

بررسی تشکیل اتم پوزیترونیم از یون مولکول هیدروژن توسط فرمول بندی برخوردهای چندگانه در کانال انتقال بار

سمیه امیری^۱، فریده شجاعی^۱ و رضا فتحی^۱

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

۲. دانشگاه تحصیلات تکمیلی و صنعتی پیشرفته ماهان، کرمان

پست الکترونیکی: Fshojaei@mail.uk.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۳/۱۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۶/۱۰)

چکیده

در کار حاضر به محاسبه دامنه‌های مرتبه اول و دوم پراکندگی و فاز مربوط به آنها در کانال انتقال بار و تشکیل پوزیترونیم، در برخورد پوزیترون با یون مولکول هیدروژن توسط فرمول بندی برخوردهای چندگانه و استفاده از ماتریس گذار پرداخته شده است. محاسبات سطح مقطع دیفرانسیلی با در نظر گرفتن یک جهت ثابت برای مولکول و تغییر زاویه پراکندگی را از صفر تا ۱۸۰ درجه انجام شده است. در محاسبات دیگری زاویه پراکندگی ثابت در نظر گرفته شده و سمت گیری مولکول در فضا تغییر داده شده است. در نهایت سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده با نتایج قابل دسترس مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: دامنه پراکندگی، پوزیترونیم، یون مولکول هیدروژن، زاویه پراکندگی

۱. مقدمه

برخوردار است. کارهای نظری انجام گرفته بر روی ربایش الکترون از هدف‌های مولکولی به دلیل پیچیدگی‌های کار با توابع موج مولکول‌های هدف، وابستگی سطح مقطع برخورد به جهت گیری مولکول، تعداد ذرات برهم کنش کننده درگیر، در مقایسه با موارد مربوط به هدف‌های اتمی کمتر است. با این وجود در زمینه دستگاه‌های مولکولی می‌توان به کارهای توان و جرجوی [۳]، چنگ [۴]، دب [۵] و آلستون [۶] اشاره نمود. به

نتایج مربوط به سطح مقطع پراکندگی در تمامی حوزه‌های فیزیکی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، این نتایج در فیزیک نجوم، فیزیک پلاسما، فیزیک اتمسفری بالا، جداسازی ایزوتوپ‌ها در فیزیک تشعشع و تخلیه الکتریکی [۱ و ۲] کاربرد دارد. از میان تمامی فرآیندهای ممکن در مبحث برهم کنش یون-اتم و یون-مولکول فرآیند ربایش از اهمیت ویژه‌ای

بر حسب سری پراکندگی چندگانه به شکل:

$$\dagger_R = V_{Pe} + T_{PT} + T_{Te}G_0^+(E)T_{Pe}, \quad (3)$$

$$+ T_{Te}G_0^+(E)T_{PT} + T_{PT}G_0^+(E)T_{Pe},$$

است. که در آن T_{ij} ماتریس گذار دو جسمی و V_{ij} پتانسیل برهم کنش بین ذرات i و j می باشد. عملگر گرین انتشار آزاد $G_0^+(E)$ در فضای اندازه حرکت به صورت ترکیب خطی از اندازه حرکتها تقریب زده می شود و شرایط اعمال شده بر روی موج خروجی را در بر دارد.

با جانشین نمودن رابطه (۳) در رابطه (۲) برای دامنه پراکندگی رابطه

$$A_{FWL} = \langle f | T_R | i \rangle = \langle f | V_{Pe} | i \rangle + \langle f | T_{Te}G_0^+(E)T_{Pe} | i \rangle + \langle f | T_{PT} | i \rangle + \langle f | T_{Te}G_0^+(E)T_{PT} | i \rangle + \langle f | T_{PT}G_0^+(E)T_{Pe} | i \rangle = A_B + A_n, \quad (4)$$

بدست می آید. دو جمله اول رابطه (۴) که با A_B نشان داده شده مربوط به پراکندگی مستقیم الکترون می باشد، و دامنه پراکندگی هسته- الکترونی نامیده می شود

$$A_n = \underbrace{\langle f | V_{Pe} | i \rangle}_{A_{B_1}} + \underbrace{\langle f | T_{Te}G_0^+(E)T_{Pe} | i \rangle}_{A_e^{(n)}} \quad (5)$$

عبارت اول در A_B دامنه جزئی تقریب اول بورن (A_{B_1}) و عبارت دوم دامنه جزئی مرتبه دوم ($A_e^{(n)}$) را نشان می دهد. سه جمله دیگر دامنه پراکندگی A_{FWL} با A_n نشان داده شده که مربوط به پراکندگی غیر مستقیم الکترون می باشد، و به آن دامنه پراکندگی بین هسته ای گفته می شود. اولین جمله پراکندگی هسته ای ($A_{PT}^{(n)}$) برهم کنش بین P و T را در بردارد. در دومین جمله ($A_T^{(n)}$) ابتدا P و T و سپس e با هم برهم کنش می کنند و آخرین جمله ($A_P^{(n)}$) نشانگر پراکندگی است که ابتدا T و سپس P و e با هم برهم کنش می نمایند.

$$A_n = \underbrace{\langle f | T_{PT} | i \rangle}_{A_{PT}^{(n)}} + \underbrace{\langle f | T_{Te}G_0^+(E)T_{PT} | i \rangle}_{A_T^{(n)}} + \underbrace{\langle f | T_{PT}G_0^+(E)T_{Pe} | i \rangle}_{A_P^{(n)}}, \quad (6)$$

دلیل ناشناخته بودن پتانسیل دقیق برهم کنش و وابسته بودن آن به جهت گیری مولکول محاسبات پراکندگی الکترون [۷] یا پوزیترون با مولکولها، بسیار پیچیده تر از محاسبات متناظر با پراکندگی با اتم های تک الکترونی یا چند الکترونی است. از جمله کارهای نظری انجام شده در این خصوص می توان به پراکندگی پوزیترون بامولکولهای، مانند H_2 و N_2 به عنوان نمونه ای از دستگاه های پیچیده اشاره کرد [۸-۱۰].

ساده ترین دستگاه مولکولی یون مولکول هیدروژن است که پراکندگی الکترون [۹] و پوزیترون [۱۰] با این یون گزارش شده است. در این مقاله به محاسبه سطح مقطع ربایش الکترون از برخورد پوزیترون با یون مولکول هیدروژن پرداخته شده است.

۲. نظریه

در فرآیند ربایش الکترون که نوعی فرآیند بازچینی است، فرض شده است که ذرات برخورد کننده، فاقد ساختار داخلی بوده و یا حداقل ساختار داخلی آنها در طول برخورد تغییر نکند. همچنین هم در کانال اولیه و هم در کانال خروجی برهم کنش بین ذرات با پتانسیل کولونی و با بار مؤثر انجام می گیرد. لذا فرض می کنیم که پوزیترون، به عنوان پرتابه P با جرم M_P و بار Z_P روی دستگاهی فرود می آید که در آن الکترون فعال e با جرم m و بار Z_e ، به هدف با جرم M_T و بار Z_T مقید است. پس از برخورد، الکترون توسط پرتابه ربوده شده و در نتیجه دستگاه مقید $(P+e)$ را تشکیل می دهد و ذره سوم به صورت یک ذره آزاد حرکت می کند. در اینجا فرض شده است که تنها الکترون هدف الکترون فعال بوده و با در نظر گرفتن مدل الکترون مستقل فرآیند بازچینی بررسی شده است

$$P + (T + e) \rightarrow T + (P + e). \quad (1)$$

دستگاه مقید $(T + e)$ می تواند در حالت زمینه یا یکی از حالت های برانگیخته خود باشد. برای عملگر متناظر با کانال خروجی فرآیند بازچینی، دامنه پراکندگی فادیف- واتسون- لویس (A_{FWL}) به صورت:

$$A_{FWL} = \langle f | \dagger_R | i \rangle \quad (2)$$

تعریف می شود [۱۱]. \dagger_R عملگر گذار متناظر با کانال خروجی

$$\vec{J} = r \vec{K}_i - \vec{K}_f, \quad (13)$$

تعریف می‌شوند. r و S نسبت‌های جرمی هستند

$$r = \frac{M_T}{(m + M_T)}, \quad S = \frac{M_P}{(m + M_P)}, \quad (14)$$

و v_f و V_f به ترتیب انرژی قیدی دستگاه مقید و سرعت ذره آزاد در کانال نهایی بوده، همچنین انرژی‌های اولیه و نهایی در روابط (۹) و (۱۰) به صورت:

$$E_f = E - \frac{1}{\epsilon_f} (-\vec{k}_f + S \vec{K}_f)^2 \\ = \frac{1}{\epsilon_f} K_f^2 + v_f - \frac{1}{\epsilon_i} (-\vec{k}_f + S \vec{K}_f)^2, \quad (15)$$

$$E_i = E - \frac{1}{\epsilon_f} (\vec{k}_i + r \vec{K}_i)^2 \\ = \frac{1}{\epsilon_i} K_i^2 + v_i - \frac{1}{\epsilon_f} (\vec{k}_i + r \vec{K}_i)^2, \quad (16)$$

تعریف می‌شوند. دو کمیت ϵ_f و ϵ_i جرم‌های کاهش یافته در کانال اولیه و نهایی بوده و به صورت

$$\epsilon_i = \frac{M_P(m + M_T)}{m + M_T + M_P}, \quad \epsilon_f = \frac{M_T(m + M_P)}{m + M_T + M_P}, \quad (17)$$

تعریف می‌شوند. تابع موج اولیه در کانال اولیه به صورت

$$\langle E_i(\vec{k}, \vec{R}_T) = \{i(\vec{k}) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{R}_T}, \quad (18)$$

تعریف می‌شود، که در آن $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{R}_T}$ تابع موج ذره آزاد بوده و به شکل موج تخت در نظر گرفته می‌شود. بردار موقعیت پوزیترون نسبت به مرکز جرم دستگاه مقید در کانال اولیه است. ترکیب خطی از توابع پایه اتم هیدروژن در فضای اندازه حرکت، به شکل حاصل ضرب دو قسمت شعاعی و زاویه‌ای به صورت

$$\{i(\vec{k}) = N \left(e^{\frac{i\vec{k} \cdot R}{2}} + e^{-\frac{i\vec{k} \cdot R}{2}} \right) \frac{\sqrt{2^3 Z_T^5}}{f} \frac{1}{(k^2 + Z_T^2)^2} \\ = R_{100}(\vec{k}) Y_{00}(\vec{k}), \quad (19)$$

در نظر گرفته می‌شود، که در آن \vec{R} بردار فاصله بین مولکولی و ثابت بهنجارش می‌باشد

$$N = \frac{1}{\sqrt{2 + 2e^{-Z_T R} \left(1 + Z_T R + \frac{(Z_T R)^2}{3} \right)}}$$

بیان رهیافت مدل ارائه شده در کار انجام شده، دو جمله متعلق به دامنه A_B و اولین جمله A_n محاسبه شده‌اند، از آنجا که هدف نسبت به پرتابه هسته سنگین بوده، دو جمله آخر A_n ، بدلیل درگیر بودن برهم‌کنش پرتابه و الکترون با هسته‌ها، جملات کوچکی می‌باشند، که از قرار دادن آنها در محاسبات صرف‌نظر شده است. در محاسبه دامنه‌ها از ماتریس‌های گذار کولنی دو جسمی T_{Pe} ، T_{Te} ، T_{PT} بهره گرفته شده است و شکل کلی ماتریس گذار کولنی نزدیک پوسته انرژی از مقاله آستون [۱۴] گرفته شده است.

در این کار فرایند بازچینی برخورد پوزیترون با یون مولکول هیدروژن مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. این فرایند به صورت



نمایش داده می‌شود که حاصل این فرایند تشکیل پوزیترونیم ($e^+ e^-$) یا (Ps) می‌باشد.

برای فرایند در نظر گرفته شده شکل انتگرالی دامنه‌های جزئی تقریب مرتبه اول بورن، تقریب مرتبه دوم، اولین جمله پراکندگی بین هسته‌ای و تابع گرین انتشار ذره آزاد به ترتیب به صورت:

$$A_{B1} = (2f)^{3/2} \{i(-J) \int d\vec{k}_f \{f(\vec{k}_f) V_{Pe}(\vec{k}_f - \vec{K})\}, \quad (8)$$

$$A_e^{(2)} = (2f)^{-3} \int d\vec{k}_f d\vec{k}_i \{f(\vec{k}_f) \}^* \{i(\vec{k}_i) T_{Te}, \\ (\vec{k}_f + \frac{\vec{K}_f}{\gamma}, \vec{k}_i + \vec{k}_f - \vec{K}; E_f) \quad (9)$$

$$\times G_0^{(+)}(E_i) T_{Pe}(\vec{k}_f + \frac{1}{\gamma} \vec{k}_i + \frac{1}{\gamma} \vec{J}, \frac{1}{\gamma} \vec{k}_i - \frac{1}{\gamma} \vec{K}_i; E_i),$$

$$A_{PT}^{(1)} = \int d\vec{k}_i \{f(\vec{k}_i - \frac{\vec{K}_f}{\gamma}) \}^* \{i(\vec{k}_i) T_{PT}(\vec{K}_i, \vec{K}_f - \vec{k}_i; E_i), \quad (10)$$

$$G_0^{(+)}(E) = \left[\frac{v_f}{\gamma} - k^2 + 2v_f + \vec{K} \cdot \vec{k}_i - \vec{J} \cdot \vec{k}_f + i\gamma \right]^{-1}, \quad \gamma \rightarrow 0 \quad (11)$$

نوشته می‌شوند. در روابط (۸) تا (۱۱)، \vec{K}_f ، \vec{K}_i ، به ترتیب بردار موج ذرات سنگین اولیه و نهایی و \vec{k}_f ، \vec{k}_i به ترتیب بردار اندازه حرکت الکترون در حالت مقید اولیه و نهایی هستند. \vec{J} ، \vec{K} به ترتیب تکانه انتقال یافته به یون‌های هدف و پرتابه در طول برخورد بوده و به صورت

$$\vec{K} = S \vec{K}_f - \vec{K}_i, \quad (12)$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega_R d\Omega}\right)_{lab} = \left(1 + \frac{M_P}{M_T}\right)^2 \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega_R d\Omega}\right)_{cm} \quad (23)$$

به دست می‌آید، که به سطح مقطع جزئی دوگانه در دستگاه مرکز جرم وابسته می‌شود. با انتگرال‌گیری از سطح مقطع جزئی دوگانه به صورت تابعی از زاویه پراکندگی سطح مقطع جزئی وابسته به جهت‌گیری مولکول به دست می‌آید

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_R} = \int_0^f d_n \sin(\theta) \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega_R d\Omega}\right)_{Lab} \quad (24)$$

محاسبه دامنه‌های جزئی:

برای محاسبه دامنه تقریب مرتبه اول بورن ابتدا پتانسیل برهم‌کنش بین دو جسم V_{pe} (پرتابه و الکترون آزاد) به انتگرال‌ده رابطه (۸) اعمال می‌شود.

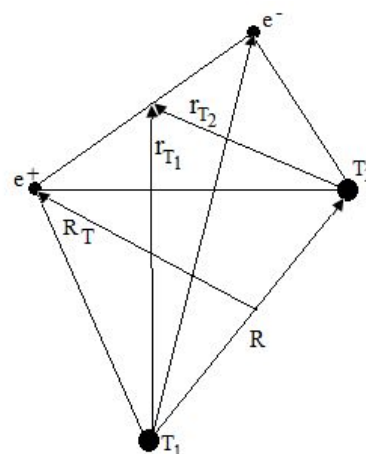
$$A_{B1} = -(2f)^{3/2} \{i(-J)\} \int d\vec{k}_f \{f(\vec{k}_f)\} \frac{Z_p \left(\frac{1}{f}\right)^{1/2}}{(\vec{k}_f - \vec{K})^2} \quad (25)$$

سپس با وارد نمودن تابع موج نهایی، انتگرال را می‌توان به راحتی محاسبه نمود.

برای محاسبه دومین دامنه جزئی، روابط مربوط به ماتریس گذار بین دو جسم پرتابه و الکترون و هدف و الکترون و تابع گرین را به انتگرال‌ده رابطه (۹) وارد نموده و بعد از ساده سازی به شکل

$$A_e^{(2)} = B \int dx x^{\epsilon} P_e^a + \epsilon T_e^a e^{ibx} \int d\vec{k}_f \{f(\vec{k}_f)\}^* \left[v_f - k_f \right]^{-\epsilon} T_e^a e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{J}x} \left(\frac{1}{4} v_f^2 + v_f - \frac{1}{4} k_f^2 \right)^{\epsilon} T_e^a \times \left\{ \frac{2Z_T Z_e}{(\lambda - T_e \left(\frac{1}{4} v_f^2 + v_f - \frac{1}{4} k_f^2 \right))^{-\epsilon} T_e} \times |\vec{J}|^{-2} + 2\epsilon T_e + \frac{\epsilon_i V_i e^{iu_0} \times \sin u_0}{|\vec{K}| \times |\vec{V}_f|} \right\} \times \int d\vec{k}_i \{i(\vec{k}_i)\} [v_i - \frac{k_i^2}{4}]^{-\epsilon} P_e^a e^{+i\vec{k}_i \cdot \vec{K}x} (v_i^2 + v_i - k_i^2)^{\epsilon} P_e^a + \epsilon P_e^a \quad (26)$$

در می‌آید که در آن ضریب B و کمیت b عبارت است از:



شکل ۱. مختصات استفاده شده در متن.

به طور مشابه تابع موج در کانال نهایی به صورت

$$\mathbb{E}_f(\vec{k}, \vec{r}_{T_1}, \vec{r}_{T_2}) = \{f(\vec{k})\} e^{i\vec{k}_i \cdot (\vec{r}_{T_1} + \vec{r}_{T_2})} \quad (20)$$

بوده، که در آن $\{f(\vec{k})\}$ تابع موج نهایی اتم پوزیترونیم در فضای اندازه حرکت به صورت

$$\{f(\vec{k})\} = \frac{1}{2f} \frac{1}{\left(k^2 + \frac{1}{4}\right)^2} \quad (21)$$

است و دو پروتون باقی مانده در کانال نهایی به صورت دو موج تخت در نظر گرفته شده‌اند. \vec{r}_{T_1} و \vec{r}_{T_2} بردار موقعیت دو پروتون باقی مانده در کانال نهایی نسبت به مرکز جرم پوزیترونیم تشکیل شده در کانال نهایی است. هندسه موقعیت بردارهای تعریف شده در روابط (۱۸) تا (۲۰) در شکل ۱ نمایش داده شده است.

با معلوم بودن دامنه‌های پراکندگی جزئی و محاسبه دامنه پراکندگی، می‌توان سطح مقطع جزئی دوگانه^۱ برخورد را در دستگاه مرکز جرم تعیین نمود

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\Omega_R}\right)_{cm} = \frac{\epsilon_i \epsilon_f K_f}{16f^3 K_i} |A_{FWL}|^2 \quad (22)$$

دو پارامتر $\Omega_R(\{R\})$ و $\Omega(\{R\})$ به ترتیب زاویه فضایی مربوط به سمت‌گیری مولکول و سمت‌گیری زاویه پراکندگی نسبت به جهت فرودی پرتابه می‌باشند.

سطح مقطع جزئی دوگانه برخورد در چارچوب آزمایشگاه مطابق رابطه

۱. Double-Differential Cross Section (DDCS)

$$\int_0^\infty dk_i k_i \frac{1}{(k_i^2 + Z_T^2)^2} [V_i - \frac{k_i^2}{2}]^{-\epsilon_{pe}^a} \quad (31)$$

نتیجه می شود، که در آن داریم

$$B_1 = \epsilon N \sqrt{Z_T^2} B, \quad \bar{y}_1 = \bar{K}x + \frac{\bar{R}}{\gamma}, \quad \bar{y}_2 = \bar{K}x - \frac{\bar{R}}{\gamma}. \quad (32)$$

حل تحلیلی انتگرال (۳۱) امکان پذیر نیست، بنابراین روش های عددی مورد استفاده قرار می گیرند. برای انتخاب روش عددی مناسب بایستی به این نکته توجه داشت که رابطه نهایی دارای سه انتگرال می باشد، که یکی از انتگرال ها به نوعی تبدیل فوریه و دو تای دیگر تبدیلات هنکل هستند. هر سه انتگرال توابعی با میرایی سریع هستند. بنابراین با در نظر گرفتن این موارد از روش عددی کلاسیکی مربع سازی گاوسی برای محاسبه این دامنه جزیی استفاده شده است.

در نهایت برای محاسبه اولین دامنه بین هسته ای، در رابطه (۱۰) ماتریس گذار مناسب این دامنه را وارد انتگرال ده می نمایم

$$A_{PT}^{(1)} = A \int d\vec{k}_i \{ \bar{k}_i - \frac{\bar{K}_f}{\gamma} \} \{ \bar{k}_i \} [\Lambda \sim_n E_n]^{i\epsilon_{PT}^a} \times [V_i^2 + 2V_i - 2V_f^2 - 2(\bar{k}_i - \bar{V}_f)^2]^{-\epsilon_{PT}^a} [2V_i - k_i^2]^{-\epsilon_{PT}^a} \times \left\{ \frac{2Z_T Z_P}{(\Lambda \sim_n E_n)^{-\epsilon_{PT}^a}} |\bar{k}_i + \bar{J}|^{-2+\epsilon_{PT}^a} + \frac{\sim_n V_f e^{i\mathbf{u}} \cdot \text{Sin} \mathbf{u}}{|\bar{K}_i \parallel \bar{K}_f - \bar{k}_i|} \right\} \quad (33)$$

ضریب A در رابطه (۳۳) برابر است با:

$$A = \epsilon f \frac{\Gamma(1 - \epsilon_{PT}^a) \Gamma(1 - \epsilon_{PT}^a)}{\Gamma(1 + \epsilon_{PT}^a)} e^{-f\epsilon_{PT}^a} \quad (34)$$

مشاهده می شود که انتگرال (۳۳) دارای دو بیشینه موضعی در مکان های $\bar{k}_i = 0$ و $\bar{k}_i = \frac{\bar{K}_f}{\gamma}$ است و چون این دو بیشینه از هم فاصله زیادی دارند، می توان آنها را از یکدیگر جدا نمود و انتگرال را به دو انتگرال ساده

$$A_{PT}^{(1)} = B_1 \int d\vec{k}_i \{ \bar{k}_i \} [2V_i - k_i^2]^{-i\epsilon_{PT}^a} + B_2 \int d\vec{k}_i \{ \bar{k}_i - \frac{\bar{K}_f}{\gamma} \} [V_i^2 + 2V_i - 2V_f^2 - 2(\bar{k}_i - \bar{V}_f)^2]^{-i\epsilon_{PT}^a} \quad (35)$$

$$B = \frac{(i)^{-1-i\epsilon_{pe}^a - i\epsilon_{Te}^a}}{\Gamma(1 + \epsilon_{pe}^a + \epsilon_{Te}^a)} (\epsilon f)^2 e^{-f\epsilon_{pe}^a} e^{-f\epsilon_{Te}^a} \frac{\Gamma(1 - \epsilon_{Te}^a) \Gamma(1 - \epsilon_{Te}^a) \Gamma(1 - \epsilon_{pe}^a) \Gamma(1 - \epsilon_{pe}^a)}{\Gamma(1 + \epsilon_{Te}^a) \Gamma(1 + \epsilon_{pe}^a)} \quad (27)$$

$$\times 2Z_P Z_e (\epsilon)^{2\epsilon_{Te}^a + 2\epsilon_{pe}^a} |\bar{K}|^{-2+2\epsilon_{pe}^a},$$

$$b = V_i^2 + 2V_i - J^2.$$

V_f و V_i به ترتیب انرژی قیدی دستگاه مقید و V_f و V_i به ترتیب سرعت ذره آزاد در کانال اولیه و نهایی و \mathbf{u} جابه جایی فاز بوده که با استفاده از پتانسیل مؤثر که در ضمیمه تعریف شده، محاسبه می شود.

در روابط (۲۶) و (۲۷) پارامترهای زومرفیلد عبارتند از:

$$\epsilon_{pe} = -\frac{Z_P Z_e}{V_i}, \quad \epsilon_{Te} = -\frac{Z_T Z_e}{V_f}, \quad (28)$$

$$\epsilon_{pe}^a = -\frac{Z_P Z_e^a}{V_i}, \quad \epsilon_{Te}^a = -\frac{Z_T Z_e^a}{V_f},$$

که در آن Z_e^a و Z_T^a و Z_P^a به ترتیب بار مؤثر پرتابه، هدف و الکترون می باشند. انتگرال (۲۶) شش بعدی و پیچیده بوده و دارای تکنیکی هایی در فضای مختلط است، بنابراین برای محاسبه آن بایستی دقت نمود. در مرحله اول بسط جملات نمایی بر حسب توابع هماهنگ کروی و توابع بسل نوع اول

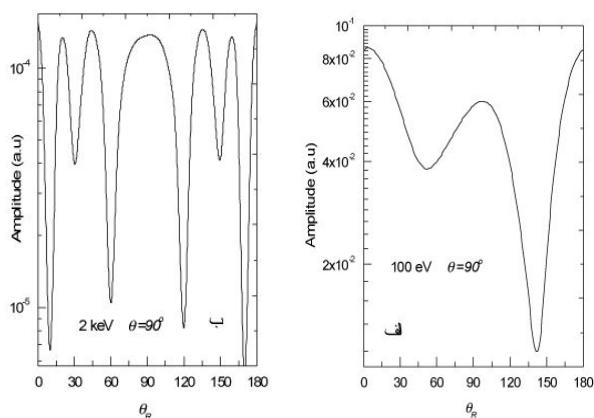
$$e^{ik.r} = \epsilon f \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(r), \quad (29)$$

شرط تعامد توابع هماهنگ کروی:

$$\int d\hat{k} Y_{lm}(\hat{k}) Y_{l'm'}^*(\hat{k}) = \mathbf{u}_{ll'} \mathbf{u}_{mm'}, \quad (30)$$

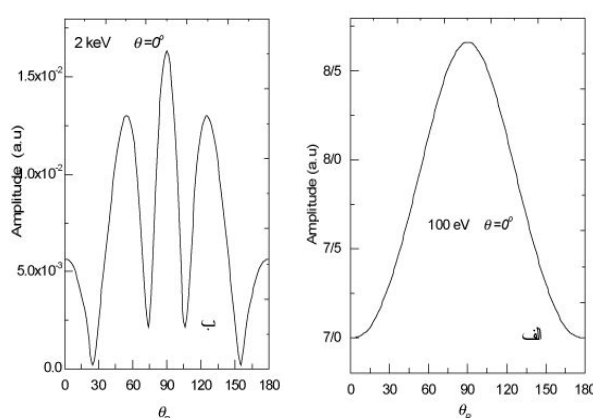
به رابطه اعمال نموده، و در نهایت رابطه

$$A_e^{(2)} = B_1 \int dx x^{\epsilon_{pe}^a + \epsilon_{Te}^a} e^{ibx} \int_0^\infty dk_f k_f \frac{1}{(k_f^2 + \frac{1}{\gamma})^2} [V_f - k_f^2]^{-\epsilon_{Te}^a} (\frac{1}{\gamma} V_f^2 + V_f - \frac{1}{\gamma} k_f^2)^{i\epsilon_{Te}^a} \times \left\{ \frac{2Z_T Z_e}{(\Lambda - T_e (\frac{1}{\gamma} V_f^2 + V_f - \frac{1}{\gamma} k_f^2))^{-\epsilon_{Te}^a}} \times \left[\bar{J} \right]^{-2+2\epsilon_{Te}^a} + \frac{\epsilon_i V_i e^{i\mathbf{u}} \cdot \text{sin} \mathbf{u}}{|\bar{K} \parallel \bar{V}_f|} \right\} j_0(k_f Jx)$$



شکل ۳. دامنه پراکندگی ربایش الکترون در تشکیل پوزیترونیم، از یون مولکول هیدروژن بر حسب جهت گیری مولکول، در $\theta = 90^\circ$. (الف) انرژی ۱۰۰ الکترون ولت، (ب) ۲۰۰۰ الکترون ولت.

است. این فرایند مشابه پدیده تداخل یانگ می باشد. دو هسته مولکول همانند دو شکاف یانگ عمل کرده و آثار تداخلی ایجاد شده در نمودار مشاهده می شود. شکل ۳ همانند شکل ۲ است، اما زاویه پراکندگی 90° درجه ($\theta = 90^\circ$) در نظر گرفته شده است. در این حالت نیز برای انرژی ۲ کیلو الکترون ولت تقارن نسبت به زاویه جهت گیری مولکول دیده می شود و در زاویه 90° درجه دامنه بیشینه می باشد. این نکته را بایستی در نظر گرفت که فاصله بین هسته ها $1/06$ آنگستروم می باشد و در انرژی ۱۰۰ الکترون ولت طول موج برابر با $1/22$ آنگستروم و برای انرژی ۲ کیلو الکترون ولت طول موج برابر با $0/66$ آنگستروم می باشد، از این رو هر چه انرژی بالاتر می رود نسبت طول موج به فاصله جدایی بین هسته های بیشتر شده و از این رو تعداد نوسانات افزایش می یابد. این موضوع را به خوبی نمودارها نشان می دهند. در شکل ۴ فاز این دامنه ها رسم شده است، مشاهده بیشینه و کمینه ها در اثر بالا رفتن انرژی در نمودار فاز نشان گر اثرات تداخلی است. در شکل ۵ سطح مقطع جزیی ربایش الکترون در تشکیل پوزیترونیم بر حسب جهت گیری مولکول (R) با انرژی های فرودی ۱۰۰ الکترون ولت و ۲۰۰۰ الکترون ولت برای زاویه پراکندگی ثابت $\theta = 90^\circ$ با استفاده از رهیافت ماتریس گذار رسم شده است. همان طور که انتظار می رود، سطح مقطع دیفرانسیلی در انرژی ۱۰۰ الکترون



شکل ۴. دامنه پراکندگی ربایش الکترون در تشکیل پوزیترونیم، از یون مولکول هیدروژن بر حسب جهت گیری مولکول، در $\theta = 0^\circ$. (الف) انرژی ۱۰۰ الکترون ولت، (ب) ۲۰۰۰ الکترون ولت.

تبدیل نمود. ضرایب B_1 و B_2 عبارتند از:

$$B_1 = A \{ f^* (-\vec{V}_f) [\lambda - n (\frac{1}{\psi} K_i^2 + V_i)] \}^{2i\epsilon_{PT}} [V_i^2 + 2V_i - 2V_f^2]^{-i\epsilon_{PT}}$$

$$\left\{ \frac{2Z_T Z_P}{(\lambda - n (\frac{1}{\psi} K_i^2 + V_i))^{-i\epsilon_{PT}}} |\vec{J}|^{-2+2i\epsilon_{PT}} + \frac{\sim_n V_f e^{iU} \text{Sin}u}{|\vec{K}_i| |\vec{K}_f|} \right\}$$

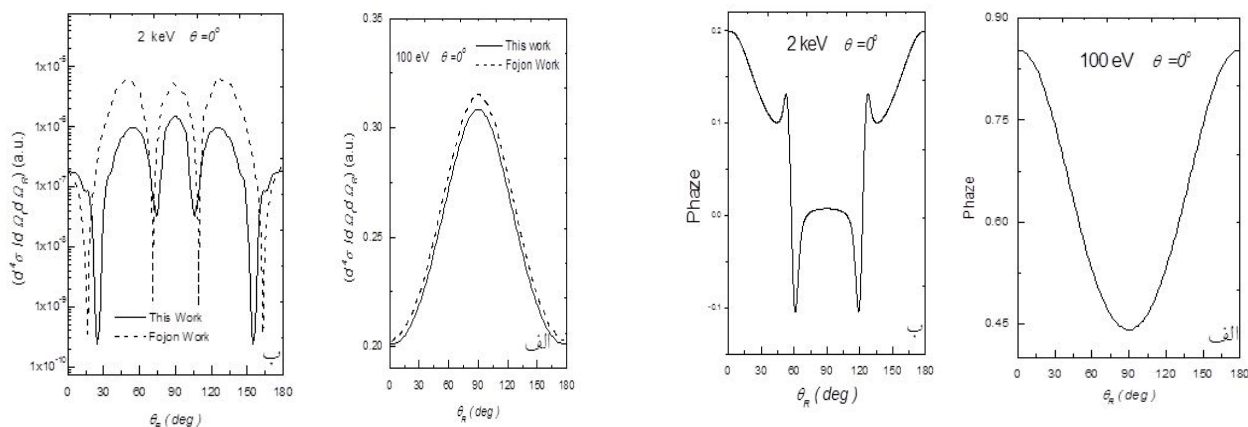
$$B_2 = A \{ i (\vec{V}_f) [\lambda - n (\frac{V_i^2}{\psi} + V_i - \frac{V_f^2}{\psi})] \}^{2i\epsilon_{PT}} [2V_i - V_f^2]^{-i\epsilon_{PT}}$$

$$\left\{ \frac{2Z_T Z_P}{(\lambda - n (\frac{V_i^2}{\psi} + V_i - \frac{V_f^2}{\psi}))^{-i\epsilon_{PT}}} |-K|^{-2+2i\epsilon_{PT}} + \frac{\sim_n V_f e^{iU} \text{Sin}u}{|\vec{K}_i| \frac{|\vec{K}_f|}{\psi}} \right\} \quad (36)$$

و با جایگزینی تابع موج اولیه و نهایی این انتگرال ها را محاسبه نمود.

۳. نتایج

در شکل ۲ دامنه پراکندگی ربایش الکترون در تشکیل پوزیترونیم، از یون مولکول هیدروژن برای زاویه پراکندگی ثابت $\theta = 90^\circ$ بر حسب جهت گیری مولکول، در دو انرژی مختلف ۱۰۰ و ۲۰۰۰ الکترون ولت رسم شده است. با مقایسه این دامنه ها مشاهده می شود که با بالا رفتن انرژی تداخل بیشتر شده اما بیشینه دامنه هنوز در زاویه 90° درجه می باشد، در این حالت زاویه پراکندگی در جهت محور فرودی پرتابه می باشد، در صورتی که مولکول حول این محور دوران می کند و زمانی که زاویه سمت گیری مولکول به 90° درجه می رسد، محور بین مولکولی بر جهت پرتابه عمود



شکل ۵. سطح مقطع دیفرانسیلی بر حسب زاویه جهت گیری مولکول در $\theta = 0^\circ$ الف: انرژی ۱۰۰ eV ب: انرژی ۲ keV. خط ممتد: براساس رهیافت انجام شده خط چین براساس تقریب بورن [۱۳]

است. این پدیده در اثر سازوکار دو مرحله‌ای، که به نام سازوکار توماس معروف است، پدید می‌آید که در آن ابتدا تنها الکترون یون مولکول هیدروژن توسط پوزیترون پراکنده شده و سپس به وسیله هسته یون مولکول هیدروژن پراکنده می‌شود، به گونه‌ای که بعد از برهم‌کنش، تقریباً الکترون همان سرعت پوزیترون را که در طول برخورد تغییر محسوسی نکرده است را می‌گیرد و در نهایت به پوزیترون مقید شده و پوزیترونیم را تشکیل می‌دهد. فاز دامنه جزئی مرتبه دوم بر حسب زاویه پراکندگی در شکل ۷ رسم شده است که تاثیر سازوکار توماس را در این دامنه جزئی نشان می‌دهد.

۴. نتیجه گیری

منحنی‌های مربوط به دامنه‌های پراکندگی بر حسب جهت گیری‌های مختلف مولکول بیانگر تاثیر جهت گیری مولکول در فرایند ربایش الکترون می‌باشد. آثار پراکندگی در انرژی ۲۰۰۰ الکترون ولت در دامنه الکترونی به صورت جملات تداخلی نشان داده شده است که در ناحیه تداخلی جملات مربوط به دامنه‌های مختلف یکدیگر را خنثی می‌کنند. این موضوع در نمودار فاز نیز قابل مشاهده است.

۵. پیوست

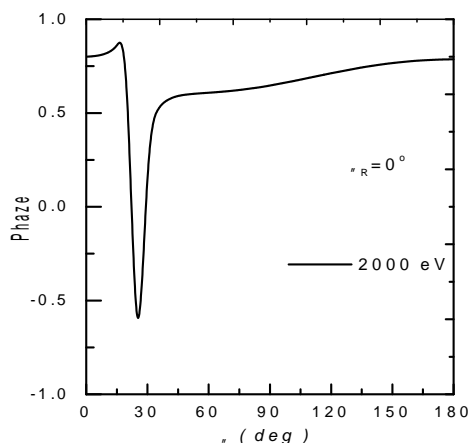
برای به دست آوردن پتانسیل موضعی مؤثر برای توصیف

شکل ۴. فاز دامنه پراکندگی ربایش الکترون در تشکیل پوزیترونیم، از یون مولکول هیدروژن بر حسب جهت گیری مولکول، (الف) انرژی ۱۰۰ الکترون ولت، (ب) ۲۰۰۰ الکترون ولت.

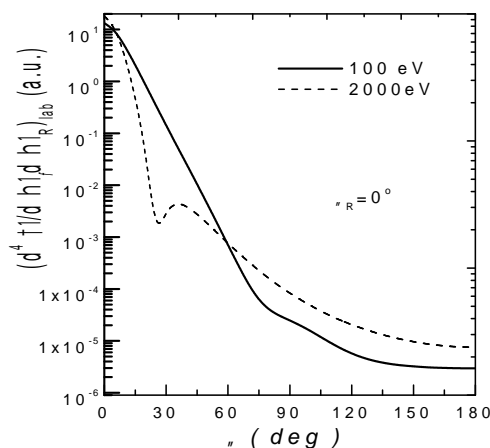
ولت دارای تداخل‌های کمتری نسبت به انرژی ۲۰۰۰ الکترون ولت می‌باشد. در این نمودارها یک منحنی دیگری نیز مشاهده می‌شود که توسط فوجون [۱۵] و همکارانش انجام شده است. کار فوجون بر اساس تقریب بورن بوده که منحنی خط چین سطح مقطع دیفرانسیلی بر حسب زاویه جهت گیری مولکول در تقریب مرتبه اول را نشان داده شده است.

همان طور که از مقایسه نمودارها مشاهده می‌شود به ازای زاویه پراکندگی $\theta = 0^\circ$ مقدار عددی سطح مقطع جزئی هم مرتبه خواهند بود. شکل سطح مقطع‌ها یکسان بوده، برای انرژی ۱۰۰ الکترون ولت در هر دو نمودار (این کار و کار فوجون) یک بیشینه در زاویه 90° درجه دیده می‌شود. زمانی که انرژی افزایش می‌یابد بیشینه‌ها وجود داشته، اما تعداد آنها که بیانگر تعداد نوسانات یا الگوهای تداخلی می‌باشد، افزایش می‌یابد که برای انرژی ۲۰۰۰ الکترون ولت در حالی که پرتابه در امتداد محور Z و عمود بر آن بر هدف وارد می‌شود، سه بیشینه در زوایای ۴۵، ۹۰ و ۱۲۰ درجه دیده می‌شود.

شکل ۶ نمودار سطح مقطع جزئی در یک جهت گیری خاص مولکول بر حسب زاویه پراکندگی رسم شده است. چنان که در نمودار مشخص است یک قله در زاویه تقریباً 42° درجه (0.74 رادیان) دیده می‌شود، که با بالا رفتن انرژی این قله بهتر مشاهده شده است که همان قله توماس است. این قله ناشی از جمله دومین دامنه جزئی است و در جایی قرار دارد که $b = 0$



شکل ۷. فاز دامنه جزئی مرتبه دوم بر حسب زاویه پراکندگی برای یک جهت گیری مولکول $R = 0^\circ$ در انرژی ۲۰۰۰ الکترون ولت.



شکل ۶. سطح مقطع دیفرانسیلی بر حسب زاویه پراکندگی برای جهت گیری مولکول در $R = 0^\circ$ خط ممتد انرژی ۱۰۰ eV خط چین انرژی ۲ keV.

یک برهم کنش کوتاه برد یوکاوا (به دلیل درگیر بودن هسته‌ها در برهم کنش) می‌باشد، بر پتانسیل مؤثر تطبیق داده می‌شود

$$V_{eff}(r) = V_0 - \frac{a}{r} - b \frac{e^{-cr}}{r} \quad (40)$$

پتانسیل پیشنهادی شرایط مرزی مناسب را برای پراکندگی مورد نظر برآورده می‌کند. ثابت‌های معرفی شده در پتانسیل با تطبیق دادن این پتانسیل با پتانسیل رابطه (۳۹) به دست آورده شده است. حال با استفاده از این پتانسیل مؤثر می‌توان جابه‌جایی فاز را محاسبه کرد، هر آنچه که برای محاسبه دامنه پراکندگی و در نتیجه سطح مقطع‌های جزئی و کلی مورد نیاز است، در جابه‌جایی‌های فاز نهفته است

$$tg u_\ell = -k \int_0^\infty dr r^\nu V_{eff}(r) [j_\ell(kr)]^\nu \quad (41)$$

$$k = \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (42)$$

که در آن $j_\ell(kr)$ تابع بسل است.

برهم کنش الکترون و پرتابه با هدف از روش معکوس معادله شرودینگر استفاده شده است.

با معکوس کردن معادله شرودینگر پتانسیل مؤثر بر حرکت

الکترون تعیین می‌شود

$$H\{\psi(r)\} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E(R) \psi(r), \quad (37)$$

$E(R)$ و $\psi(r)$ انرژی و تابع موج الکترون فعال می‌باشند،

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \psi(r)}{\psi(r)} + E(R), \quad (38)$$

در واحد اتمی $\hbar = 1$ و $m = 1$ است، بنابراین رابطه (۲) را می‌توان به صورت:

$$V(r) = \frac{\nabla^2 \psi(r)}{2 \psi(r)} + E(R), \quad (39)$$

نوشت. چون این پتانسیل در حالت کلی دارای شکل پیچیده‌ای است و در محاسبات پراکندگی، کار با این پتانسیل بسیار مشکل بوده پتانسیل ساده‌تری که ترکیبی از برهم کنش بلندبرد کولنی و

مراجع

1. R K Janev and H Winter, *Phys. Rep.* **117** (1985) 265.
2. S Svanberg, "Atomic and Molecular Spectroscopy", Springer-Verlag Berlin (1943).
3. T F Tuan and E Gerjuoy, *Phys. Rev.* **117** (1960) 756.
4. S Cheng, C L Cocke, V Frohne, E Y Kamber, J H McGuire, and Y D Wang, *Phys. Rev. A* **47** (1993) 3923.
5. N C Deb, A Jain, and J H McGuire, *Phys. Rev. A* **38** (1988) 3769.
6. S Alston, T Brenna, and F Bannon, *Phys. Rev. A* **52** (1995) 3899.
7. M J Brunger and S J Buckman, *Physics Reports*, **357**, 3-5 (2002) 215.
8. E A G Armour, *Phys. Rep.* **169** (1988) 1.
9. E A G Armour and J W Humberston, *Phys. Rep.* **204** (1991) 165.

13. C J Joachain, "*Quantum Collision Theory*", North-Holland, Amsterdam (1975).
14. S Alston, *Phys. Rev. A* **42** (1990) 331.
15. O A Fojón, R D Rivarola, J Hansen, and M A Ourdane, *Nucl. Instrum. Meth. B Phys. Res.* **124** (1997) 438.
10. J N Cooper, E A G Armour, and M Plummer, *Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **41** (2008) 245201
11. J Tennyson, C J Noble, and S Salvini, *J. Phys. B* **17** (1984) 905.
۱۲. ف شجاعی، ر فتاحی، م بلوریزاده، «پراکنندگی الاستیک پوزیترون توسط یون مولکول هیدروژن با استفاده از محاسبه ماتریس گذار»، مقاله نامه کنفرانس فیزیک ایران (۱۳۹۰) ۱۶۱.