

$$A^{q+}$$

$$۲s \quad ۲s$$

rfathi@mail.uk.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۰/۱۲/۲۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۱۲/۲۷)

$$A^{q+} (1 \leq q \leq 4)$$

(Mev - vMev)

و انتقال بار تک الکترونی در برخورد یون-اتم نظریه واحدی که بتواند در تمام محدوده انرژی پاسخگو باشد وجود ندارد. لذا روش‌های نظری متعددی در محدوده‌های انرژی مختلف برای کانال‌های متفاوت برخورد مطرح گردیده است. فرآیندهای تهییج، انتقال بار و یونش در برخورد یون-اتم از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند؛ نتایج مربوط به سطح مقطع پراکندگی در برخورد یون-اتم در اکثر شاخه‌های فیزیک از جمله نجوم و فیزیک پلاسما [۱ - ۳] به کار گرفته می‌شوند. از جمله برخوردهای یون-اتم برخورد پروتون و الکترون با اتم هیدروژن می‌باشد و خطوط طیفی اتم هیدروژن نقش کلیدی در مطالعه کیهانشناسی و شبیه سازی محیط‌های پلاسمایی بازی

نتایج مربوط به فرآیند برخورد، اطلاعات فراوانی در مورد ساختار کوانتمی و میکروسکوپی در اختیار ما قرار می‌دهد. توسعه فیزیک جدید به همراه مکانیک کوانتمی باعث گردیده تا نوع برهم‌کنش ذرات با یکدیگر، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی مؤثر بین آنها، اسپین ذرات، بقای انرژی، اندازه حرکت خطی و زاویه‌ای برای ساختارهای کوانتمی شناخته شود و سینماتیک پراکندگی چه به صورت نسبی و چه غیرنسبی و توجیه دینامیک برخورد در طول فرآیند امکان پذیر گردد. مهمترین کاربرد پراکندگی در شناخت ماهیت نیروهای موجود در ماده چگال، هسته اتم و اتم است. در خصوص تهییج، یونش

همچنین روش‌های نیمه کلاسیکی پارامتر برخورد استفاده می‌شود. روش به‌کار گرفته شده یک نظریه اختلال تعمیم یافته کوانتمی است. لازم به ذکر است که در محاسبات انجام شده تابع موج ذره پرتابه را به صورت موج تخت در نظر خواهیم گرفت که البته این تقریب در انرژی‌های برخورد بالا، تقریب مناسبی است ولی در انرژی‌های میانی و پایین خالی از اشکال نبوده و می‌بایست از تقریب‌های دیگری مانند تقریب‌های موج مختل شده در محاسبات استفاده نمود. همچنین یادآور می‌شویم که در محاسبات از یکای اتمی استفاده شده و فرض شده است که تابع موج ذره آزاد به صورت  $\langle k|r\rangle = e^{ik.r}$  بهنجار شده است که این رابطه منجر به روابط بهنجارش  $\langle r|r'\rangle = \delta(r-r')$  و  $\langle k|k'\rangle = (2\pi)^3 \delta(k-k')$  در محاسبه دامنه‌های پراکندگی خواهد شد.

فرآیند برهم‌کنشی تهییج مستقیم را می‌توان به صورت

$$P+(T+e) \rightarrow P+(T+e)^* \quad (2)$$

نمایش داد که در آن  $P$  ذره فرودی و  $T+e$  هدف با یک الکترون فعال را نشان می‌دهد. سطح مقطع دیفرانسیلی برخورد برای گذار از حالت اولیه  $i$  به حالت نهایی  $f$  در تهییج مستقیم در چارچوب مرکز جرم سیستم سه جسمی با رابطه [۲۱]

$$\left(\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega}\right)_{CM} = \frac{v_i v_f K_f}{4\pi^2 K_i} |T_{i \rightarrow f}|^2 \quad (3)$$

و سطح مقطع کل با رابطه

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \int \left(\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega}\right)_{CM} d\Omega \quad (4)$$

بیان می‌شود که  $T_{i \rightarrow f}$  عملگر گذار و  $v_i$  و  $v_f$  و  $K_i$  و  $K_f$  به ترتیب جرم کاهش یافته و اندازه حرکت نسبی پرتابه قبل (بعد) از برخورد می‌باشند. باید یادآوری نمود که عملگر گذار از حالت اولیه به حالت نهایی  $(T_{i \rightarrow f})$  برحسب معادلات فادیف-واتسون-لاولیس و دامنه‌های پراکندگی  $(A_{FWL})$  نوشته خواهد شد [۲۱]. در تقریب مرتبه اول معادلات فادیف-واتسون-لاولیس و در کانال تهییج عملگر گذار  $\tau_E$  با رابطه:

می‌کند. این خطوط می‌توانند مربوط به اندرکنش‌های کانال تهییج مستقیم و تهییج کانال انتقال بار الکتريکی در برخورد این اتم با یون‌های گوناگون باشند. جابه‌جایی، پهن شدگی و قطبش این خطوط حاوی اطلاعات گسترده‌ای از دینامیک و سینماتیک فرآیندهای رخ داده شده در این محیط‌ها می‌باشند و این اطلاعات به ما این اجازه را می‌دهند که این فرآیندها را شبیه سازی کنیم [۴]. به عنوان مثال اطلاعات مربوط به توزیع سرعت یون‌های فرود آمده از ذرات کیهانی در انرژی‌های بالا به طور مستقیم به سطح مقطع دیفرانسیلی در کانال تهییج وابسته است. یا پهن شدگی داپلری خطوط طیفی این اتم که در فرآیند انتقال بار الکتريکی و در انرژی‌های پایین رخ می‌دهد جنبه‌های دیگری از مدل سازی این نوع برخوردها را در اختیار ما قرار می‌دهد. برخورد یون با اتم هیدروژن از این لحاظ حائز اهمیت است که دینامیک برخورد سیستم‌های تک الکترونی را که ساده‌ترین سیستم‌های ممکن هستند را در اختیار ما قرار می‌دهد. به این وسیله می‌توان درستی و دقت مدل پیشنهادی را بررسی نمود و این مدل را به اتم‌های چند الکترونی تعمیم داد. بنابراین نیاز است که این نوع برخورد در تمامی محدوده‌های انرژی و کانال‌های مختلف برخورد فرمول‌بندی شود. این اندرکنش در کانال تهییج مستقیم به صورت:

$$A^{q+} + H(n,s) \rightarrow A^{q+} + H(n,l), \quad n > l \quad (1)$$

نمایش داده می‌شود. اندازه‌گیری [۵ - ۱۳] و محاسبات [۱۴ - ۲۰] فراوانی در این زمینه انجام شده است. اکثر کارهای تجربی در محدوده انرژی‌های پایین و میانی در برخورد پروتون با اتم هیدروژن و در گذار از حالت پایه به ترازهای بالاتر، با روش‌های مختلف<sup>۱</sup> در کانال‌های تهییج مستقیم، انتقال بار و یونش انجام گرفته است. در روش‌های نظری و در انرژی‌های میانی از بسط جفت شدگی نزدیک دو مرکزی<sup>۲</sup>، روش وردشی<sup>۳</sup> و روش‌های مبتنی بر نظریه اختلال تعمیم یافته کوانتمی و

۱. Crossed-Beam

۲. Energy loss

۳. TCAO-CC

۴. Variational method

در نظر گرفته شود که در آن تابع ورودی یا خروجی پرتابه و  $\phi_{Te}$  نشان دهنده تابع موج زیر سیستم مقید در حالت اولیه یا نهایی است. در این صورت کانال‌های ورودی و خروجی به ترتیب عبارتند از:

$$\langle \mathbf{r}_P, \mathbf{r}_e | i \rangle = \exp(i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_P) \times \phi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{r}_e), \quad (11)$$

و

$$\langle \mathbf{r}_P, \mathbf{r}_e | f \rangle = \exp(i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{r}_P) \times \phi_{n_f l_f m_f}(\mathbf{r}_e), \quad (12)$$

که  $\mathbf{K}_f$  و  $\mathbf{K}_i$  به ترتیب اندازه حرکت اولیه و نهایی پرتابه در دستگاه مرکز جرم پرتابه و هدف هستند. با این فرض که پتانسیل برهم‌کنش بین پرتابه و الکترون کولنی است و با استفاده از رابطه:

$$\int \frac{\exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}]}{r} d^3 r = \frac{4\pi}{K^2}, \quad (13)$$

جمله مرتبه اول الکترونی دامنه پراکندگی به صورت

$$A_e^{(1)} = \langle f | V_{Pe} | i \rangle = \frac{4\pi}{K^2} \zeta(\mathbf{K}) \quad (14)$$

درمی‌آید که تابع  $\zeta(\mathbf{K})$  به صورت:

$$\zeta(\mathbf{K}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l \langle l_f m_f | Y_{lm} | l_i m_i \rangle \Gamma(K) Y_{lm}^*(\theta_K, \varphi_K), \quad (15)$$

نمایش داده می‌شود. کمیات در رابطه (۱۵) به نوبه خود به صورت:

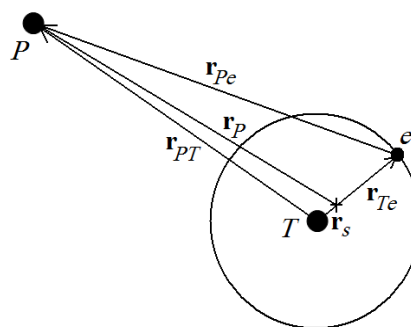
$$\Gamma(K) = \int j_l(Kr) R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) r^2 dr, \quad (16)$$

و

$$\langle l_i m_i | Y_{lm} | l_f m_f \rangle = \frac{(-1)^{m_f}}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{(\nu l_i + 1)(\nu l_i + 1)(\nu l_f + 1)} \times \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ -m_i & m & m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

تعریف می‌شوند. در روابط (۱۵) الی (۱۷)  $Y_{lm}$  ها هارمونیک‌های کروی،  $j_l$  تابع بسل کروی و  $\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}$  به نماد  $3j$  معروف هستند. در تقریب حاضر (بورن-فادیف) از پتانسیل برهم‌کنش به جای عملگر گذار در جمله اول الکترونی استفاده شده است.

به دلیل اینکه گذار از حالت پایه اتم هیدروژن به حالت‌های برانگیخته مورد نظر می‌باشد پس  $l_i = m_i = 0$  بوده و جمله مرتبه اول الکترونی به صورت



شکل ۱. نمایش سیستم سه ذره‌ای در مختصات مرکز جرم پرتابه و هدف، جهت محاسبه دامنه‌های مرتبه اول الکترونی و هسته‌ای.

$$\tau_E = T_{Pe} + T_{PT} \quad (5)$$

مشخص خواهد شد. در محاسبه  $T_{Pe}$  از اولین جمله آن یعنی  $V_{Pe}$  استفاده شده است. بنابراین دامنه گذار مرتبه اول  $A_{FWL}$  به صورت:

$$A_{FWL} = \langle f | \tau_E | i \rangle = \langle f | T_{Pe} | i \rangle + \langle f | T_{PT} | i \rangle = A_e^{(1)} + A_n^{(1)}, \quad (6)$$

در می‌آید.  $V_{Pe}$  و  $T_{PT}$  به ترتیب نماینده برهم‌کنش پرتابه-الکترون و پرتابه-هسته هستند. عملگر گذار دو جسمی که برهم‌کنش ذرات  $x$  و  $y$  را مشخص می‌نماید بر حسب پتانسیل برهم‌کنش،  $V_{xy}$ ، به صورت:

$$T_{xy} = V_{xy} + V_{xy} G_0^+ T_{xy}, \quad (7)$$

نوشته می‌شود که  $G_0^+$  عملگر گرین مربوط به این برهم‌کنش بوده و نمادهای  $|i\rangle$  و  $|f\rangle$  حالت‌های اولیه و نهایی سیستم را توصیف می‌نمایند. ضمناً  $G_0^+$  اطلاعات مربوط به پراکندگی را در خود داراست.

با توجه به شکل ۱ می‌توان هامیلتونی سیستم را به صورت

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{PT}} \nabla_{PT}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_{eT}} \nabla_{eT}^2 + V_{eT} + V_{PT} + V_{Pe} \quad (8)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{PT}} \nabla_{PT}^2 + V_{PT} + V_{Pe} + H_{\text{atom}} \quad (9)$$

نوشت که  $\mu$  جرم کاهش یافته دو جسمی است. در خصوص مختصات ژاکوبی استفاده شده در این مقاله و نحوه تبدیلات آن خواننده را به مطالعه مرجع [۲۲] توصیه می‌نمایم.

اگر تابع موج سیستم در حالت اولیه و نهایی به صورت

$$\psi_{PTe} = \chi_P \times \phi_{Te} \quad (10)$$

برهم کنش‌های کوتاه برد و قوی فشرده است، بنابراین همگرایی جواب را تضمین می‌کند و بنابراین رهیافت مناسبی در پراکندگی‌های هسته‌ای به شمار می‌رود. از مزایای این فرمولبندی این است که چون بر اساس تجزیهٔ برخوردهای سه جسمی بر حسب پراکندگی‌های دو جسمی بنا گردیده دینامیک فرآیند را عملگر گذار دو جسمی بر عهده داشته و در فیزیک اتمی به دلیل بلندبرد بودن پتانسیل کولنی خالی از اشکال نیست و این عملگر گذار روی پوستهٔ انرژی دارای تکینگی است [۲۷]. برای رفع این اشکال خواننده را به مراجع [۲۸ و ۲۹] ارجاع می‌دهیم. همچنین برای آشنایی هر چه بیشتر خواننده با روش فادیف مراجع [۳۰ و ۳۱] را توصیه می‌نماییم. در مورد دامنهٔ مرتبهٔ اول الکترونی توانستیم جواب تحلیلی برای آن به دست آوریم ولی چون این کار در مورد جملهٔ مرتبهٔ اول هسته‌ای محقق نشد لذا در محاسبات عددی انتگرال مربوط به جملهٔ  $T_{PT}$  از روش عددی کوادراتور گاوس در محیط فورترن استفاده شده است.

همان طور که در نمودار شکل‌های ۲ الی ۵ مشاهده می‌شود همخوانی سطح مقطع‌های محاسبه شده در تقریب مرتبهٔ اول الکترونی با افزایش بار الکتریکی یون‌های برهنه حتی در انرژی‌های بالای برخورد با روش جفت شدگی نزدیک کمتر می‌گردد و این اختلاف در انرژی‌های میانی بیشتر به چشم می‌خورد. اختلاف مشاهده شده بیانگر این مطلب است که نیاز است وابستگی سطح مقطع برخورد و دامنه پراکندگی را با کمیت  $Z$  که به نام وابستگی  $Z$  معروف است را بررسی نمود. لازم به ذکر است که در این محاسبات و در مورد اتم‌های مختلف جرم و بار آنها در محاسبات مؤثر بوده و ما اسپین را در مسئله وارد نساخته‌ایم و نوع پتانسیل نیز کولنی است.

محاسبات انجام شده در مورد یون‌های برهنه هیدروژن و هلیوم در انرژی‌های بالا نشان می‌دهند که همخوانی بسیار خوبی با روش جفت شدگی نزدیک وجود دارد ولی در انرژی‌های میانی اختلاف نتایج برای یون برهنه هلیوم افزایش می‌یابد. در مورد یون‌های برهنه لیتیم و بریلیم حتی در انرژی‌های بالا نیز همخوانی کاهش یافته و در انرژی‌های میانی اختلاف با نتایج کار

$$A_e^{(1)} = \frac{\lambda\pi^{3/2}}{K^2} i^{(l_f + 2m_f)} Y_{l_f m_f}(\theta_K, \varphi_K) \Gamma(K) \quad (18)$$

نوشته خواهد شد. برای محاسبهٔ دامنهٔ مرتبهٔ اول هسته‌ای از عملگر گذار کولنی نزدیک پوستهٔ انرژی استفاده شده است. شکل ساده شدهٔ این دامنه به صورت [۲۳]

$$A_n^{(1)} = \int d\mathbf{k}_i \tilde{\phi}_f^*(\mathbf{k}_i - \alpha' \mathbf{K}_i + \alpha' \mathbf{K}_f) \tilde{\phi}_i(\mathbf{k}_i) \times T_{PT}(\mathbf{U}_i + \mathbf{K}_f + \mathbf{K}_i, \mathbf{U}_i; E_n) \quad (19)$$

است به طوری که

$$\mathbf{U}_i = \gamma' \mathbf{k}_i + (1 - \alpha' \gamma') \mathbf{K}_i, \quad (20)$$

$$E_n = E - \frac{(\mathbf{k}_i - \alpha' \mathbf{K}_i)^2}{2\nu_n}, \quad (21)$$

$$\alpha' = \frac{m}{(m + M_T)}, \quad (22)$$

$$\nu_n = \frac{m(M_T + M_P)}{m + M_T + M_P}, \quad (23)$$

و

$$\gamma' = \frac{M_P}{M_P + M_T}, \quad (24)$$

می‌باشند. برای ساده‌تر شدن محاسبات از نسبت‌های  $\frac{m}{M_P}$  و  $\frac{m}{M_T}$  صرف نظر کرده‌ایم.

عملگر گذار دو جسمی استفاده شده در محاسبات برای پتانسیل کولنی با بار مجانبی  $Z^a$  به صورت [۲۴]:

$$T(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) = -2\pi Q(Z^a, \mathbf{k}, \varepsilon) Q(Z^a, \mathbf{k}', \varepsilon) f_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^C(\varepsilon) \quad (25)$$

تقریب زده می‌شود به طوری که

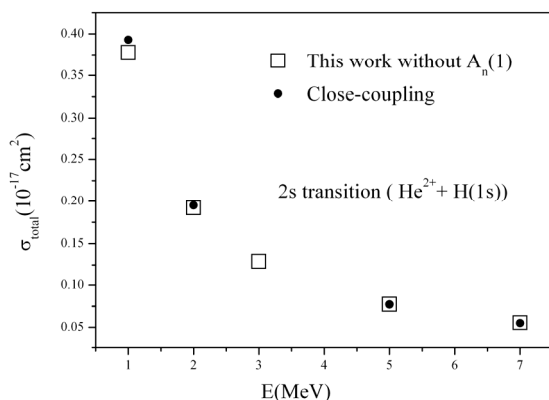
$$Q(Z^a, \mathbf{k}, \varepsilon) = e^{\pi\nu^a/2} \Gamma(1 + i\nu^a) \left[ \frac{(\nu\mu\varepsilon - k^2)}{\lambda\mu\varepsilon} \right]^{-i\nu^a}, \quad (26)$$

و

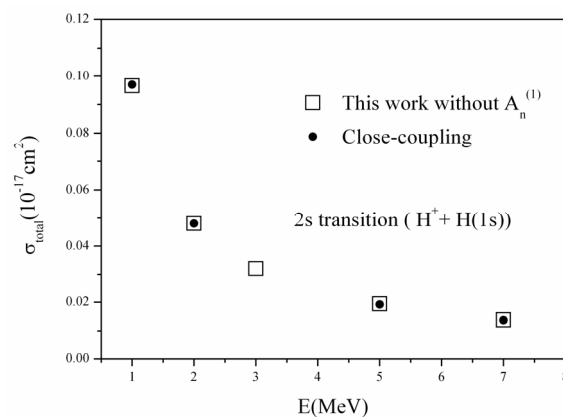
$$f_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^C(\varepsilon) = 2Ze^{i\sigma} (\lambda\mu\varepsilon)^{-i\nu} |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^{-\nu + 2i\nu}, \quad (27)$$

می‌باشد. کمیات  $\mu$  و  $\nu$  به ترتیب نشانگر جرم کاهش یافته و پارامتر زومرفیلد است. این پارامتر در انرژی‌های بالا به صورت  $Z/v$  ظاهر می‌شود. ( $v$  سرعت نسبی دو ذره نسبت به هم می‌باشد).

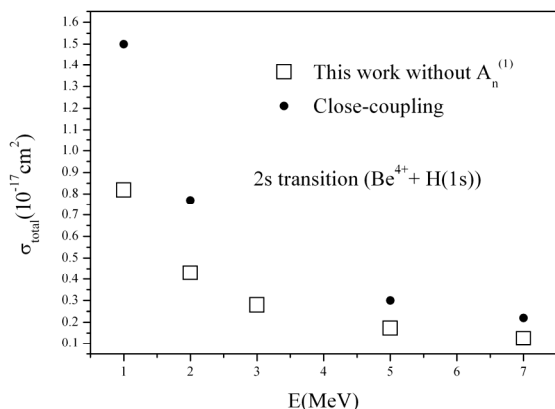
در برخورد با انرژی بالا می‌توان از روش‌های اختلالی برای حل مسئله سه جسمی بهره گرفت [۲۵] ولی همگرایی جواب در استفاده از چنین روشی برای این نوع برخوردها هنوز جای بحث دارد [۲۶]. از آنجایی که هستهٔ معادلهٔ انتگرالی فادیف در مورد



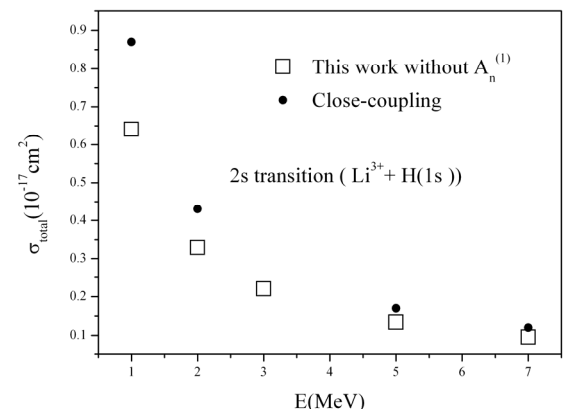
شکل ۳. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش در برخورد یون برهنه هلیوم با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۲s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].



شکل ۴. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش در برخورد پروتون با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۲s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].



شکل ۵. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش در برخورد یون برهنه برلیوم با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۲s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].



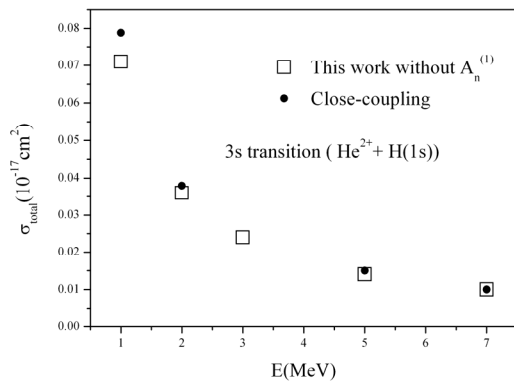
شکل ۶. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش در برخورد یون برهنه لیتیوم با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۲s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].

صورت امواج واپیچیده کولنی با شرایط مرزی مطلوب جواب را می‌تواند بهبود بخشد.

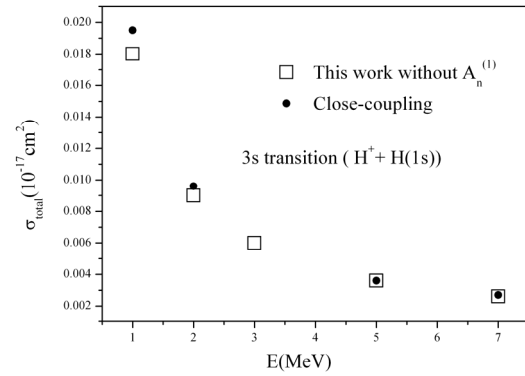
در شکل‌های ۱۰ الی ۱۲ جمله اول مرتبه اول برهم‌کنش هسته‌ای را به جمله اول الکترونی اضافه نموده‌ایم. همان‌طور که مشاهده می‌گردد همخوانی منحنی‌ها خصوصاً در انرژی‌های بالا بهبود بخشیده شده ولی لازم به ذکر است گفته شود که به دلیل خوش تعریف نبودن عملگر گذار دو جسمی استفاده شده در محاسبات، در زوایای نزدیک به صفر پراکندگی نتایج سطح

نظریه جفت شدگی نزدیک بیشتر می‌گردد.

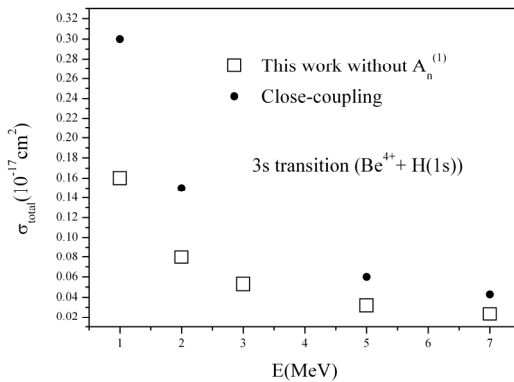
به نظر می‌رسد که در گذار از حالت پایه به ترازهای بالاتر (۳s) که در شکل‌های ۶ الی ۹ مشاهده می‌شوند، همخوانی نتایج با جفت شدگی نزدیک حتی در مورد یون برهنه هلیوم نیز کاهش می‌یابد و این نشان می‌دهد که در محاسبات انجام شده به ترازهای بالاتر در کانال تهییج، پتانسیل برهم‌کنش جمله مناسبی نیست و باید از عملگر گذار مناسب برای حل مجدد مسئله بهره گرفت. همچنین در نظر گرفتن امواج تخت به



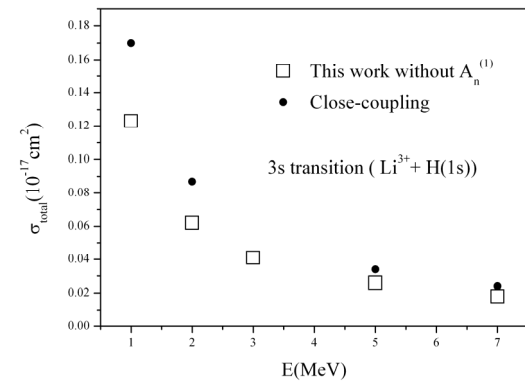
شکل ۷. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش در برخورد یون برهنه هلیوم با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۳s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].



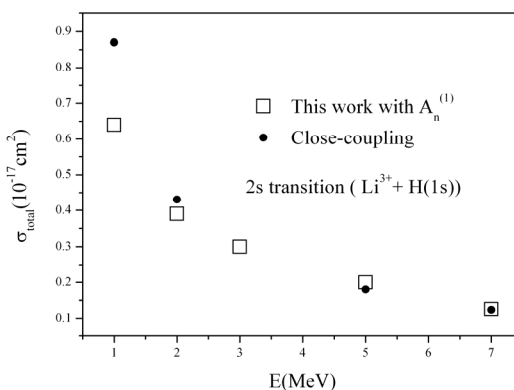
شکل ۶. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش در برخورد پروتون با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۳s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].



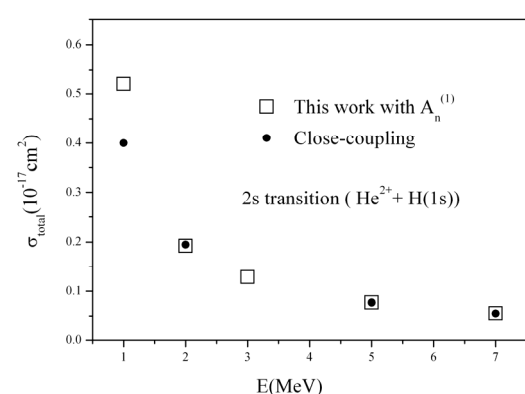
شکل ۹. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش در برخورد یون برهنه بeryllium با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۳s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].



شکل ۸. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش در برخورد یون برهنه لیتیوم با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۳s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].



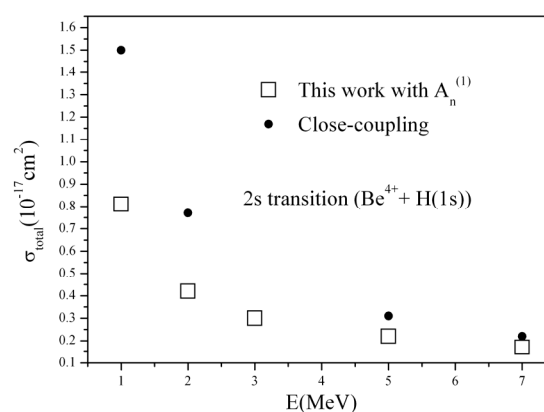
شکل ۱۱. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش و دامنه مرتبه اول هسته‌ای در برخورد یون برهنه لیتیوم با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۲s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].



شکل ۱۰. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش و دامنه مرتبه اول هسته‌ای در برخورد یون برهنه هلیوم با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۲s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].

جفت شدگی نزدیک بسیار بزرگتر محاسبه شود. بنابراین انتظار داریم که با در دست داشتن عملگر گذار مناسب که در زوایای نزدیک به صفر پراکندگی خوش تعریف باشد و تکرار محاسبات، نتایج بهتری را شاهد باشیم. هرچند با محاسبات انجام شده تقریباً یقین داریم که در محدوده انرژی مورد بحث می‌بایست دامنه‌های مرتبه دوم و بالاتر کوچک باشند و به دلیل مشاهده نشدن مکانیسم توماس در تقریب مرتبه دوم کانال تهییج برخلاف کانال انتقال بار الکتریکی این تقریب در سطح مقطع کل مؤثر نخواهد بود. در نظر گرفتن پتانسیل برهم‌کنش در تقریب مرتبه اول هسته‌ای به دلیل تعامد توابع موج به کار رفته در محاسبات منجر به عدد صفر برای پتانسیل کولنی خواهد شد.

لازم به ذکر است که مرجع مقایسه نتایج کار مورد نظر یعنی جفت شدگی نزدیک تک مرکزی<sup>۱</sup> به عنوان یکی از روش‌های معتبر در مبحث پراکندگی و در محدوده انرژی‌های مورد بحث مطرح می‌باشد و از طرفی جدیدترین منبع نظری در دسترس برای مقایسه نتایج بوده است.



شکل ۱۲. سطح مقطع کل محاسبه شده در تقریب مرتبه اول الکترونی با پتانسیل برهم‌کنش و دامنه مرتبه اول هسته‌ای در برخورد یون برهنه بریلیوم با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت ۲s و مقایسه آن با نتایج به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک [۲۰].

مقطع دیفرانسیلی که منجر به محاسبه سطح مقطع کل گردیده از زوایای پراکندگی بزرگتر از  $2 \times 10^{-5}$  رادیان در نظر گرفته شده است. چون در زوایای کوچکتر از این مقدار، دامنه پراکندگی مرتبه اول هسته‌ای و به تبع آن سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به این جمله بسیار بزرگ می‌شود که منطقی به نظر نمی‌رسد. این امر سبب می‌گردد که سطح مقطع کل در مقایسه با روش

13. R McCarroll, *Proc. R. Soc. A* **264** (1961) 547.
14. D F Gallaher and L Wilets, *Phys. Rev.* **169** (1968) 139.
15. E Fitchard, A.L Ford, and J F Reading, *Phys. Rev. A* **16** (1977) 1325.
16. Ermoleav, *J. Phys. B* **24** (1991) L496.
17. Y Kuang and C D Lin, *J. Phys. B* **29** (1996) 1207.
18. R Tantawi and A S Sabbah, *Chin. Phys. Soc.* **11** (2002) 1259.
19. B Larsi, M Bouamoud, and R Gayet, *Nucl Instrum. Method. B* **251** (2006) 66.
20. L F Errea, L Mendez, B Pons, A Riera, I Sevilla, and J Suarez, *Phys. Rev. A* **74** (2006) 012722-1.
21. C J Joachain, "Quantum collision theory", North-Holland, Amsterdam (1975).
22. S Alston, *Phys. Rev. A* **42** (1989) 331.
23. R Fathi, E Ghanbari-Adivi, M A Bolorizadeh, F Shojaei and M J Brunger, *J. Phys. B* **42** (2009) 125203.

1. R P Mildern, D J W Brown and J A Piper, *J. Appl. Phys.* **82** (1997) 2039.
2. H P Summers, et al., *Plasma. Phys. Control. Fusion* **44** (2002) B323.
3. R K Smith, N S Brickhouse, D A Liedahl, and J C Raymond, *Astrophys. J.* **556** (2001) L91.
4. C Balanca, C D Lin, and N Feautrier, *J. Phys. B* **31** (1998) 2321.
5. W L Fite, R F Stebbings, D G Hummer, and R T Brackman, *Phys. Rev.* **119** (1960) 663.
6. H B Gilbody and J V Ireland, *Proc. R. Soc. A* **277** (1963) 137.
7. J E Bayfield, *Phys. Rev.* **185** (1969) 105.
8. Y P Chong and W L Fite, *Phys. Rev. A* **16** (1977) 933.
9. J T Park, *Phys. Rev. A* **21** (1980) 751.
10. K H Scharfner, B Lommel and D Detleffsen, *J. Phys. B* **24** (1991) L13.
11. M P Hughes, J Geddes, R W McCullough and H B Gilbody, *Nucl. Instrum. Method. B* **79** (1992) 50.
12. A Werner and K H Scharfner, *J. Phys. B* **29** (1996) 127.

<sup>۱</sup>. Monocentric close-coupling

29. M J Roberts, *J. Phys. B* **30** (1997) L175.
30. M R C McDowell and J P Coleman, “*Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions*”, North-Holland, Amsterdam (1970).
31. L D Faddeev, “*Mathematical aspects of the three-body problem in the Quantum scattering theory*” Daniel Davey and Co. Inc (1965).
24. S Alston, *Phys. Rev. A* **38** (1988) 636.
25. N F Mott and S W Massey, “*The Theory of Atomic Collision*”, Carendon, Oxford (1965) 146.
26. L D Faddeev, *Sov. Phys. JETP* **12** (1961) 1014.
27. J C Y Chen and A Chen, *Adv. At. Mol. Opt. Phys* **8** (1972) 72.
28. S P Merkurev, *Sov. J. Nucl. Phys* **24** (1976) 150.