مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۷، شمارهٔ ۱، بهار ۱۳۹۶

تصحیح تقریب مرتبهٔ اول بورن در برخورد یون- اتم در کانال تهییج توسط فرمول‌بندی آیکونال چندکاناله

سعیده امیری بیدوری و رضا فتحی

دانشکدهٔ فیزیک دانشگاه شهید باهنرکرمان، کرمان

پست الکترونیکی: rfathi@uk.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۱۱/۱۳ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۳۹۵/۸/۹)

چکیده

در کار حاضرسعی شده است که یک فرمول‌بندی تعمیم‌یافته از روش نیمه کلاسیکی در برخورد یون- اتم انجام شود. یکی از روش‌های رایج در محاسبهٔ سطح مقطع جزئی و کل برخورد یون- اتم در محدودهٔ انرژی‌های بالا استفاده از تقریب مرتبهٔ اول بورن، به دلیل ساده بودن محاسبات آن است، ولی لزوماً این تقریب از دقت کافی برخوردار نیست. به خصوص این تقریب در کانال تهییج به دلیل تعامد توابع موج حالت اولیه و نهایی زیر دستگاه مقید، اثر بین هسته‌ای را در محاسبات وارد نمی‌کند و بنابراین تصویر کاملی از فرآیند برخورد را به دست نمی‌دهد. همچنین در این تقریب مهم‌ترین جفت‌شدگی بین حالت اولیه و نهایی دستگاه در نظر گرفته می‌شود. از طرفی روش جفت‌شدگی نزدیک به دلیل محدودیت‌هایی در انرژی‌های بالای برخورد غیر قابل استفاده است. لذا هدف این کار تصحیح تقریب مرتبهٔ اول بورن با به کارگیری فرمول‌بندی آیکونال چندحالته است. در نهایت نشان داده خواهد شد که با ساده کردن این نظریهٔ تعمیم‌یافته می‌توان به تعدادی از فرمول‌بندی‌های متداول در بحث برخورد یون- اتم دست یافت.

واژه‌های کلیدی: برخورد یون- اتم، آیکونال، سطح مقطع جزئی، فرمول‌بندی نیمه کلاسیکی

۱. مقدمه

در قرن اخیر توجه زیادی به محاسبه سطح مقطع برخوردهای الکترون- اتم، یون- اتم و اتم- اتم شده است. تحقیقات اولیه توسط رادرفورد که منجر به کشف هستهٔ اتم شد بیانگر این است که علم به دنبال دانستن ساختار اتم‌ها و برهم‌کنش آنها با یون‌ها، فوتون‌ها، اتم‌ها و مولکول‌ها بوده است و بهترین راه کسب این اطلاعات مطالعهٔ پراکندگی ذرات و طیف‌نمایی می‌باشد. نتایج مربوط به سطح مقطع پراکندگی در اغلب شاخه‌های فیزیک به کار برده می‌شود که از جمله می‌توان به کاربرد آن در فیزیک پلاسما [۱]، فیزیک نجومی [۲]، جستجوی مادهٔ تاریک در کیهان‌شناسی [۳] و شناخت نیروهای موجود در مادهٔ چگال [۴] اشاره نمود.

فرآیندهای پراکندگی در نواحی مختلفی از انرژی رخ می‌دهند. خاطر نشان می‌کنیم که محدودهٔ انرژی برخورد در فیزیک اتمی و هسته‌ای با شاخه‌های دیگر فیزیک متفاوت است. به عنوان مثال ناحیهٔ انرژی کم در فیزیک اتمی در حد الکترون

ولت بوده درحالی‌که در فیزیک هسته‌ای حداقل چند مگا الکترون ولت است. به طور کلی محدودهٔ انرژی در فیزیک اتمی به سه ناحیه تقسیم می‌شود؛ ناحیهٔ اول برخورد با انرژی کم، ناحیهٔ دوم برخورد با انرژی میانی و ناحیهٔ سوم برخورد با انرژی بالا می‌باشد. برای موارد خاص برخورد پروتون با اتم هیدروژن و برخورد الکترون با اتم هیدروژن محدودهٔ انرژی میانی و بالا، که هدف این کارحاضر می‌باشد، به ترتیب در محدودهٔ ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ کیلو الکترون ولت و ۵۰ تا ۵۰۰ الکترون ولت در نظر گرفته می‌شود.

برای بررسی فرآیندهای تهییج، تبادل بار و یونش در برخورد یون- اتم نظریهٔ واحدی که بتواند در تمام محدودهٔ انرژی پاسخگو باشد وجود ندارد. بنابراین برای محاسبهٔ این سطح مقطع‌ها روش‌های متعددی توسعه یافته است که هرکدام از این روش‌ها برای یک محدودهٔ انرژی مناسب می‌باشند. این روش‌ها در سه دستهٔ کلی روش‌های کاملاً کوانتومی، روش‌های نیمه کلاسیکی و روش‌های کلاسیکی قرار می‌گیرند.

شاید ساده‌ترین محاسبهٔ کوانتومی تقریب بورن [۵] و تصحیحات آن باشد که شامل تقریب مرتبهٔ دوم بورن، تقریب بورن موج واپیچیده [۶] و تقریب بت[۱] [۷] می‌باشد. تقریب بورن و تصحیحات آن اصولاً نظریه‌های انرژی بالا هستند، مبنی بر این فرض که تنها جفت‌شدگی مهم این فرآیند، جفت‌شدگی مستقیم بین گذار از حالت اولیه به حالت نهایی دستگاه پراکندگی است و از جفت‌شدگی معکوس از حالت نهایی به حالت اولیه صرف نظر شده است. تابع موج دستگاه در این روش به وسیلهٔ تابع حالت اولیه شرح داده می‌شود. روش کوانش دوم که دقت قابل توجهی برای بررسی برخورد الکترون- اتم دارد روش جفت‌شدگی نزدیک[۲] است [۸]. در تقریب جفت‌شدگی نزدیک تابع موج دستگاه به وسیلهٔ مجموعه‌ای از توابع موج اتمی بسط داده می‌شود و به محض جایگذاری این تابع موج در معادلهٔ شرودینگر به ازای هر مقدار اندازهٔ حرکت زاویه‌ای کل یک مجموعهٔ نامحدود از معادلات دیفرانسیل جفت‌شده حاصل می‌شود. این مجموعهٔ نامحدود باید در گسترهٔ تابع موج و اندازهٔ حرکت زاویه‌ای همگرا شود و این مشکل بزرگ روش جفت‌شدگی نزدیک است. این روش در انرژی‌های بالای برخورد غیر قابل استفاده است.

تقریب‌های نیمه کلاسیکی از این جهت با روش‌های تمام کوانتومی نظریهٔ پراکندگی متفاوت هستند که حرکت نسبی دستگاه‌های برخورد کننده را با یک روش نیمه کلاسیکی بررسی می کنند و برای بیش از یک محدودهٔ انرژی مناسب هستند. از این دسته می‌توان به تقریب (JWKB)[۳] و تقریب آیکونال اشاره نمود. شاید اولین نظریهٔ نیمه کلاسیکی قابل توجه توسط بتس[۴] [۹] ارائه گردید که به روش پارامتر برخورد معروف است. این روش در حوزهٔ برخورد ذرات سنگین به موفقیت بزرگی دست یافت [۱۰]. بیشتر روش‌های مبنی بر روش (JWKB) توسط بتس وهالت[۵] [۱۱] و کروترز[۶] [۱۲] توسعه یافته‌اند. یک روش متفاوت نیمه کلاسیکی که روش نیمه‌کوانتومی نامیده می‌شود توسط فلانری[۷] بیان شده است [۱۳]. در این روش تمامی رفتارهای برخورد کلاسیکی هستند و توزیع سرعت الکترون فعال به صورت کوانتومی در نظر گرفته شده است. این روش اصولاً برای فرآیندهای یونش طراحی شده است.

نظریهٔ کاملاً کلاسیکی [۱۴] گزینهٔ دیگری برای بررسی فرآیندهای یونش است. یک گزارش مفصل از برخورد دو جسمی و نظریهٔ برخورد کلاسیکی توسط ورینز[۸] [۱۵] داده شده است. بررسی نظریه‌های موجود نشان می‌دهد که برای طیف وسیعی از کاربردها نظریه‌های نیمه کلاسیکی از موفقیت بزرگی برخوردار بوده اند.

تقریب مرتبهٔ اول بورن به دلیل ساده بودن محاسبات به یکی از روش‌های رایج در محاسبهٔ سطح مقطع جزئی و کل برخورد یون- اتم تبدیل شده است. ولی ازآن جایی که در این تقریب

۱. Bethe
۲. Close-coupling
۳. Jeffrey-Wentzel-Kramers-Brillouin
۴. Bates
۵. Holt
۶. Crothers
۷. Flannery
۸. Vriens

مهم‌ترین جفت‌شدگی بین حالت اولیه و نهایی دستگاه در نظر گرفته می‌شود و از طرف دیگر در کانال تهییج به دلیل تعامد توابع موج اولیه و نهایی زیر دستگاه مقید اثر بین هسته‌ای را در محاسبات وارد نمی کند، بنابراین نمی‌تواند تصویر کاملی از فرآیند برخورد را به دست دهد. در کار حاضر سعی شده است در حین حفظ سادگی محاسبات، از فرمول‌بندی آیکونال چندکاناله برای تصحیح تقریب مرتبهٔ اول بورن استفاده شود. به عبارت بهتر یک روش نیمه کلاسیکی برای برخوردهای یون- اتم کشسان و غیرکشسان مطرح شده است که درآن حرکت نسبی دستگاه‌های برخورد کننده به وسیلهٔ تقریب آیکونال شرح داده شده و حرکت داخلی الکترونی دستگاه‌ها به وسیلهٔ یک بسط چندحالته بررسی شده است. این نظریه برای طیف وسیعی از برخوردها کاربرد داشته و برای بیش از یک محدودهٔ انرژی، از نزدیکی آستانهٔ تهییج تا انرژی‌های خیلی بالا، معتبر می‌باشد. در انتها نشان داده می‌شود که با اتخاذ یک تقریب ساده می‌توان از نظریهٔ حاضر به تعدادی از فرمول‌بندی‌های متداول در بحث برخورد یون- اتم از جمله تقریب بورن، تقریب بورن موج واپیچیده و تقریب گلایبر[1] [۱۶] دست یافت.

۲. نظریه

به طور کلی تقریب آیکونال وضعیت‌هایی را پوشش می‌دهد که $V(x)$ در فاصله‌ای از مرتبهٔ طول موج $\lambda\!\!\!^{-}$ (که می‌توان آن را کوچک در نظر گرفت) تغییرات بسیار کمی داشته باشد. توجه می‌نماییم که نیازی به کوچک بودن پتانسیل نیست بلکه تنها کافیست $E \gg |V|$ باشد. بنابراین محدودهٔ اعتبار این تقریب با تقریب بورن متفاوت است. زیرا تقریب بورن یک روش اختلالی محسوب می‌شود و شرط استفاده از آن کوچک بودن پتانسیل می‌باشد. در تقریب مرتبهٔ اول بورن برای محاسبهٔ دامنهٔ پراکندگی تابع موج نهایی با تابع موج اولیه (موج تخت) جایگزین می‌گردد. به عبارت بهتر پتانسیل روی ذره تاثیر چندانی نخواهد داشت. اما در تقریب آیکونال تابع موج نهایی، با تابع موجی که برای انرژی‌های بالا مناسب باشد (موج تخت واپیچیده) جایگزین می‌شود و می‌توان از آن به عنوان تصحیح تقریب مرتبهٔ اول بورن یاد کرد.

در تقریب آیکونال حرکت نسبی دستگاه در حال برهم‌کنش به وسیلهٔ موج تخت واپیچیده به صورت

$$\psi\left(\vec{R}\right)=e^{iS\left(\vec{R}\right)}\ , \qquad (۱)$$

قابل بیان است به طوری که

$$S\left(\rho,z,\varphi\right)=kz+\int_{-\infty}^{z}\left\{\left[\frac{2m}{\hbar^{2}}\left(E-V\right)\right]^{1/2}-k\right\}dz\ , \qquad (۲)$$

باشد [۹]. در رابطهٔ فوق E انرژی جنبشی پرتابه، V پتانسیل برهم‌کنش و $\vec{k}$ بردار موج حرکت نسبی دستگاه در دستگاه مختصات مرکز جرم می‌باشد. بردار $\vec{R}$ فاصلهٔ پرتابه نسبت به هستهٔ زیر دستگاه مقید است. از آن جایی که تقریب آیکونال، یک تقریب برای انرژی‌های بالا یا پتانسیل برهم‌کنشی ضعیف است، در این شرایط انحراف مسیر کلاسیک از خط راست قابل توجه نیست بنابراین برای راحتی، مسیر مستقیم کلاسیکی را موازی با محور Zها انتخاب خواهیم نمود.توجه می‌نماییم که اگر بتوان از جملهٔ دوم در عبارت (۲) صرف نظر نمود به تقریب بورن خواهیم رسید. به عبارتی می‌توان گفت یک معیار اعتبار تقریب بورن وجود رابطهٔ

$$\left|\frac{m}{\hbar^{2}}\int_{-\infty}^{\infty}v\,dz\right|\ll 1 \qquad (۳)$$

است.

۳. نظریهٔ پراکندگی چندحالته

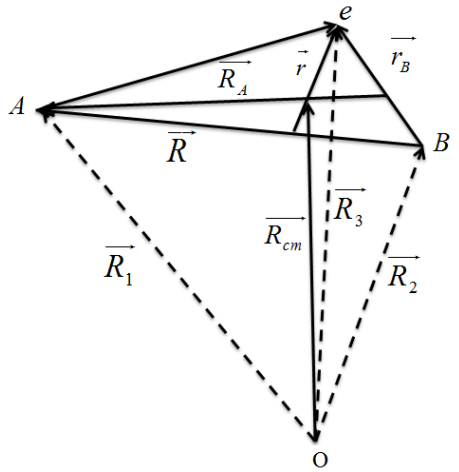
در کار حاضر واکنشی از نوع

$$A+\left(B+e\right)\rightarrow A+\left(B+e\right)^{*}$$

که یک فرایند تهییج با یک الکترون فعال است، در نظر گرفته می‌شود. شکل ۱ دستگاه مختصات استفاده شده برای توصیف فرآیند برخورد را نشان می‌دهد. باتوجه به شکل ۱ هامیلتونی در دستگاه آزمایشگاه به صورت

$$H_{\text{lab}}=-\frac{\hbar^{2}}{2M_{A}}\nabla_{1}^{2}-\frac{\hbar^{2}}{2M_{B}}\nabla_{2}^{2}-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla_{3}^{2}+V_{AB}+V_{BE}+V_{Ae} \qquad (۴)$$

۱. Glauber



شکل ۱. دستگاه مختصات توصیف کنندهٔ فرآیند برخورد $A+(B+e)$.

نوشته خواهد شد. در رابطهٔ (۴) M_A، M_B و m جرم‌های مربوط به ذرات A به عنوان پرتابه، B به عنوان هستهٔ اتم مقید و e به عنوان الکترون فعال هستند. $\vec{\nabla}_i (i=1,2,3)$ به ترتیب نشان‌دهندهٔ مشتق‌گیری نسبت به مختصهٔ $\vec{R_i}$ است. V_{Ae}، V_{Be} و V_{AB} پتانسیل برهم‌کنش دوجسمی بین ذرات نشان داده شده هستند.

به طور کلی مناسب‌تر است در محاسبات از دستگاه مرکز جرم استفاده شود بنابراین در رابطهٔ (۴) تغییر متغیرهای

$$\vec{R} = \vec{R_1} - \vec{R_2} \,, \qquad (۵.\text{الف})$$

$$\vec{r} = \vec{R_3} - \frac{M_A \vec{R_1} + M_B \vec{R_2}}{M_A + M_B} \,, \qquad (۵.\text{ب})$$

$$\vec{R_{cm}} = \frac{M_A \vec{R_1} + M_B \vec{R_2} + m\vec{R_3}}{M_A + M_B + m} \,. \qquad (۵.\text{ج})$$

اعمال می‌گردد. مختصهٔ $\vec{R}$ فاصلهٔ نسبی پرتابه و هستهٔ اتم مقید، مختصهٔ $\vec{r}$ بردار مکان الکترون فعال نسبت به مرکز جرم A و B و $\vec{R_{cm}}$ محل مرکز جرم دستگاه نسبت به مبدأ آزمایشگاه را نمایش می‌دهند. با استفاده از تغییر متغیرهای معرفی شده هامیلتونی دستگاه به شکل

$$H_{\text{lab}} = -\frac{\hbar^2}{2M_{tot}}\nabla_{cm}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\upsilon}\nabla_r^2 + V_{AB} + V_{Be} + V_{Ae} \,, \qquad (۶)$$

نوشته می‌شود به طوری که

$$M_{\text{tot}} = M_A + M_B + m \,, \qquad (۷.\text{الف})$$

$$\mu = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B} \,, \qquad (۷.\text{ب})$$

$$\upsilon = \frac{m(M_A + M_B)}{M_A + M_B + m} \,, \qquad (۷.\text{ج})$$

باشند. برهم‌کنش‌های V_{Ae}، V_{Be} و V_{AB} از موقعیت مرکز جرم مستقل هستند. بنابراین حرکت دستگاه مرکز جرم به وسیلهٔ یک موج تخت توصیف می‌شود.

از آن جایی که حرکت انتقالی دستگاه مرکز جرم مورد بحث نمی‌باشد، نوشتن هامیلتونی در دستگاه مرکز جرم و به صورت

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 + V_{Ae} + V_{Be} + V_{AB} \,, \qquad (۸)$$

مناسب‌تر است. تابع موج توصیف کنندهٔ دستگاه کل در مختصات مرکز جرم در رابطهٔ

$$(H - E)\Psi(\vec{R},\vec{r}) = 0 \,, \qquad (۹)$$

صدق می‌کند. معادلهٔ موج با توجه به شرط مرزی مجانبی به شکل

$$\Psi(\vec{R},\vec{r}) \xrightarrow[R_A \to \infty]{} \sum \left(\delta_{no} e^{i\vec{k_n}.\vec{R_A}} + f_{no}(\theta) \frac{e^{ik_n R_A}}{R_A} \right) \psi_n(\vec{r}) \qquad (۱۰)$$

حل می‌شود که در آن $\vec{k_n}$ بردار موج حرکت نسبی در کانال nام، ψ_n تابع موج مختل نشده در کانال nام و $f_{no}(\theta)$ دامنهٔ پراکندگی می‌باشد.

به منظور جداسازی حرکت نسبی دستگاه از حرکت داخلی دستگاه و اعمال یک فرمول‌بندی چندکانالهٔ تابع موج دستگاه به صورت

$$\Psi(\vec{R},\vec{r}) = \sum_n F_n(\vec{R}) \chi_n(\vec{R},\vec{r}) \,, \qquad (۱۱)$$

بسط داده می‌شود. $\chi_n(\vec{R},\vec{r})$ تابع موج داخلی دستگاه است که به صورت یک مجموعهٔ کامل متعامد و بهنجار انتخاب می‌شود، برای برخوردهای در انرژی‌های بالا در خصوص دو دستگاه اتمی که در آن مسیر پرتابه زیاد تغییر نمی‌کند، χ_n به صورت بسطی از ویژه‌توابع مختل نشدهٔ دستگاه‌های برخورد کننده انتخاب می‌شود و ضرایب بسط $F_n(\vec{R})$ نشان‌دهندهٔ حرکت نسبی دستگاه است که معادلهٔ حاکم بر آن در ادامه به دست می‌آید.

بسط فوق در حالت کلی کانال انتقال بار را نیز در نظر می‌گیرد. تابع $F_n(\vec{R})$ در رابطهٔ (۱۱) باید در شرط مرزی

$$F_n\left(\vec{R}\right)\xrightarrow[R\to\infty]{}\sum_n\left(\delta_{no}e^{i\vec{k}.\vec{R}}+f_{no}(\theta)\frac{e^{ik_nR}}{R}\right), \qquad (۱۲)$$

صادق باشد. شرایط مرزی مجانبی برای $\chi_n\left(\vec{R},\vec{r}\right)$ به طوری که رابطهٔ (۱۰) صادق باشد به صورت

$$\chi_n\left(\vec{R},\vec{r}\right)\xrightarrow[R\to\infty]{}\psi_{\beta n}\left(\vec{r}\right)e^{i\beta\overrightarrow{k_n}\cdot\overrightarrow{r_B}}\ , \qquad (۱۳)$$

به دست می‌آید که در آن $\beta=-\frac{m}{M_B+m}$ است. به طور معمول از عامل نمایی در رابطهٔ (۱۳) برای فرآیند مستقیم برخورد اتم- اتم و الکترون- اتم صرف نظر می‌شود. اگر چه در مورد برخورد «بازچینی» عامل نمایی بسیار مهم می‌باشد.

برای پیدا کردن معادله‌ای که تابع موج حرکت نسبی دستگاه در آن صادق باشد از معادلهٔ موج دستگاه و تابع موج داخلی به شکل

$$\left\langle\chi_n\left|H-E\right|\Psi\right\rangle=0\ , \qquad (۱۴)$$

استفاده می‌شود. برای ساده‌سازی عبارت (۱۴) هامیلتونی دستگاه به صورت

$$H=H'-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2\ , \qquad (۱۵)$$

تجزیه می‌شود. H' قسمتی از هامیلتونی است که انرژی جنبشی انتقالی را شامل نمی‌شود. بنابراین می‌توان نوشت

$$H'=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+V_{Ae}+V_{Be}+V_{AB}\ . \qquad (۱۶)$$

انرژی کل دستگاه به صورت

$$E=\frac{\hbar^2k_n^2}{2\mu}+\varepsilon_n\ , \qquad (۱۷)$$

است. ε_n انرژی بستگی کل دستگاه و $\vec{k}_n$ بردار موج حرکت نسبی دستگاه در کانال nام است. با استفاده از روابط (۱۱)، (۱۵)، (۱۶) و (۱۷) رابطهٔ (۱۴) به شکل

$$\sum_m\left\langle\chi_n\left|\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2+\frac{\hbar^2}{2\mu}k_n^2\right]F_m\chi_m\right.\right\rangle=\sum_m\left\langle\chi_n\left|H'-E\right|\chi_m\right\rangle\left|F_m\right\rangle, \qquad (۱۸)$$

در می‌آید. عناصر ماتریس برهم‌کنش به صورت

$$V_{nm}\left(\vec{R}\right)=\sum_m\left\langle\chi_n\left|H'-\varepsilon_m\right|\chi_m\right\rangle, \qquad (۱۹)$$

خواهد بود. با جانشانی رابطهٔ (۱۹) در رابطهٔ (۱۸) و بسط جملهٔ $\nabla_R^2\left|\chi_mF_m\right\rangle$ خواهیم داشت

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2+\frac{\hbar^2}{2\mu}k_n^2-V_{nn}\right]\left|F_n\right\rangle=\sum_{m\neq n}V_{nm}\left|F_m\right\rangle-\sum_m\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left\langle\chi_n\left|\nabla_R^2\right|\chi_m\right\rangle\left|F_m\right\rangle+2\left\langle\chi_n\left|\vec{\nabla}_R\right|\chi_m\right\rangle\cdot\vec{\nabla}_R\left|F_m\right\rangle\right]. \qquad (۲۰)$$

معمولاً توابع χ_n به صورت توابع کند تغییری از $\vec{R}$ انتخاب می‌شوند. بنابراین می‌توان از جملهٔ $\nabla_R^2\left|\chi_m\right\rangle$ نسبت به جملهٔ $\overrightarrow{\nabla_R}\left|\chi_m\right\rangle$ صرف نظر نمود. بنابراین رابطهٔ (۲۰) به صورت

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2+\frac{\hbar^2}{2\mu}k_n^2-V_{nn}\right]\left|F_n\right\rangle=\sum_{m\neq n}V_{nm}\left|F_m\right\rangle-\sum_m\overrightarrow{\gamma_{nm}}\cdot\overrightarrow{\nabla_R}\left|F_m\right\rangle\ , \qquad (۲۱)$$

بازنویسی می‌شود. به طوری که داریم

$$\overrightarrow{\gamma_{nm}}=\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle\chi_n\left|\overrightarrow{\nabla_R}\right|\chi_m\right\rangle\ , \qquad (۲۲)$$

در بسیاری موارد $\chi_n\left(\vec{R},\vec{r}\right)$ مستقل از $\vec{R}$ انتخاب می‌شود که در این مورد $\overrightarrow{\nabla_R}\left|\chi_n\right\rangle$ و در نتیجه عبارت (۲۲) صفر بوده و بنابراین معادلهٔ (۲۱) بسیار ساده خواهد شد. برای استفاده از تقریب آیکونال در حل معادلهٔ (۲۱) تابع $F_n\left(\vec{R}\right)$ به شکل

$$F_n\left(\vec{R}\right)=\square_n\left(\vec{R}\right)A_n\left(\vec{R}\right)\ , \qquad (۲۳)$$

نوشته می‌شود و $\Xi_n\left(\vec{R}\right)$ در معادلهٔ همگن

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2+\frac{\hbar^2}{2\mu}k_n^2-V_{nn}\right]\Xi_n\left(\vec{R}\right)=0\ , \qquad (۲۴)$$

صدق می‌کند. معادلهٔ همگن رابطهٔ (۲۴) شبیه به معادلهٔ شرودینگر بوده و در آن عناصر ماتریس V_{nn} نقش پتانسیل را ایفا می‌کنند. با بیان $\Xi_n\left(\vec{R}\right)$ به صورت

$$\Xi_n\left(\vec{R}\right)=\exp\left\{iS\left(\vec{R}\right)\right\}\ , \qquad (۲۵)$$

در فرمول‌بندی آیکونال می‌توان نوشت

$$S_n\left(\vec{\rho},z\right)=k_nz+\int_{-\infty}^{z}\left[\sqrt{k_n^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V_{nn}}-k_n\right]dz\ . \qquad (۲۶)$$

انتگرال‌گیری فوق بر روی یک مسیر مستقیم انجام می‌گیرد. در مختصات استوانه‌ای می‌توان $\vec{R}$ را به صورت

$$\vec{R}=\vec{\rho}+\vec{z}\ , \qquad (۲۷)$$

نوشت. به طوری که $\vec{\rho}$ پارامتر برخورد کلاسیکی بوده و عمود بر محور zها می‌باشد. فرض مسیر مستقیم در صورتی صحت

دارد که انرژی جنبشی دستگاه بسیار بزرگ‌تر از پتانسیل‌های برهم‌کنش باشد، به عبارتی در کانال nام نامعادلهٔ

$$\frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} \gg V_{nn} \ , \qquad (۲۸)$$

باید برقرار باشد.در غیر این صورت اعتبار استفاده از فرض آیکونال نامشخص است. درواقع با فرض آیکونال نیازی به دانستن جزئیات مسیر پرتابه و به عبارتی $R(t)$ نمی‌باشد. هر چند استفاده از فرض آیکونال (تقریب موج واپیچیده) حتی زمانی که شرط (۲۸) صادق نباشد نیز نتایج جالبی در بر خواهد داشت.

در ادامه برای راحتی کار بردار موج موضعی $\vec{\kappa}_n(\vec{R})$ به صورت

$$\kappa_n^2(\vec{R}) = k_n^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V_{nn}(\vec{R}) \ , \qquad (۲۹)$$

تعریف می‌گردد. با استفاده از روابط (۲۳)، (۲۵) و (۲۹) نتیجهٔ

$$\nabla_R^2 F_n = \nabla_R^2 \left\{ \Xi_n(\vec{R}) A_n(\vec{R}) \right\} \simeq \Xi_n \frac{\partial^2 A_n}{\partial z^2} + 2ik_n \Xi_n \frac{\partial A_n}{\partial z} - \kappa_n^2 \Xi_n A_n \ , \qquad (۳۰)$$

حاصل می‌شود. اصولاً حرکت نسبی در راستای محور zها می‌باشد، بنابراین تغییرات A_n در امتداد عمود بر محور zها در نظرگرفته می‌شود و فرض بر این است که رابطهٔ

$$\frac{\partial^2 A_n}{\partial z^2} \ll \kappa_n \frac{\partial A_n}{\partial z} \ , \qquad (۳۱)$$

برقرار باشد. اساس فرض مورد نظر این است که حرکت نسبی دستگاه به خوبی به وسیلهٔ موج تخت واپیچیدهٔ (۲۵) توصیف می‌شود. به عبارت دیگر بیشتر تغییرات $F_n(\vec{R})$ در راستای محور zها در $\Xi_n(\vec{R})$ می‌باشد. با بسط جملهٔ $\vec{\nabla}_R F_n$ در رابطهٔ (۲۱) معادلهٔ جفت شدهٔ

$$2i\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)\kappa_n \frac{\partial A_n}{\partial z} = \left[\sum_{m \neq n} V_{nm} A_m - \sum_m i\kappa_m \overrightarrow{\gamma_{nm}} \cdot \hat{z} A_m \right] e^{i(S_m - S_n)} \qquad (۳۲)$$

برای A_n به دست می‌آید. بنابراین تابع موج کل دستگاه به صورت

$$\Psi(\vec{R},\vec{r}) = \sum_n A_n(\vec{\rho},z) e^{iS_n(\vec{\rho},z)} \chi_n(\vec{R},\vec{r}) \ , \qquad (۳۳)$$

باز نویسی می‌شود، که در آن A_n جواب معادلهٔ (۳۲) بوده و χ_n در حد مجانبی

$$\chi_n(\vec{R},\vec{r}) \xrightarrow[R\to\infty]{} \psi_{\beta n}(\vec{r}) e^{i\beta \overrightarrow{k_n} \cdot \overrightarrow{r_B}} \ , \qquad (۳۴)$$

صدق می کند. S_n را می‌توان با توجه به بردار موج $\vec{\kappa}_n$ به صورت فشردهٔ

$$S_n(\vec{\rho},z) = k_n z + \int_{-\infty}^{z} \left[\kappa_n(\vec{R}) - k_n \right] dz \ , \qquad (۳۵)$$

نوشت. با تعریف $B_n(\vec{\rho},z)$ به صورت

$$B_n(\vec{\rho},z) = A_n(\vec{\rho},z) \exp\left[i \int_{-\infty}^{z} [\kappa_n - k_n] dz \right] . \qquad (۳۶)$$

معادله جفت‌شدهٔ (۳۲) به صورت

$$i\hbar \frac{\partial B_f}{\partial z} = \hbar(k_f - \kappa_f) B_f + \frac{\mu}{\hbar \kappa_f} \sum_{n \neq f} V_{fn} B_n e^{i(k_n - k_f)z} - i\frac{\mu}{\hbar \kappa_f} \sum_n \kappa_n \overrightarrow{\gamma_{fn}} \cdot \hat{z} B_n e^{i(k_n - k_f)z} \ , \qquad (۳۷)$$

بازنویسی خواهد شد. بدین ترتیب مجموعه‌ای از N معادلهٔ جفت‌شده با شرط مرزی $B_n(\vec{\rho},-\infty) = \delta_{ni}$ داریم که i نشان‌دهندهٔ حالت اولیهٔ دستگاه است.

به منظور دستیابی به سطح مقطع دیفرانسیلی و سطح مقطع کل، دامنهٔ پراکندگی برای گذار از حالت اولیهٔ i به حالت نهایی f به شکل

$$f_{fi}(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \psi_f | V | \Psi_i \rangle \ , \qquad (۳۸)$$

معرفی می‌شود. با در نظر گرفتن ψ_f و Ψ_i به صورت

$$\Psi_i(\vec{R},\vec{r}) = \sum_n B_n(\vec{\rho},z) e^{ik_n} \chi_n(\vec{R},\vec{r}) \qquad (۳۹)$$

$$\psi_f = \chi_f e^{i\overrightarrow{k_f}.\vec{R}} \qquad (۴۰)$$

رابطهٔ (۳۸) به شکل

$$f_{fi}(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d\vec{R} \sum_n V_{fn}(\vec{R}) B_n(\vec{\rho},z) \times e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} e^{i(k_n - k_i)z} \qquad (۴۱)$$

در خواهد آمد.

$\vec{K} = \overrightarrow{k_i} - \overrightarrow{k_f}$ بردار اندازه حرکت انتقال‌یافته از پرتابه به هدف در اثر برخورد می‌باشد. در حالت خاصی می‌توان وابستگی عناصر ماتریسی به زاویهٔ φ را به صورت یک فاز مختلط در نظر گرفته و به عبارتی نوشت

$$V_{fn}(R,\theta,\varphi)=V_{fn}(R,\theta)e^{i\Delta_{nf}\varphi}\ , \qquad (۴۲)$$

که در آن $\Delta_{nf}=m_n-m_f$ اختلاف اعداد کوانتومی مغناطیسی حالتهای n و f می‌باشد. این تجزیه برای زمانی که پتانسیل برهم‌کنش $V(\vec{R},\vec{r})$ به صورت جمعی از پتانسیل‌های مرکزی باشد اهمیت بسیاری دارد.

با تعریف ضریب جدید $C_n(\vec{\rho},z)$ به شکل

$$C_n(\rho,z)e^{i\Delta_{in}\varphi}=B_n(\vec{\rho},z)\ , \qquad (۴۳)$$

توسط رابطهٔ (۳۷) به مجموعه‌ای از معادلات جفت‌شدهٔ مستقل از فاز به صورت

$$i\frac{\hbar^2}{\mu}\kappa_f(\vec{\rho},z)\frac{\partial C_f}{\partial z}(\rho,z)+\left[\frac{\hbar^2}{\mu}\kappa_f(\kappa_f-k_f)+V_{ff}(\vec{\rho},z)\right]C_f(\rho,z)=\sum_{n=1}^{N}C_n(\vec{\rho},z)V_{fn}(\vec{\rho},z)e^{i(k_n-k_f)z}\ , \qquad (۴۴)$$

با شرط مرزی

$$C_f(\vec{\rho},-\infty)=\delta_{if}\ , \qquad (۴۵)$$

به دست خواهد آمد. با این فرض که توابع پایهٔ χ_n از موقعیت نسبی $(\vec{R})$ مستقل هستند و با توجه به رابطهٔ (۴۳) و (۳۷) دامنهٔ پراکندگی به صورت

$$f_{fi}(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d\vec{R}e^{i(\vec{K}\cdot\vec{R}+\Delta_{if}\varphi)}e^{i(k_f-k_i)z}\times\left\{i\frac{\hbar^2\kappa_f}{\mu}\frac{\partial C_f}{\partial z}+\left[V_{ff}-\frac{\hbar^2\kappa_f}{\mu}(k_f-\kappa_f)\right]C_f\right\}, \qquad (۴۶)$$

نتیجه می‌شود. ضرب نقطه‌ای $\vec{K}\cdot\vec{R}$ را می‌توان به صورت

$$\vec{K}\cdot\vec{R}=\vec{K'}\cdot\vec{\rho}+K_z z=K'\rho\cos(\varphi-\phi)+k_z z \qquad (۴۷)$$

نوشت که در آن K' مؤلفه‌ای از اندازهٔ حرکت انتقالی است که بر محور z ها عمود می‌باشد. با توجه به انتگرال

$$\int_0^{2\pi}e^{i(n\phi+z\cos\phi)}d\phi=2\pi i^n J_n(z)\ , \qquad (۴۸)$$

دامنهٔ پراکندگی به صورت

$$f_{fi}(\theta,\varphi)=-i^{\Delta+1}\int_0^{\infty}J_\Delta(K'\rho)\times\left[I_1(\rho,\theta)-iI_2(\rho,\theta)\right]\rho d\rho \qquad (۴۹)$$

به دست می‌آید که در آن J_Δ تابع بسل نوع اول از مرتبهٔ $\Delta=\Delta_{if}$ بوده و انتگرال‌گیری نسبت به z مربوط به I_1 و I_2 توسط عبارت‌های

$$I_1(\rho,\theta)=\int_{-\infty}^{\infty}\kappa_f(\vec{\rho},z)\frac{\partial C_f}{\partial z}e^{i\alpha z}dz\ , \qquad (۵۰)$$

$$I_2(\rho,\theta)=\int_{-\infty}^{\infty}\left[\kappa_f(\kappa_f-k_f)+\frac{\mu}{\hbar^2}V_{ff}\right]\times C_f(\rho,z)e^{i\alpha z}dz\ , \qquad (۵۱)$$

داده می‌شوند. وابستگی θ روابط (۵۰) و(۵۱) در پارامتر $\alpha(\theta)$ می‌باشد که با رابطهٔ

$$\alpha(\theta)=K_z+k_f-k_i=k_f(1-\cos\theta)\ , \qquad (۵۲)$$

بیان می‌گردد که اختلاف بین مؤلفهٔ z اندازهٔ حرکت انتقالی و مقدار کمینهٔ اندازهٔ حرکت انتقالی است. رابطهٔ (۴۹) یکی از روابط اساسی در نظریهٔ مورد بحث است.

سطح مقطع دیفرانسیلی و کل را می‌توان از روابط

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta,\varphi)=\frac{k_f}{k_i}\left|f_{fi}(\theta,\varphi)\right|^2\ , \qquad (۵۳)$$

و

$$\sigma_{fi}=\int\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta,\varphi)d\Omega\ , \qquad (۵۴)$$

به دست آورد. رابطهٔ (۴۹) تقریب آیکونال کامل (چندکاناله) نامیده می‌شود و تاکنون هیچ تقریب دیگری وارد مسأله نشده است. اما نتایج به دست آمده تنها برای پتانسیل‌های مرکزی و حالتی که χ_n از موقعیت نسبی $\vec{R}$ مستقل هستند، معتبر است و برای موارد دیگر دامنهٔ پراکندگی باید از شکل کلی (۴۱) محاسبه شود.

۴. نتیجه‌گیری

به عنوان نتایجی از نظریهٔ آیکونال چندحالته تقریب‌هایی از نظریهٔ بیان شده مطرح ساخته و به آنها پرداخته خواهد شد. ساده‌ترین تقریبی که می‌توان در نظر گرفت، صرف نظر کردن از تمام جفت‌شدگی‌های جزئی به گونه‌ای است که $C_n=\delta_{ni}$ باشد. به عبارتی تنها حالت اولیه و نهایی را به یکدیگر مربوط کند. در این صورت ازمعادلهٔ (۴۹) نتیجهٔ

$$f_{fi}(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V_{fi}(\vec{R})e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}d\vec{R}\ , \qquad (۵۵)$$

حاصل می‌شود که دامنهٔ پراکندگی موج بورن می‌باشد. در واقع تقریب بورن مستقیماً از هر کدام از تقریب‌هایی که در ادامه

مورد بحث قرار می‌گیرد به دست خواهد آمد.

اولین تقریب چندحالته از بسط بردار موج موضعی κ_f به صورت

$$\kappa_f\left(\vec{R}\right)=k_f-\frac{\mu}{\hbar^2 k_f}V_{ff}\left(\vec{R}\right), \qquad (۵۶)$$

به دست می‌آید. بسط فوق در حد انرژی‌های جنبشی $\frac{\hbar^2 k_f^2}{2\mu}\gg V_{ff}$ معتبر است.

با توجه به بسط (۵۶) انتگرال رابطهٔ (۵۱) به صفر رسیده و بنابراین دامنهٔ پراکندگی به صورت

$$\begin{aligned} f_{fi}^{A}(\theta,\varphi)&=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\left(\vec{\mathrm{K}}\cdot\vec{R}+\Delta\varphi\right)}d\vec{R}\sum_n C_n^A(\rho,z)\\ &\times V_{fn}(R,\theta)e^{i(k_n-k_i)z}\\ &=-i^{\Delta+1}\int_0^\infty J_\Delta(\mathrm{K}'\rho)\rho d\rho\int_{-\infty}^{\infty}\kappa_f\frac{\partial C_f^A}{\partial z}e^{i\alpha z}dz, \end{aligned} \qquad (۵۷)$$

نتیجه می‌شود. به طوری‌که C_f^A در معادلهٔ جفت‌شدهٔ

$$i\frac{\hbar^2\kappa_f}{\mu}\frac{\partial C_f^A}{\partial z}=\sum_{n=1}^{N}C_n^A V_{fn}(\rho,z)e^{i\left(k_n-k_f\right)z}, \qquad (۵۸)$$

صدق می‌کند. تقریب دوم برای نظریهٔ چندحالته با قرار دادن عدد موج موضعی مساوی با مقدار مجانبی‌اش حاصل می‌شود به عبارتی در روابط (۵۷) و (۵۸) $\kappa_n=k_n$ اعمال می‌شود. همان طور که قبلاً ذکر شد هر دو تقریب ذکر شده به محض جانشانی $C_n=\delta_{ni}$ در رابطهٔ (۵۷) به نتایج بورن خواهند رسید.

یک اصلاح تقریب بورن برای نتایج پراکندگی کشسان با قرار دادن ضریب حالت اولیه یعنی $C_n^B=C_i^B\delta_{ni}$ در رابطهٔ (۵۸) با $\kappa_i=k_i$ به دست می‌آید. در این صورت

$$C_i^B(\rho,z)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar v_i}\int_{-\infty}^{z}V_{ii}(\rho,z')dz'\right], \qquad (۵۹)$$

است. با جانشانی (۵۹) در معادلهٔ (۵۷) و حل انتگرال، دامنهٔ پراکندگی به شکل

$$f_{ii}(\theta,\varphi)=-ik_i\int_0^\infty J_0\left(2k_i\rho\sin\frac{\theta}{2}\right)\times\left[e^{2i\chi(\rho)}-1\right]\rho d\rho, \qquad (۶۰)$$

حاصل می‌گردد به طوری که

$$\chi(\rho)=-\frac{1}{\hbar v_i}\int_0^\infty V_{ii}\sqrt{\rho^2+z^2}\,dz, \qquad (۶۱)$$

می‌باشد. معادلات (۶۰) و (۶۱) تقریب آیکونال ساده برای پراکندگی کشسان در یک پتانسیل ثابت هستند.

شکل دیگری از تقریب دوم زمانی به دست می‌آید که تابع موج دستگاه (۴۰) در حالت نهایی به صورت موج واپیچیده پیشنهاد شود

$$\psi_f\left(\vec{r},\vec{R}\right)=\chi_f\left(\vec{r}\right)\exp\left(i\vec{k}_f\cdot\vec{R}-\frac{i}{\hbar v_f}\int_\infty^z V_{ff}dz\right), \qquad (۶۲)$$

که نسبت به موج غیر واپیچیدهٔ $\psi_f=\chi_f e^{i\vec{k}_f\cdot\vec{R}}$ مناسب‌تر است. دامنهٔ پراکندگی موج واپیچیده به شکل

$$\begin{aligned} f_{fi}^{DW}(\theta,\varphi)&=-\mathrm{i}^{\Delta+1}\int_0^\infty J_\Delta(\mathrm{K}'\rho)\rho d\rho\\ &\left[\int_{-\infty}^{\infty}k_f\frac{\partial C_f^b}{\partial z}\times\exp\left(i\alpha z+\frac{i}{\hbar v_f}\int_\infty^z V_{ff}dz'\right)dz\right] \end{aligned} \qquad (۶۳)$$

به دست می‌آید. مورد خاصی از نتیجهٔ موج واپیچیده، تقریب دوحالته است [۱۷] که فقط حالت اولیه و نهایی در رابطهٔ (۵۸) را شامل می‌شود و دامنهٔ پراکندگی موج واپیچیده به صورت

$$\begin{aligned} f_{fi}^{DWB}(\theta,\varphi)&=-i^{\Delta}\frac{\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty J_\Delta\left(k_f\rho\sin\theta\right)\rho d\rho.\\ &\times\int_{-\infty}^{\infty}V_{fi}\left(\vec{\rho},z\right)\exp i\left\{\left[\left(k_i-k_f\right)+\alpha\right]z+\delta\varphi(z)\right\}dz, \end{aligned} \qquad (۶۴)$$

$$\delta\varphi(z)=-\frac{1}{\hbar v_i}\int_{-\infty}^{z}V_{ii}dz-\frac{1}{\hbar v_f}\int_z^\infty V_{ff}dz, \qquad (۶۵)$$

کاهش می‌یابد. معادلات (۶۴) و (۶۵) با نتایج موج واپیچیدهٔ بورن که به وسیلهٔ چن[1] [۱۸] از یک رهیافت متفاوت به دست آمده برابر است.

برای ذرات سنگین یا حد انرژی‌های بالا با استفاده از بقای انرژی، عامل k_n-k_f در معادلهٔ جفت‌شدهٔ (۵۸) را می‌توان به صورت

$$k_n-k_f=\frac{2\varepsilon_{fn}}{\hbar\left(v_f+v_n\right)}, \qquad (۶۶)$$

نوشت. $\varepsilon_{fn}=\varepsilon_f-\varepsilon_n$ برای برخوردهایی که در آنها انرژی حرکت نسبی (انرژی جنبشی) خیلی بزرگ‌تر از انرژی تهییج است، سرعت‌ها تقریباً در تمام کانال‌ها با یکدیگر برابر بوده و درون ناحیهٔ برهم‌کنش تقریباً ثابت خواهند بود. بنابراین

۱. Chen

$k_n - k_f \simeq \frac{\varepsilon_{fn}}{\hbar v_i}$ بوده و در این صورت

$$f_{fi}^{C}(\theta,\varphi) = -i^{\Delta+1} k_i \int_0^\infty J_\Delta(\mathrm{K}'\rho) \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial C_f^C}{\partial z} e^{i\alpha z} dz \rho d\rho, \quad (۶۷)$$

است که در آن

$$\alpha \simeq \mathrm{K}_z - \frac{\varepsilon_{fi}}{\hbar v_i}, \quad (۶۸)$$

است. در رابطهٔ (۶۷) $\mathrm{K}'^2 = \mathrm{K}^2 - \frac{\varepsilon_{fi}^2}{\hbar v_i^2}$ و C_f^C در معادلهٔ جفت‌شدهٔ

$$i\hbar v_i \frac{\partial C_f^C}{\partial z} = \sum_{n=1}^{N} C_n^C V_{fn} \exp\left(i \frac{\varepsilon_{fn} z}{\hbar v_i}\right), \quad (۶۹)$$

صدق می‌کند. برای برخوردهای انرژی بالا که پراکندگی بیشتر در زوایای کوچک رخ می‌دهد، $\alpha \simeq 0$ بوده و از این رو برای زوایای کوچک $\mathrm{K}_z = \frac{\varepsilon_{fi}}{\hbar v_i}$ می‌باشد. در نتیجه

$$f_{fi}^{C(0)}(\theta,\varphi) = -i^{\Delta+1} k_i \int_0^\infty J_\Delta(\mathrm{K}'\rho) \times \left[C_f^C(\rho,\infty) - \delta_{fi}\right] \rho\, d\rho, \quad (۷۰)$$

که همان دامنهٔ پراکندگی آشنای پارامتر برخورد است [۱۹]. در حد سرعت‌های برخورد بزرگ، محاسبهٔ سطح مقطع کل ساده خواهد شد به طوری که می‌توان نوشت

$$\sigma_{fi} = 2\pi \frac{k_f}{k_i} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \left| f_{fi}(\theta,\varphi)\right|^2 \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (۷۱)$$

با استفاده از رابطهٔ (۷۰) و اینکه $k_f = k_i$، می‌توان عبارت (۷۱) را به شکل

$$\sigma_{fi} \simeq 2\pi \int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\int_0^{\infty} \{J_\Delta(\mathrm{K}'\rho) J_\Delta(\mathrm{K}'\rho') \left[C_f^C(\rho,\infty) - \delta_{fi}\right] \times \left[C_f^C(\rho',\infty) - \delta_{fi}\right]^* \rho d\rho \rho' d\rho'\} \sin\theta d\theta, \quad (۷۲)$$

بازنویسی کرد. با در نظر گرفتن $\mathrm{K}' = k_f \sin\theta$

$$\sigma_{fi} \simeq \int_0^{k_i+k_f}\int_0^{\infty}\int_0^{\infty} \{J_\Delta(\mathrm{K}'\rho) J_\Delta(\mathrm{K}'\rho') \left[C_f^C(\rho,\infty) - \delta_{fi}\right] \times \left[C_f^C(\rho',\infty) - \delta_{fi}\right]^* \rho d\rho \rho' d\rho'\} \mathrm{K}' d\mathrm{K}', \quad (۷۳)$$

است. زمانی که $k_i + k_f$ خیلی بزرگ باشد می‌توان از انتگرال

$$\int_0^\infty J(\mathrm{K}'\rho) J(\mathrm{K}'\rho') \mathrm{K}' d\mathrm{K}' = \frac{1}{\rho}\delta(\rho - \rho'), \quad (۷۴)$$

بهره گرفت. بنابراین داریم

$$\sigma_{fi} = \int_0^\infty \left| C_f^C(\rho,\infty) - \delta_{fi}\right|^2 \rho d\rho, \quad (۷۵)$$

که همان نتیجهٔ پارامتر برخورد است. یک نتیجهٔ مهم دیگر از تقریب انرژی‌های بالا با فرض

$$\frac{\varepsilon_{fn}}{v_i} \simeq 0 \quad (۷۶)$$

حاصل می‌شود. بنابراین جمع روی تمام حالت‌ها از معادلهٔ (۶۹)، معادلهٔ جفت شدهٔ

$$i\hbar \frac{\partial C_f^G}{\partial z} = \frac{1}{v_i} \sum_n C_n^G(\rho,z) V_{fn}(\rho,z), \quad (۷۷)$$

را نتیجه می‌دهد. با حل این معادله به روش تکرار C_f^G عبارت خواهد بود از

$$C_f^G(\rho,z) = \left\langle \chi_f \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar v_i}\int_{-\infty}^{z} V(\vec{R},\vec{r}) dz\right] \right| \chi_i \right\rangle, \quad (۷۸)$$

و دامنهٔ پراکندگی معادل آن به شکل

$$f_{fi}^G(\theta,\varphi) = -\frac{ik_i}{2\pi}\int e^{i\vec{\mathrm{K}}\cdot\vec{\rho}} \chi_f^*(\vec{r}) \times \left[e^{i\chi(\vec{\rho},\vec{r})} - 1\right] \chi_i(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{\rho} \quad (۷۹)$$

حاصل می‌شود، به طوری که $\chi(\vec{\rho},\vec{r})$ را می‌توان به شکل

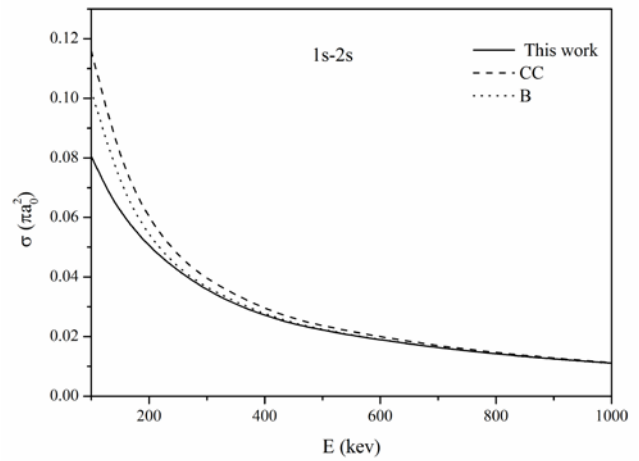
$$\chi(\vec{\rho},\vec{r}) = -\frac{1}{\hbar v_i}\int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{r},\vec{\rho},z) dz \quad (۸۰)$$

نوشت. معادلات (۷۹) و (۸۰) با عبارت‌های به دست آمده توسط گلایبر یکسان هستند.

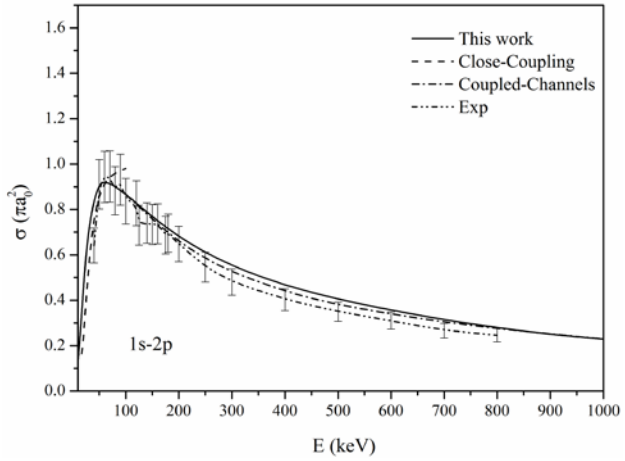
دامنهٔ پراکندگی رابطهٔ (۷۹) توسط نویسندگان این مقاله به صورت کاملاً تحلیلی محاسبه شده است و در مقالهٔ دیگری ارائه خواهد شد. قسمت کوچکی از نتایج حاصل برای سطح مقطع کل گذارهای $1s \to 2s$ و $1s \to 2p$ اتم هیدروژن در برخورد با پروتون که با استفاده از رابطهٔ

$$\sigma_{fi} = \frac{1}{k_i^2}\int_{k_i-k_f}^{k_i+k_f} dKK \int_0^{2\pi} d\varphi \left| f_{fi}(\vec{K})\right|, \quad (۸۱)$$

به دست می‌آید، در شکل‌های ۲ و ۳ به نمایش گذاشته شده است.



شکل ۲. مقایسهٔ سطح مقطع کل به دست آمده از محاسبات با کارهای نظری تقریب بورن [۲۱] و کانال های جفت‌شده [۲۰] برای گذار از حالت پایه به تراز ۲s در محدودهٔ انرژی ۱۰۰ keV تا ۱ MeV.



شکل ۳. مقایسهٔ سطح مقطع کل به دست آمده از محاسبات با کارهای نظری تقریب جفت‌شدگی نزدیک [۲۲]، کانال‌های جفت‌شده [۲۰] و نتایج تجربی [۲۳] برای گذار از حالت پایه به تراز ۲p در محدودهٔ انرژی ۱۰ keV تا ۱ MeV.

در شکل ۲ سطح مقطع کل تراز ۲s با نتایج رهیافت کانال های جفت‌شده[۱] (CC) [۲۰] و تقریب بورن [۲۱] در محدودهٔ انرژی ۱۰۰ keV تا ۱ MeV مقایسه شده است. خاطر نشان می شود نتایج تقریب بورن ذکر شده با نتایج تجربی تطبیق داده شده‌اند، درحالی‌که محاسبات انجام شده مطلق هستند. شکل ۳ مقایسهٔ سطح مقطع محاسبه شده برای گذار ۲p با نتایج حاصل از روش کانال‌های جفت‌شده [۲۰]، جفت‌شدگی نزدیک[۲] [۲۲] و نتایج تجربی [۲۳] در محدودهٔ انرژی ۱۰ keV تا ۱ MeV را نمایش می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود نتایج کار حاضر که یک روش نیمه کلاسیکی است در نواحی انرژی‌های بالا، و انرژی‌های میانی همخوانی بسیار خوبی با نتایج تجربی و نظریه‌های دیگر دارد، و از طرفی بر خلاف نظریه‌های دیگری مانند جفت‌شدگی نزدیک که محاسبات پیچیده‌ای را شامل می‌شود این محاسبات با رایانه‌های شخصی به راحتی قابل انجام است.

۱. Coupling channels

۲. Close-coupling

مراجع

1. S Sen, P Mandal and P K Mukherjee, *Phys. J.* D **62** (2011) 379.
2. D R Schultz, P S Krstic, T G Lee, and J C Raymond, *Astrophys. J.* **678** (2008) 950.
3. P Toivanen, M Kortelainen, J Suhonen, and J Toivanen, *Physics Letters* B **666** (2008) 1.
4. E Meeks and P ho, *Thin Solid Film*. **365** (2000) 334.
5. ر فتحی، ف شجاعی‌اکبرآبادی، م بلوری‌زاده، *مجله پژوهش فیزیک ایران* **۱۳**، ۱ (۱۳۹۲) ۷۷.
5. R Fathi, F Shojaei Akbarabadi, and M A Bolorizadeh, *Iranian Journal of Physics Research* **13**, 1 (2013) 77.
6. D R Bates, پ*Quantum Theory I. Elements*ب Academic Press, New York (1961).
7. M Inokuti, *Rev. Mod. phys*. **43** (1971) 297.
8. P G Burke, S Ormonde, and W Whittaker, *Proc. Phys. Soc*. **92** (1967) 319.
9. B H Bransden, پ*Atomic Collision Theory*ب W A Benjamin, Inc., New York (1970).
10. M R Flannery, *J. Phys*. B: *Atom. Molec. Phys*. **2** (1969) 913.
11. D R Bates and A R Holt, *Proc. Roy. Soc*. A **292** (1966) 168.
12. D R Bates and D S F Crothers, *Proc. Roy. Soc*. A **315** (1970) 465.
13. M R Flannery, *Ann. phys*. **61** (1970) 465.
14. J J Thomson, *Phil. Mag*. **47** (1924) 337.
15. L Vriens, پ*Case Studies in Atomic Collision Physics*ب E W McDaniel and M R C McDowell, North Holland (1969) 337.
16. E Gerjuoy and B K Thomas, *Rep. Prog. Phys*. **37** (1974) 1345.
۱۷. ا قنبری عدیوی، مجله پژوهش فیزیک ایران**۹**، ۲ (۱۳۸۸) ۱۵۶.
17. E Ghanbari Adivi, *Iranian Journal of Physics Research* **9**, 2 (2009) 156.
18. J C Y Chen and K M Watson, *Phys. Rev*. A **5** (1972) 2460.
19. M R Flannery and K J McCann, *Phys. Rev*. A **8** (1973) 2915.
20. A L Ford, J F Reading, and K A Hall, *J. Phys*. B: *At. Mol. Opt.* **26** (1993) 4537.
21. C R Mandal, Mita Mandal, and S C Mukherjee, *Phys. Rev*. A **42** (1990) 1787.
22. I M Cheshire, D F Gallaher, and A Joanna Tylor, *J. Phys*. B: *Atom. Molec. Phys*. **3** (1970) 813.
23. D Detleffsen, M Anton, A Werner, and K H Schartner, *J. Phys*. B: At. *Mol. Opt. Phys*. **27** (1994) 4195.