکدیگر منطبق شده و از آنجایی که تقریب مرتبه دوم دامنه برینکمن-کرامرز در انرژی‌های بالا سهم بیشتری دارد، روش  $SBK2$  در این انرژی و به‌ویژه در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی هم‌خوانی خوبی را با روش‌های  $SBK$  و  $SCBK$  نشان می‌دهد و قله توماس با دقت بهتری نمایان شده است. ناحیه هم‌خوانی نتایج  $EPBK$  در این انرژی بزرگ‌تر و هم‌خوانی نسبت به سایر روش‌ها بیشتر است و نشان از اهمیت انتخاب چنین پتانسیلی در انرژی‌های بالا است. در حالت کلی در زوایای کوچک‌تر پراکندگی انطباق نتایج تجربی و نظری که توسط منکو [۹] و با در نظر گرفتن برهم‌کنش‌ها به صورت چهار جسمی محاسبه شده با نتایج کار حاضر مشاهده می‌شود.

همان‌گونه که اشاره شده، مرتبه دوم دامنه برینکمن-کرامرز در انرژی‌های بالا سهم بیشتری دارد و مقایسه نتایج حاصل با نتایج روش  $FWL$  در انرژی  $5.40 MeV$  که هم‌خوانی بسیار خوبی با نتایج تجربی دارد [۱۵] و در شکل ۴ آورده شده است. گواه این مطلب است. هرچند که محاسبات کار حاضر بسیار ساده‌تر از روش  $FWL$  هستند اما نتایج حاصل هم‌خوانی بسیار خوبی با این روش دارد و قله توماس با دقت بسیار خوبی نمایان شده است. از طرف دیگر در شکل ۵ نتایج کار حاضر برای برخورد پروتون با هلیوم با تقریب برینکمن-کرامرز مرتبه دوم در انرژی  $10 MeV$  [۱۹] مقایسه شده است و مشاهده می‌شود که در تقریب برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم قله توماس به خوبی نمایان شده است و نتایج هر دو روش در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی بر یکدیگر منطبق هستند. با مراجعه به مرجع [۲۰] مشاهده می‌شود که نتایج تقریب برینکمن-کرامرز مرتبه دوم بالاتر از نتایج تجربی قرار می‌گیرد بنابراین از پایین‌تر قرار گرفتن تقریب برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم می‌توان انتظار داشت که در صورت دسترسی به نتایج تجربی در این محدوده انرژی برای تقریب برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم هم‌خوانی بسیار خوبی مشاهده شود. با مقایسه نتایج  $EPBK$  در شکل‌های ۴ و ۵ مشاهده می‌شود که نتایج حاصل

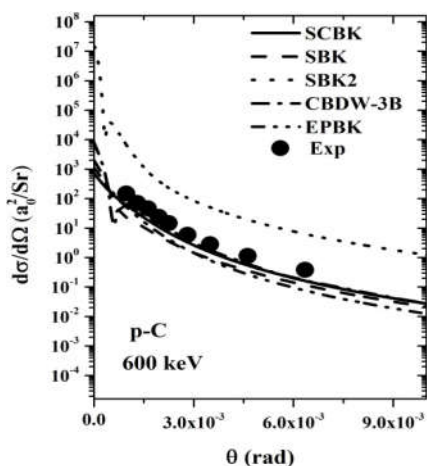


شکل ۴. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی ( $SCBK$ )، برینکمن کرامرز ایستا ( $SBK$ )، برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم ( $SBK2$ ) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر ( $EPBK$ ) با نتایج رهیافت  $FWL$  [۱۵] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم هلیوم در انرژی  $5.40 MeV$ .

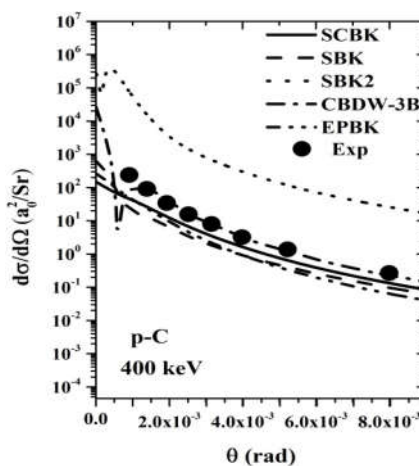
روش  $BW-4B$  برهم‌کنش هر دو الکترون را در یک فرایند چهار جسمی در نظر گرفته و محاسبات پیچیده‌ای دارد. این هم‌خوانی برای حالتی که از پتانسیل مؤثر ( $EPBK$ ) که در آن اثرهای پوششی به صورت ترکیبی از پتانسیل کولنی و کولنی پوششی است، استفاده شده است تنها در زوایای بسیار کوچک پراکندگی قابل رویت است. تقریب برینکمن-کرامرز ایستا ( $SBK$ ) در این انرژی در زوایای کوچک‌تر هم‌خوانی بهتری را نشان می‌دهد. از طرف دیگر سطح مقطع حاصل از تقریب برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم ( $SBK2$ ) که شامل جمله مرتبه دوم دامنه پراکندگی برینکمن-کرامرز است، علی‌رغم این‌که در حدود زاویه  $(0.47 mrad)$  یک قله را نشان می‌دهد که می‌توان از آن به عنوان قله فرایند دوگانه توماس [۱۸] یادکرد، بسیار بزرگ‌تر از نتایج تجربی و روش  $SCBK$  است و به روش  $SBK$  نزدیک‌تر است. لذا می‌توان گفت انتخاب تابع موج دقیق‌تر در محاسبه دامنه برینکمن-کرامرز که در آن از اثرات بین هسته‌ای صرف‌نظر شده است در این انرژی تنها منجر به پیدایش قله توماس شده است. در انرژی بالاتر  $293 keV$



شکل ۵. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن-کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج تقریب برینکمن-کرامرز مرتبه دوم [۱۹] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم هلیوم در انرژی  $10 \text{ MeV}$ .



شکل ۷. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن-کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج رهیافت  $CBDW-3B$  [۲۲] و نتایج تجربی [۲۱] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم کربن در انرژی  $600 \text{ keV}$ .



شکل ۶. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن-کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج رهیافت  $CBDW-3B$  [۲۲] و نتایج تجربی [۲۱] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم کربن در انرژی  $400 \text{ keV}$ .

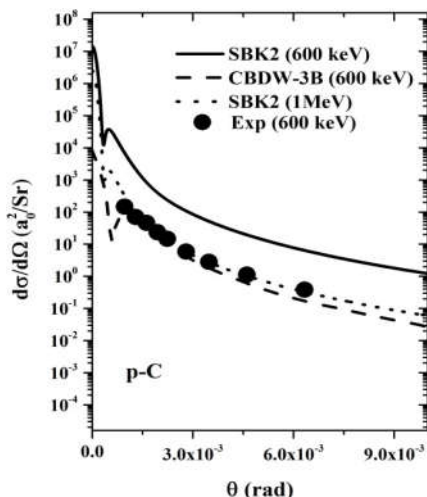
داده شده است. همان طور که انتظار می‌رود در انرژی  $600 \text{ keV}$  نسبت به  $400 \text{ keV}$  هم‌خوانی نتایج کار حاضر که یک نظریه انرژی‌های بالا است با نتایج تجربی [۲۱] و نظریه دقیق‌تر  $CBDW-3B$  [۲۲] بهتر است. نتایج نشانگر این است

از جایگذاری پتانسیل مؤثر در انرژی‌های بالا از دقت بیشتری برخوردار است.

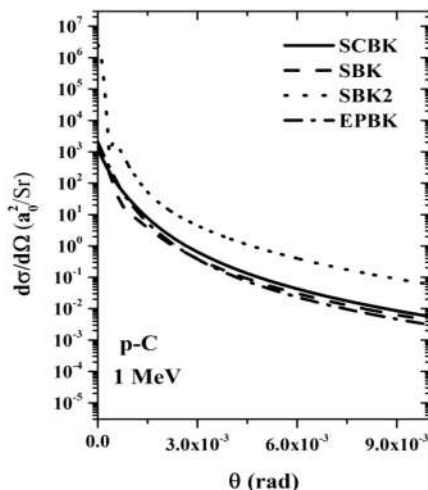
در شکل‌های ۶ و ۷ نتایج سطح مقطع جزئی برای پراکندگی پروتون با اتم کربن در انرژی‌های  $400 \text{ keV}$  و  $600 \text{ keV}$  نشان

۱. Coulomb-Born Continuum Distorted Wave





شکل ۹. مقایسه نتایج تقریب برینکمن-کرامرز ایستای مرتبه دوم در انرژی‌های  $600\text{ keV}$  و  $1\text{ MeV}$  با نتایج تجربی [۲۱] و نظری [۲۲] در انرژی  $600\text{ keV}$  برای گذار  $1s \rightarrow 1s$ .

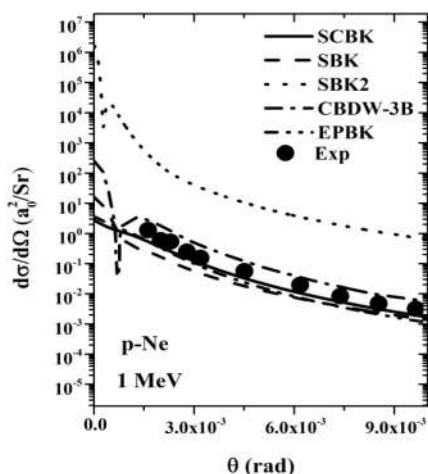


شکل ۸. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی ( $SCBK$ )، برینکمن کرامرز ایستا ( $SBK$ )، برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر ( $EPBK$ ) برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم کربن در انرژی  $1\text{ MeV}$ .

مقایسه نتایج حاصل از روش‌های  $SBK$ ،  $SCBK$ ،  $EPBK$  و  $SBK2$  در انرژی  $1\text{ MeV}$  در شکل ۸ و نزدیک شدن سطح مقطع  $SBK2$  به سطح مقطع حاصل از روش‌های دیگر نشان دهنده اهمیت نظریه پراکندگی مرتبه دوم در انرژی‌های بالا است، زیرا هم به نتایج مرتبه اول نزدیک شده و هم شامل قله توماس است. در شکل ۹ نتایج تقریب  $SBK2$  برای دو انرژی  $600\text{ keV}$  و  $1\text{ MeV}$  با نتایج تجربی و نظری موجود برای انرژی  $600\text{ keV}$  مقایسه شده است. انتظار داریم در صورت وجود نتایج تجربی در انرژی‌های بالاتر هم خوانی نتایج کار حاضر بهتر باشد.

نتایج سطح مقطع برخورد پروتون با اتم نئون در انرژی‌های  $1\text{ MeV}$ ،  $1/5\text{ MeV}$  و  $3\text{ MeV}$  در شکل‌های ۱۰، ۱۱ و ۱۲ آورده شده است و نتایج نشان دهنده آن است که با افزایش انرژی سطح مقطع‌های نظریه حاضر هم خوانی بهتری با نتایج تجربی [۲۱] و نظری دارد [۲۲] و در روش  $SBK2$  قله توماس مشاهده شده به ازای انرژی‌های بالاتر به مکان واقعی خود (زاویه  $0.47\text{ mrad}$ ) نزدیک‌تر می‌شود.

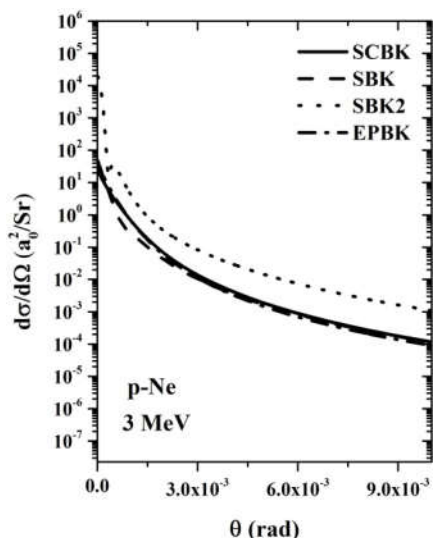
شکل ۱۲ که به علت نداشتن نتایج تجربی تنها مقایسه بین نتایج کار حاضر است باز هم نمایانگر اهمیت مرتبه‌های بالاتر تقریب



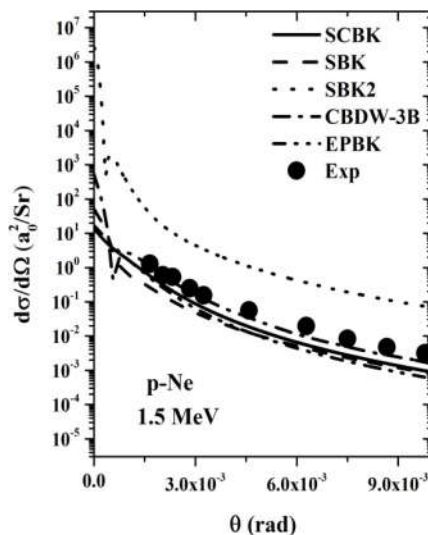
شکل ۱۰. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی ( $SCBK$ )، برینکمن کرامرز ایستا ( $SBK$ )، برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم ( $SBK2$ ) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر ( $EPBK$ ) با نتایج رهیافت  $CBDW-3B$  [۲۲] و نتایج تجربی [۲۱] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم نئون در انرژی  $1\text{ MeV}$ .

که اثرات پوششی و چگالی سایر الکترون‌های غیرفعال در انرژی‌های بالاتر به این شکلی که در نظریه حاضر در نظر گرفته شده درست است که متأسفانه نتایج تجربی بیشتری در این انرژی‌ها برای اثبات این ادعا در دسترس نیست.





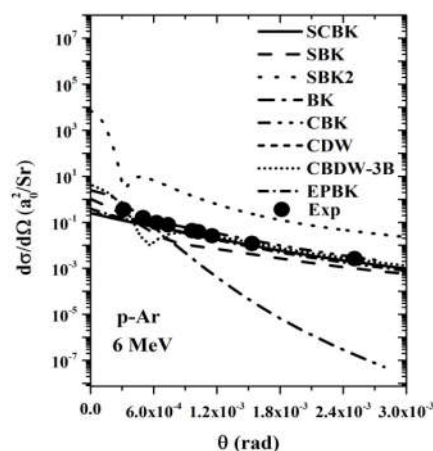
شکل ۱۲. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم نئون در انرژی  $3 \text{ MeV}$ .



شکل ۱۱. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج رهیافت  $3B-CBDW$  [۲۲] و نتایج تجربی [۲۱] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم نئون در انرژی  $1.5 \text{ MeV}$ .

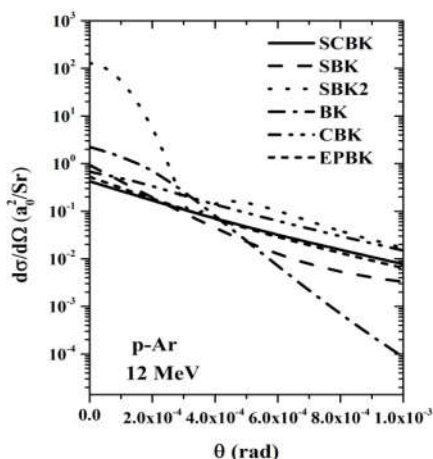
آخرین فرایند بررسی شده برخورد پروتون با اتم آرگون است. مطابقت بسیار خوب نتایج در انرژی‌های  $6 \text{ MeV}$ ،  $9 \text{ MeV}$  و  $12 \text{ MeV}$  با سایر نتایج نظری [۶، ۷، ۲۲] و نتایج تجربی [۲۳] در دسترس در شکل‌های ۱۳، ۱۴ و ۱۵ قابل مشاهده است. در شکل ۱۳ نتایج سه تقریب کار حاضر که تعمیم‌هایی از تقریب برینکمن-کرامرز هستند با تقریب برینکمن-کرامرز (BK) که در آن سهم هسته و سایر الکترون‌ها صرف نظر شده است نیز مقایسه شده است. همان طور که مشاهده می‌شود نتایج کار حاضر به ویژه در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی نقایص تقریب برینکمن-کرامرز را رفع می‌کند و هم‌خوانی بسیار خوبی را با نتایج تجربی به نمایش می‌گذارد.

از طرف دیگر تقریب SBK2 قلّه توماس را در هر سه انرژی به درستی نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود استفاده از تقریب مرتبه دوم برای دامنه برینکمن-کرامرز سبب می‌شود که نتایج در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی با سرعت کمتری به صفر رسیده و نسبت به تقریب برینکمن-کرامرز نتایج بهتری را نمایش می‌دهد.



شکل ۱۳. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن-کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن-کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج تقریب برینکمن-کرامرز مرتبه اول (BK) [۷]، تقریب برینکمن کرامرز کولنی CBK [۷]، تقریب CDW [۶]، تقریب  $3B-CBDW$  [۲۲] و نتایج تجربی [۲۳] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم آرگون در انرژی  $6 \text{ MeV}$ .

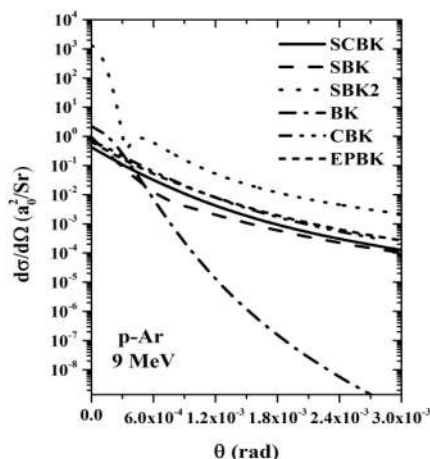
برینکمن-کرامرز در انرژی‌های بالا و اتم‌های سنگین‌تر است.



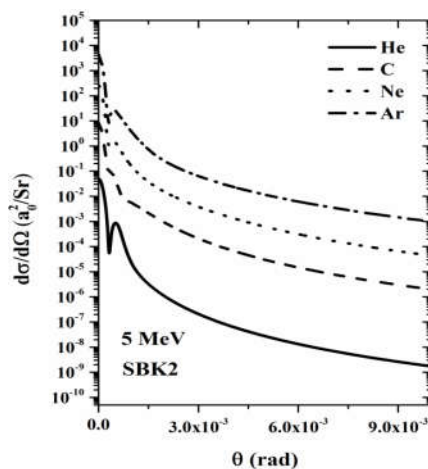
شکل ۱۵. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن - کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن - کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج تقریب برینکمن - کرامرز مرتبه اول (BK) [۷] و تقریب برینکمن کرامرز کولنی CBK [۷] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم آرگون در انرژی  $12 \text{ MeV}$ .

در نظر گرفتن تابع موج ایکونال در کارحاضر برای محاسبه سطح مقطع پراکندگی فرض صحیحی بوده و اثرات پوششی الکترون‌های غیرفعال که در کار حاضر به دو صورت پتانسیل کولنی پوششی و پتانسیل مؤثر در نظر گرفته شده است برای اتم‌های سنگین‌تر و در انرژی‌های بالاتر از اهمیت بیشتری برخوردار است.

در انتها سطح مقطع جزئی پراکندگی در برخورد پروتون با اتم هلیوم، کربن، نئون و آرگون در انرژی  $5 \text{ MeV}$  و با استفاده از تقریب برینکمن - کرامرز ایستای مرتبه دوم در شکل ۱۶ با یکدیگر مقایسه شده‌اند و نشان می‌دهد که با سنگین‌تر شدن اتم هدف سطح مقطع انتقال بار در یک انرژی خاص افزایش پیدا می‌کند و قله توماس که در انرژی‌های بالا نمایان می‌شود، و برای اتم هلیوم که این انرژی، انرژی بالایی محسوب می‌شود با دقت بسیار خوبی ظاهر شده است.



شکل ۱۴. مقایسه سطح مقطع جزئی تقریب‌های برینکمن - کرامرز کولنی پوششی (SCBK)، برینکمن کرامرز ایستا (SBK)، برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم (SBK2) و برینکمن - کرامرز پتانسیل مؤثر (EPBK) با نتایج تقریب برینکمن - کرامرز مرتبه اول (BK) [۷] و تقریب برینکمن کرامرز کولنی CBK [۷] برای گذار  $1s \rightarrow 1s$  در برخورد پروتون با اتم آرگون در انرژی  $9 \text{ MeV}$ .



شکل ۱۶. مقایسه نتایج تقریب برینکمن کرامرز ایستای مرتبه دوم برای برخورد پروتون با اتم‌های هلیوم، کربن، نئون و آرگون در انرژی  $5 \text{ MeV}$ .

نزدیکی بسیار خوب نتایج تقریب‌های *SBK*، *CBK* و *EPBK* و *SCBK* برای اتم آرگون و در هر سه انرژی نمایانگر این است که در مورد اتم‌های سنگین و انرژی‌های بالا

## مراجع

14. E Ghanbari-Adivi and M A Bolorizadeh, *J. Phys. B: Atom, Molec. Opt. Phys* **37** (2004) 3321.
15. R D Rivarola and J E Miraglia, *J. Phys B: At. Mol. Phys.* **15** (1982) 2221.
16. V Mergel, R Dorner, Kh Khayyelt, M Achler, T Weber, Jagutzki, C L Cocke and H Schmidt-Bocking *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001) 2257.
17. T R Bratton, C L Cocke and J R Macdonald, *J. Phys B: Atom. Molec. Phys.* **10** (1977) L517.
18. L H Thomas, *Proc. R. Soc. London A* **114** (1927) 561.
19. P R Simony, J H McGuire and J Eichler, *Phys. Rev. A* **26** (1982) 1337.
20. E Horsdal-Pedersen, C L Cocke and M Stockli, *Phys. Rev. Lett.* (1983) 1910.
21. E Horsdal-Pedersen, F Folkaman and N H Pedersen, *J. Phys. B: Atom. Molec. Opt. Phys.* **15** (1982) 739.
22. E Ghanbari-Adivi and A N Velayati, *Cent. Eur. J. Phys.* **11** (2013) 423.
23. C L Cock, J R Macdonald, B Curnutte, S L Varghese, and R Randall, *Phys. Rev. Lett.* **36** (1976) 782.
1. H Geiger and E Marsden, *Proc. R. Soc. London* **82** (1909) 495.
2. E Rutherford, *Philos. Mag* **21** (1911) 669.
3. H C Brinkman and H A kramers, *Proc. Acad. Sci.* **33** (1930) 973.
4. J D Jackson and H Schiff, *Phys. Rev.* **89** (1953) 359.
5. D R Bates, *Proc. R. Soc. Lond. A* **274** (1958) 294.
6. R McCarroll and A Salin, *J. Phys B (Proc. Phys. Soc.)* **2** (1968) 163.
7. D Belkic and A Salin, *J. Phys. B: Atom, Molec. Phys.* **9** (1976) L397.
8. S R Rogers and J H Mc Guire, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10** (1977) L497.
9. I. M. Cheshire, *Proc. phys. Soc. London* **84** (1964) 89.
10. I Mancev, V Mergal and L Schmidt, *J. Phys. B: Atom, Molec, Opt. phys.* **36** (2003) 2733.
11. R Samanta and M Purkait, *Phys. Scr.* **84** (2011) 065301.
12. R Fathi and S Amiri Bidvari, *IJPR* **17** 1 (2017) 101.
۱۲. ر فتحی و س امیری بیدوری، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۱۷ (۱۳۹۶) ۱۰۱.
13. E Everhard, G Stene and R J Carbone, *Phys. Rev.* **99** (1955) 1287.