

محاسبه سطح مقطع جزئی انتقال حالت به حالت بار به روش فادیف

ابراهیم قنبری و محمد بلوریزاده

بخش فیزیک، دانشگاه شهید باهنر، کرمان، ایران
و مرکز بین‌المللی علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، کرمان، ایران

(دریافت مقاله: ۸۱/۱/۱۹ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۱/۹/۲)

چکیده

در این مطالعه فرمولبندی پراکندگی فادیف-واتسون-لاولاس (FWL) در تقریب دوم برای کانال بازچینی در برخورد های سه جسمی به کار رفته است. برای محاسبه دامنه پراکندگی از ماتریسهای گذار دو جسمی تعمیم یافته کولنی خارج از پوسته انرژی استفاده شده است. محاسبات برای برخورد یونهای پراثرژی ولی نانسیتی یک بار مثبت با هدفهای خنثی که یک الکترون فعال دارند انجام شده و شامل برهمکنشهای بین هسته ای و هسته-الکترونی است. دامنه های جزئی ربایش الکترون برای گذارهای مختلف ($n'l'm \rightarrow n'l'm'$) با ترکیبی از روشهای تحلیلی و عددی محاسبه شده اند و در نهایت برای بدست آوردن سطح مقطع جزئی انتقال الکترون در برخورد پروتون با هیدروژن به کار رفته اند. سطح مقطع گذارهای مختلف با هم مقایسه شده و سپس مجموع آنها به عنوان سطح مقطع گذار به همه حالتها محاسبه شده است. نتایج حاصل با داده های آزمایشگاهی مقایسه شده است که توافق خوبی را نشان می دهد.

واژه‌های کلیدی: ربایش الکترون، انتقال بار، سطح مقطع جزئی، فرمولبندی فادیف، ماتریس گذار، دامنه پراکندگی

۱. مقدمه

می‌شود. در ربایش تابشی، هسته ها تقریباً نقشی بازی نمی کنند و به همین دلیل در پایین ترین مرتبه تقریبی انجام شده بر همکنش پروتون-پروتون را در محاسبات نادیده می گرفتند و در نتیجه سطح مقطع کل محاسبه شده با نتایج آزمایشگاهی تفاوت زیادی داشت. بیشتر از دو دهه بعد جکسون و شیف [۳] نشان دادند که گنجاندن سهم مربوط به برهمکنشهای بین هسته‌ای در محاسبات مربوطه توافق بین روشهای نظری و آزمایشگاهی را به مراتب بهتر می کند. ولی به زودی مشخص شد که وقتی تقریب جکسون-شیف (JS) را برای محاسبه سطح مقطع جزئی به کار می بریم با مشکلات جدی مواجه می شویم. در مکانیزم دوم هسته فرودی و هسته هدف بدون مختل کردن قابل ملاحظه الکترون، جای خود را عوض می کنند، ولی

فرایند انتقال بار در برخوردهای یون- اتمی یکی از مسائل قدیمی است که هنوز به طور کامل حل نگردیده است. در این فرایند نسبتاً پیچیده در سرعتهای فرودی نانسیتی و بالا مکانیزمهای متفاوتی وجود دارند که هر یک می تواند سهم مهمی در سطح مقطع ربایش الکترون در سرعتهای بالا داشته باشد، این مکانیزمها عبارتند از: تابشی، رودرو و پراکندگی دوگانه. اولین مطالعات نظری بر روی فرایند انتقال بار الکتریکی در برخوردهای یون- اتمی هفت دهه پیش با بررسی ربایش تابشی توسط اپنهايمر [۱] آغاز گردید و با کار بریکمن و کرامرز [۲] ادامه یافت. در این مکانیزم در اثر فرود آمدن پروتون بر اتم هیدروژن ضمن انتقال الکترون یک فوتون پراثرژی γ تابش

دارند. فرمولبندهای "موج واپیچیده بورن" (DWB) [۷]، "موج واپیچیده پیوسته" (CDW) [۸ و ۹]، "تقریب اول تصحیح شده مرزی بورن" (BIB) [۹، ۱۰ و ۱۱] و فرمولبندی "پتانسیل قوی بورن" (SPB) [۱۲] از این دسته اند. دسته دوم فرمولبندهای مبتنی بر رهیافت فادیف هستند. رهیافت فادیف بر اساس تبدیل برخوردهای سه یا چند جسمی به برخوردهای دو جسمی بنا گردیده است. مزیت رهیافت فادیف که رهیافتی کاملاً کوانتومی است، در استفاده از عملگرهای گذار دو جسمی به جای پتانسیلهای برهمکنش دو جسمی نهفته است. عملگرهای گذار دو جسمی خود شامل بی نهایت جمله از جملات بورن هستند و دامنه فراتری از برهمکنشها را در بر می گیرند. در این فرمولبندی سهم برهمکنشهای بین هسته ای که اغلب مخالف صفر است نیز محاسبه می گردد. به همین دلیل انتظار می رود که نتایج حاصل از فرمولبندی فادیف قویتر و بهتر از سایر فرمولبندها باشد. دلیل دیگر این ادعا آن است که تا زمانی که سطح مقطع کل مورد نظر است، روشهای اختلالی مبتنی بر رهیافت بورن اغلب توافق خوبی با آزمایش دارند، اما وقتی که برای آزمودن بهتر و جدی تر مدل‌های نظری سطح مقطعهای جزئی را نیز با داده های آزمایشگاهی مقایسه می کنیم، می بینیم که چنین مقایسه ای توافق چندان مطلوبی را نشان نمی دهد. یکی از دلایل این امر آن است که تقریبهای ذکر شده اغلب تک کانالی هستند بدین معنا که سهم بازچینی ذره‌ای نهائی ناشی از سایر کانالهای واکنشی و نیز تداخل بین حالت‌های مختلف در یک کانال معین را شامل نمی شوند. حال آنکه روشهای مبتنی بر رهیافت فادیف همه کانالهای واکنشی ممکن را در بر می گیرند و سطح مقطع کل را به عنوان نتیجه‌ای از توصیف صحیحی از سطح مقطعهای جزئی متناظر بدست می دهد.

با این حال به کارگیری رهیافت سه جسمی فادیف در برخوردهای یون-امی خالی از اشکال نیست. مهمترین مسئله ساختار تکینگی پیچیده ماتریسهای کولنی T خارج از پوسته است که عنصر دینامیکی پایه و اساسی فرمولبندی فادیف است، بدین معنا که ماتریسهای کولنی T حد معینی روی پوسته ندارند و در برهمکنشهای جاذبه تعداد نامتناهی ای قطب که متناظر با حالت‌های مقید است دارند. علی رغم این مسئله دو دسته از محاسبات وجود دارند که بر اساس این فرمولبندی انجام شده‌اند. دسته اول بر استفاده مستقیم از ماتریسهای گذار دو

این فرایند فقط در صورتی اتفاق می افتد که دو هسته جرم‌های مساوی یا تقریباً مساوی داشته باشند. این فرایند اولین بار توسط ماپلتون [۴] بررسی شد و اغلب به عنوان فرایند رودرو شناخته می شود که در آن هسته فرودی همه انرژی جنبشی خود را به هسته هدف می دهد و آن را به سمت جلو می راند ولی الکترون پشت سر آن باقی می ماند و به هسته فرودی که ساکن شده مقید می گردد. این مکانیزم نوعی پراکندگی یگانه است که با اولین جمله بورن که در آن برهمکنش بین دو هسته به عنوان اختلال فرض می شود توصیف می گردد.

مکانیزم سوم که شاید در تقریبهای مرتبه بالا پیچیده‌ترین و مهمترین آنها باشد، فرایند پراکندگی دوگانه است که ابتدا به وسیله توماس [۵] در چارچوب کلاسیکی و سپس به وسیله دریسکو [۶] در چارچوب مکانیک کوانتومی طرح و تحلیل گردید. در این مکانیزم دو مرحله ای که به آن مکانیزم توماس گفته می شود، الکترون ابتدا به وسیله هسته پرتابه و سپس به وسیله هسته هدف پراکنده می شود به گونه ای که پس از برهمکنش، تقریباً همان سرعت پرتابه که در طول برخورد تغییر چندانی نکرده است را می گیرد و در نهایت به هسته پرتابه مقید می گردد.

اگر چه هیچکدام از مطالعات بالا نظریه جامعی برای مسئله بازچینی ارائه نمی دهد، و تعمیم هر یک از آنها به سایر جنبه‌های فرایند انتقال بار با مشکلات ذاتی مواجه می شود، ولی پایه ای برای پیشرفت‌های قابل ملاحظه در درک نظری فرایند مورد نظر در سالهای بعدی شدند.

همانگونه که در بالا اشاره شد، بررسی کوانتومی نسبتاً دقیق فرایند ربایش الکترون در تقریب مرتبه دوم با کار دریسکو آغاز گردید. وی استدلال کرد که پراکندگی دو گانه کلاسیکی فرایندی دو مرحله‌ای است و بنابراین متناظر با جمله دوم تقریب بورن در تفسیر کوانتومی است، حال آنکه پراکندگیهای یگانه متناظر با تقریب اول بورن هستند. بر اساس این استدلال و با توجه به نظریه های ارائه شده در سالهای اخیر می توان همه آنها را به دو دسته مجزا تقسیم نمود. دسته اول فرمولبندهای مبتنی بر روشهای اختلالی هستند که پتانسیلهای دو جسمی بین پرتابه، هدف و الکترون به عنوان پتانسیلهای اختلال، برخوردهای چندگانه بین سه ذره را توصیف می کنند و از این جهت نقش اساسی را در فرمولبندهای مذکور به عهده

$$1 + (2+3) \rightarrow \begin{cases} 1 + (2+3)^* \\ 1 + 2 + 3 \\ (1+2)^* + 3 \end{cases} \quad (1)$$

کانال خروجی اول می تواند شامل پراکندهای الاستیک و غیر الاستیک باشد. در پراکندهای الاستیک حالت دستگاه (۲+۳) بدون تغییر می ماند، حال آنکه در فرایند غیر الاستیک حالت دستگاه (۲+۳) تغییر کرده و به حالت برانگیخته بالاتری می رود که به آن تهیج می گوئیم. کانال خروجی دوم متناظر با فرایند شکستی یا یونیزاسیون است که در آن هر سه ذره پس از برخورد به طور آزاد منتشر می شوند، در واقع اثر برخورد آن بوده است که قید میان زوج مقید (۲+۳) شکسته شده است. کانال خروجی سوم متناظر با فرایند باز چینی است.

سریهای پراکندهای چند گانه فادیف-واتسون-لاولاس (FWL) برای عملگرهای گذار متناظر با کانالهای خروجی فوق به ترتیب عبارتند از [۱۹]:

$$T_S = T_r + T_r + T_r G_0^{(+)} T_r + T_r G_0^{(+)} T_r + \dots \quad (2)$$

$$T_B = T_r + T_r + T_r G_0^{(+)} T_r + T_r G_0^{(+)} T_r + T_r G_0^{(+)} T_r + \dots \quad (3)$$

$$T_R = V^r + T_r + T_r G_0^{(+)} T_r + T_r G_0^{(+)} T_r + T_r G_0^{(+)} T_r + \dots \quad (4)$$

که در آن ماتریس گذار دو جسمی T_i برهمکنش میان ذرات j و k را نشان می دهد حال آنکه ذره i ام آزاد است. این ماتریس به صورت زیر تعریف می شود:

$$T_i = V^i + V^i G_0^{(+)} T_i \quad (5)$$

$V^i = V_{ijk}$ پتانسیل برهمکنش بین ذرات j و k است و $\{i, j, k\}$ جایگشتی چرخه ای است. $G_0^{(+)}$ عملگر گرین انتشار آزاد است که شرایط اعمال شده بر روی موج خروجی را در بر دارد. برای بدست آوردن دامنه های پراکندهای متناظر با کانالهای فوق باید عناصر ماتریسهای گذار T_S ، T_B و T_R را بین حالتهای اولیه i و نهائی f دستگاه محاسبه کنیم.

اکنون ربایش الکترون را که در واقع نوعی فرایند باز چینی است در نظر می گیریم. فرض کنیم که یون پرتابه P با جرم M_p و بار Z_p روی دستگاهی فرود آید که در آن الکترون فعال e با جرم $m=1$ به هدف T 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 خواهیم داشت، حال آنکه ذره سوم آزادانه در حال انتشار است

جسمی تاکید دارند. نمونه هائی از این محاسبات را می توان در کارهای آلستون [۱۳و۱۴] و دیگران [۱۵] دید. وی به روشی که در بالا به آن اشاره شد سطح مقطع جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون با اتمهای هیدروژن و هلیوم در گذار $1s \rightarrow 1s$ را محاسبه نمود. این مقاله در واقع تعمیم محاسبات وی به سایر گذارهای ممکن است. دسته دوم با عنوان "رهیافت پارامتر فشردهای فادیف" (I PFA) [۱۶] شناخته شده اند و پایه آن توسط آلت، گراسبرگر و سندهااس (AGS) [۱۷] بنا شده است. آخرین محاسبات موجود با این روش را می توان در کارهای آلت و همکارانش [۱۸] دید.

طرح مقاله به صورت زیر است. در بخش دوم خلاصه ای از فرمولبندی FWL با تاکید بر روی فرایند بازچینی در برخوردهای سه جسمی و شکل انتگرالی دامنه های جزئی ربایش الکترون را آورده ایم. در بخش سوم به محاسبه دامنه ها پرداخته ایم و در بخش آخر نتایج محاسبات و مقایسه آنها با نتایج آزمایشگاهی موجود و نیز مقایسه سهم گذارهای مختلف در سطح مقطع گذار به همه حالتها آمده است. در طول بحث از یکاهای اتمی استفاده کرده و ذره آزاد را به صورت $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ بهنجار نموده ایم.

۲. رهیافت فادیف

اگر چه شرح مبسوطی از رهیافت فادیف را می توان در مجموعه ای از کتب و مقالات [۱۹ و ۲۰] دیگر یافت، ولی به منظور خود شمول بودن بحثمان خلاصه ای از نظریه پراکندهای سه ذره ای فادیف و جنبه های سینماتیکی آن به ویژه کانال متناظر با فرایند بازچینی را در اینجا می آوریم.

سه ذره بنیادی ۱، ۲ و ۳ را در نظر می گیریم. بدین معنا که فرض می کنیم سه ذره فاقد ساختار داخلی بوده و یا حداقل ساختار داخلی آنها در طول برخورد تغییر نکند. علاوه بر این فرض می کنیم که در کانال اولیه دستگاه، ذره ۱ آزاد است و بر زوج مقید (۲+۳) فرود می آید. دستگاه مقید (۲+۳) می تواند در حالت زمینه یا یکی از حالت های برانگیخته خود باشد. در اثر برهمکنش میان سه ذره و بسته به شرایط اولیه برخورد، این برهمکنش می تواند به کانالهای خروجی متفاوتی منجر شود که از آن جمله می توانیم سه کانال زیر را در نظر بگیریم که در آن علامت * نشانگر حالت برانگیخته دستگاه است

داریم

$$A_n = A_n^{(i)} + A_n^{(ra)} + A_n^{(rb)}, \quad (15)$$

که در آن

$$A_n^{(i)} = \langle f | T_{PT} | i \rangle, \quad (16)$$

$$A_n^{(ra)} = \langle f | T_{Te} G_o^{(+)} T_{PT} | i \rangle,$$

$$A_n^{(rb)} = \langle f | T_{PT} G_o^{(+)} T_{Pe} | i \rangle.$$

جمله $A_n^{(i)}$ در بر گیرنده پراکندگی هسته ای مرتبه اول P و T است، $A_n^{(ra)}$ دامنه پراکندگی است که در آن ابتدا P و T و سپس T و e با هم برهمکنش می نمایند و $A_n^{(rb)}$ متناظر با پراکندگی است که در آن ابتدا T و e و سپس T و P با هم برهمکنش می کنند.

برای محاسبه پراکندگی A_{FWL} باید جملات موجود در دامنه های جزئی A_e و A_n را محاسبه کنیم. لازمه این کار آن است که ماتریسهای گذار دو جسمی T_{Te} ، T_{Pe} و T_{PT} را داشته باشیم. ما در اینجا ماتریس گذار تعدیل یافته کولنی نزدیک پوسته انرژی را که آلستون [۱۳] مورد استفاده قرار داده است به کار می بریم. وی نشان داده است که برای یونهای تک باری که روی اتمهای خشی فرود می آیند دامنه کل فرمولبندی فادیف در تقریب مرتبه دوم خوش تعریف است، بدین معنی که در ماتریس گذار دو جسمی متناظر تکنیکیهای انتگرال ناپذیر وجود ندارند. بنابراین می توانیم تقریبهایی را در آن اعمال کنیم. در اینجا شکلی از ماتریسهای گذار دو جسمی نزدیک پوسته انرژی مورد استفاده قرار گرفته است که خطای آن از مرتبه نسبت بار یونهای پرتابه و هدف به سرعت فرودی است. یعنی دامنه های جزئی تا مرتبه $(Z_T/v)^2$ و (Z_P/v) تقریب زده شده اند. در ادامه محاسبات از جملات مرتبه m/M (یا M_T یا M_P) صرف نظر می کنیم و ربایش الکترون تحت زوایای مستقیم را در نظر می گیریم. اگر ربایش الکترون تحت زوایای مستقیم صورت گیرد، $v \cong v_i \cong v_f$ است.

قبل از پرداختن به محاسبه دامنه ها، شکل انتگرالی آنها را در اینجا می آوریم. با وارد کردن عملگرهای همانی در دو مولفه معادله (۱۲)، انتگرال گیری روی توابع دلتا که حرکت ذره آزاد سوم را توصیف می کنند، صرف نظر کردن از جملاتی که از مرتبه نسبت جرم الکترون به جرم یونهای پرتابه و هدف هستند و انجام محاسبات ریاضی لازم، داریم:

$$P + (T + e) \rightarrow (P + e)^* + T. \quad (6)$$

هم هدف T و هم پرتابه P می توانند دارای الکترونهای غیر فعال و ساختار داخلی باشند، ولی در اینجا فرض می کنیم که این ساختار داخلی در طول برخورد بدون تغییر می ماند.

هم در کانال اولیه و هم در کانال نهائی فرض می کنیم که برهمکنش بین ذرات با پتانسیل کولنی و با بار مؤثر Z° انجام می گیرد، بنابراین ماتریس گذار T_R در تقریب دوم به صورت زیر است:

$$T_R = V_{Pe} + T_{PT} + T_{Te} G_o^{(+)} T_{PT} + T_{Te} G_o^{(+)} T_{Pe} + T_{PT} G_o^{(+)} T_{Pe}. \quad (7)$$

اگر جملاتی که پراکندگی مستقیم الکترون را در بر دارند و بر همکنش هسته - الکترونی را شامل می شوند با T_e و جملاتی را که پراکندگی غیر مستقیم الکترون یا به عبارت دیگر بر همکنشهای بین هسته ای را شامل می شوند با T_n نشان دهیم داریم:

$$T_e = V_{Pe} + T_{Te} G_o^{(+)} T_{Pe}, \quad (8)$$

$$T_n = T_{PT} + T_{Te} G_o^{(+)} T_{PT} + T_{PT} G_o^{(+)} T_{Pe}, \quad (9)$$

$$T_R = T_e + T_n. \quad (10)$$

برای به دست آوردن سطح مقطع پراکندگی باید دامنه پراکندگی A_{FWL} را محاسبه کنیم. با تشکیل عنصر ماتریس گذار T_R بین حالتیهای پراکندگی مجانبی اولیه و نهائی، دامنه ربایش الکترون در تقریب دوم FWL با انرژی کل E به شکل زیر است:

$$A_{FWL} = \langle f | T_R | i \rangle = \langle f | T_e | i \rangle + \langle f | T_n | i \rangle = A_e + A_n, \quad (11)$$

که در آن A_e دامنه پراکندگی جزئی مربوط به پراکندگی مستقیم الکترون است، و از این به بعد آن را دامنه پراکندگی هسته - الکترونی می نامیم. A_e شامل دو جمله است:

$$A_e = \langle f | T_e | i \rangle = A_{B_1} + A_e^{(v)} \quad (12)$$

A_{B_1} دامنه جزئی تقریب اول برون است و با

$$A_{B_1} = \langle f | V_{Pe} | i \rangle, \quad (13)$$

داده می شود. $A_e^{(v)}$ دامنه جزئی مرتبه دوم را نمایش می دهد که سایر جملات مرتبه بالاتر برون را در بر دارد

$$A_e^{(v)} = \langle f | T_{Te} G_o^{(+)} T_{Pe} | i \rangle. \quad (14)$$

جمله A_n دامنه پراکندگی مربوط به پراکندگیهای غیر مستقیم الکترون است و از این پس آن را دامنه بین هسته ای می نامیم و

$$\phi_{nlm}(\mathbf{p}) = R_{nl}(\mathbf{p})Y_{lm}(\hat{\mathbf{p}}), \quad (24)$$

که در آن $R_{nl}(\mathbf{p})$ قسمت شعاعی تابع موج است و هماهنگی کروی $Y_{lm}(\hat{\mathbf{p}})$ توزیع زاویه ای آن را نشان می دهد و داریم:

$$R_{nl}(\mathbf{p}) = N_{nl} \frac{p^l}{(p^2 - \epsilon_n)^{l+1/2}} C_{n-l-1}^{l+1/2} \left(\frac{p^2 + \epsilon_n}{p^2 - \epsilon_n} \right),$$

$$N_{nl} = (\pi)^{1/2} \left(\frac{\gamma^{l+1/2} n(n-1-\gamma)!}{\pi(n+1)!} \right)^{1/2} l! (-\epsilon_n)^{(l+1/2)/\gamma},$$

$$\epsilon_n = -Z^2 / \nu n^2. \quad (25)$$

$C_{n-l-1}^{l+1/2}(x)$ ها چند جمله ایهای ججن باور هستند.

با این مقدمه اکنون به محاسبه دامنه های جزئی پراکندگی برای گذار $(nlm \rightarrow n'l'm')$ می پردازیم، که در آن (n,l,m) مجموعه اعداد کوانتومی متناظر با حالت اولیه الکترون در هنگام مقید بودن به هسته هدف و مجموعه اعداد کوانتومی $(n'l'm')$ متناظر با حالت مقید نهایی الکترون به یون پرتابه است.

۱.۳. محاسبه دامنه های هسته-الکترونی

الف) تقریب مرتبه اول بورن A_{B1}

با ترکیب مستقیم معادله شرودینگر برای پتانسیل دو جسمی V_{Pe} و معادله (۱۷) می توان جمله متناظر با تقریب مرتبه اول بورن را به صورت زیر ساده کرد

$$A_{B1} = -\pi^2 (K^2 - \epsilon_f) \phi_f^*(\mathbf{K}) \phi_i(-\mathbf{J}). \quad (26)$$

با جایگذاری تابع موج (۲۴) در معادله (۲۶) داریم

$$A_{B1} = -\pi^2 (K^2 - \epsilon_n)^{-1} R_{nl}(\mathbf{K}) R_{n'l'}(\mathbf{J}) Y_{lm}^*(\mathbf{K}) \times Y_{l'm'}(\hat{\mathbf{J}}), \quad (27)$$

که در آن از این حقیقت که $Y_{lm}(-\hat{\mathbf{J}}) = (-1)^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{J}})$ استفاده کرده ایم.

ب) دامنه هسته-الکترونی مرتبه دو $A_e^{(2)}$

با جایگزینی ماتریسهای گذار دو جسمی مناسب در معادله (۱۸) به نتیجه زیر می رسیم:

$$A_e^{(2)} = B \int d\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_f \phi_f^*(\mathbf{k}_f) \phi_i(\mathbf{k}_i) (k_i^2 - \epsilon_i)^{-p} \times (k_f^2 - \epsilon_f)^{-\mu} (\xi + \nu \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{K} - \nu \mathbf{k}_f \cdot \mathbf{J} + i\eta)^{-1-\tau}, \quad (28)$$

که در آن

$$B = \left(\frac{\nu}{\pi} \right)^{\tau} Z_P Z_T e^{i\pi\tau} \frac{\Gamma(1+\rho) \Gamma(1-\sigma)}{\Gamma(1+\sigma)} \times \frac{\Gamma(1+\mu) \Gamma(1-\nu)}{\Gamma(1+\nu)}$$

$$A_{B1} = (\pi)^{-\tau} \phi_i(-\mathbf{J}) \int d\mathbf{k}_f \phi_f^*(\mathbf{k}_f) V_{Pe}(\mathbf{k}_f - \mathbf{K}), \quad (17)$$

$$A_e^{(2)} = (\pi)^{-\tau} \int d\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_f \phi_f^*(\mathbf{k}_f) \phi_i(\mathbf{k}_i) T_{Te}(\mathbf{k}_f + \mathbf{v}, \mathbf{k}_f + \mathbf{k}_i - \mathbf{K}; E_f) G_o^{(+)}(E_i) T_{Pe}(\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_f + \mathbf{J}, \mathbf{k}_i - \mathbf{v}; E_i). \quad (18)$$

انجام فرایند مشابه روی سه مولفه معادله (۱۵) به نتیجه زیر منجر می شود:

$$A_n^{(1)} = \int d\mathbf{k}_i \phi_f^*(\mathbf{k}_i - \mathbf{v}) \phi_i(\mathbf{k}_i) T_{PT}(\mu_n \mathbf{v} - \mathbf{k}_i - \mathbf{J}, \mu_n \mathbf{v}; E_n), \quad (19)$$

$$A_n^{(2a)} = (\pi)^{-\tau} \int d\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_f \phi_f^*(\mathbf{k}_f) \phi_i(\mathbf{k}_i) T_{Te}(\mathbf{k}_f + \mathbf{v}, \mathbf{k}_i; E_f) G_o^{(+)}(E_f) T_{PT}(\mu_n \mathbf{v} + \mathbf{K} - \mathbf{k}_f, \mu_n \mathbf{v}; E_n), \quad (20)$$

$$A_n^{(2b)} = (\pi)^{-\tau} \int d\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_f \phi_f^*(\mathbf{k}_f) \phi_i(\mathbf{k}_i) T_{PT}(\mathbf{k}_f - \mathbf{J} - \mathbf{k}_i, \mu_n \mathbf{v}; E_n) G_o^{(+)}(E_i) T_{Pe}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i - \mathbf{v}; E_i), \quad (21)$$

که در آن $\mu_n = M_P M_T / (M_P + M_T)$ جرم کاهش یافته ذرات سنگین، \mathbf{v} سرعت پرتابه و \mathbf{K} و \mathbf{J} بردارهای اندازه حرکت انتقالی به یونهای P و T در طول برخورد هستند. انرژیهای پراکندگی E_n و E_f ، E_i در تقریب مورد نظر عبارتند از:

$$E_i = \frac{1}{\nu} v^2 - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_i + \epsilon_i; \quad E_f = \frac{1}{\nu} v^2 + \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_f + \epsilon_f; \quad (22)$$

$$E_n = \frac{1}{\nu} \mu_n v^2.$$

تابع گرین آزاد برای انرژی کل E با رابطه زیر به انرژیهای پراکندگی مربوط می شود

$$G_o^{(+)}(E) = \left[E_i - (\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_f + \mathbf{J})^2 / \nu + i\eta \right]^{-1} = G_o^{(+)}(E_i)$$

$$= \left[E_f - (\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_f - \mathbf{K})^2 / \nu + i\eta \right]^{-1} = G_o^{(+)}(E_f)$$

$$= \left[E_n - (\mu_n \mathbf{v} + \mathbf{k}_i + \mathbf{J})^2 / \nu \mu_n + i\eta \right]^{-1} = G_o^{(+)}(E_n). \quad (23)$$

مشروح محاسبات فوق را می توان در مراجع [۱۳ و ۱۵] یافت.

۳. محاسبه دامنه های جزئی پراکندگی

تابع موج اتم هیدورژن ماندی که حالت آن با مجموعه اعداد کوانتومی (n,l,m) توصیف می شود در فضای اندازه حرکت عبارت است از [۸]:

لذا برای محاسبه مقدار آن به روش عددی متوسل می شویم. در انتگرال سه گانه فوق، انتگرال اول صرفنظر از یک مقدار ثابت، نوعی تبدیل فوریه است، حال آنکه انتگرالهای دوم و سوم تبدیلات هانکل می باشند. به دلیل ماهیت نوسانی تابع نمائی e^{iax} و توابع بسل کروی نوع اول، محاسبه انتگرال در فرکانسهای بالا حتی به روش عددی نیز مشکل است. ولی بررسی بیشتر انتگرالدها، ما را در فائق آمدن بر این مشکل یاری می سازد. در واقع هر سه انتگرالده توابعی با میرایی سریع هستند. در انتگرال گیری نسبت به پارامتر x توجه می کنیم که توابع بسل در شناسه های بزرگ به صورت $j_1(x) = \sin(x - \frac{1}{2}\pi)/x$ افت می کنند. علاوه بر این با بزرگ شدن مقدار x مقدار انتگرالهای درونی کوچکتر و کوچکتر می شود، بنابراین انتگرالده نسبت به پارامتر x سریعتر از $1/x^2$ افت می کند. از طرف دیگر قسمتهای شعاعی توابع موج اولیه و نهائی در اطراف $p=0$ جایگزیده هستند و در p های بزرگ سریعاً به سمت صفر میل می کنند، چرا که در p های بزرگ چند جمله ایهای ججن باور موجود در این توابع طبق رابطه $C_n^{(\lambda)}(1) = \binom{\lambda+n-1}{n}$ به سمت مقدار ثابت میل می کنند و بنابراین کل تابع به صورت $p^{-1/4}$ بر حسب p افت خواهد کرد، که برای l های بزرگ سریعتر افت می کنند. علاوه بر این، انتگرال فوق به ازای $a=0$ دارای یک ماکزیمم موضعی است که متناظر با قلّه توماس در بحث مربوط به فرایند ربایش الکترون است. با توجه به مطالب فوق می توان از روشهای کلاسیکی برای محاسبه عددی انتگرال فوق بهره جست.

۳.۲. محاسبه دامنه های بین هسته ای

$A_n^{(1)}$ الف) دامنه بین هسته ای مرتبه اول

با جایگذاری ماتریس گذار دو جسمی مناسب در رابطه (۱۹) داریم

$$A_n^{(1)} = B' \int d\mathbf{k}_i \phi_f^*(\mathbf{k}_i - \mathbf{v}) \phi_i(\mathbf{k}_i) \times \left\{ \left[\mathbf{k}_i - \mathbf{v} \right]^{\gamma} - \nu \varepsilon_f \right\} \left(k_i^{\gamma} - \nu \varepsilon_i \right) \left| \mathbf{k}_i + \mathbf{J} \right|^{-\gamma - \nu}, \quad (38)$$

که در آن δ و γ مانند قبل حاصل ضرب پارامترهای زمر فیلد در $\sqrt{-1}$ هستند به طوری که $\gamma = iZ_p Z_T / v$ و $\delta = iZ_p Z_T^a / v$ و B' ضربی به صورت زیر است:

$$(\nu v^{\gamma})^{\gamma - \sigma - \nu} J^{-\gamma + \nu} K^{-\gamma + \nu}, \quad (29)$$

μ, σ, ν حاصل ضرب پارامترهای زمر فیلد در $\sqrt{-1}$ و τ حاصل جمع μ و ρ است.

$$\rho = iZ_p^a / v; \quad \mu = iZ_T^a / v; \quad \sigma = iZ_p / v; \quad (30)$$

$$\nu = iZ_T / v; \quad \tau = \rho + \mu$$

علاوه بر این از تابع گرین تقریبی استفاده کرده ایم که بر حسب \mathbf{k}_f و \mathbf{k}_i خطی است. در این تابع گرین $K^{\gamma} - \nu \varepsilon_f = v^{\gamma} - J^{\gamma} + \nu \varepsilon_i = v^{\gamma} - K^{\gamma} + \nu \varepsilon_f$ است.

انتگرال فوق شش بعدی بوده و دارای خط برشهایی در فضای مختلط است. برای گریز از این خط برشها و ساده تر کردن انتگرال از تساوی زیر استفاده می کنیم:

$$\beta^{-1-\tau} = \frac{1}{\Gamma(1+\tau)} \int_0^{\infty} dx x^{\tau} e^{-\beta x}, \quad \text{Re}(\beta) > 0, \quad (31)$$

$\text{Re}(\tau) > -1$.

پس داریم

$$A_e^{(\nu)} = C \int_0^{\infty} dx x^{\tau} \int d\mathbf{k}_i \phi_i(\mathbf{k}_i) (k_i^{\gamma} - \nu \varepsilon_i)^{-\rho} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{K}x} \int d\mathbf{k}_f \phi_f^*(\mathbf{k}_f) (k_f^{\gamma} - \nu \varepsilon_f)^{-\mu} e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{J}x}, \quad (32)$$

که در آن

$$C = B \times \frac{\exp[-i(1+\tau)\pi/\nu]}{\Gamma(1+\tau)}. \quad (33)$$

با بسط جملات نمائی بر حسب توابع هماهنگ کروی و توابع بسل کروی نوع اول $j_1(x)$ به صورت:

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \nu \pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^{-l} j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (34)$$

و استفاده از شرایط تعامد توابع هماهنگ کروی

$$\int d\hat{\mathbf{r}} Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l'm'}(\hat{\mathbf{r}}) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (35)$$

و با کمی ساده سازی ریاضی در نهایت داریم

$$A_e^{(\nu)} = D Y_{l'm'}^*(\hat{\mathbf{K}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{J}}) \times \int_0^{\infty} dx x^{\tau} e^{iax} \times \int_0^{\infty} dk_i k_i^{\gamma} R_{n'l'}(k_i) j_l(k_i x) (k_i^{\gamma} - \nu \varepsilon_i)^{-\rho} \times \int_0^{\infty} dk_f k_f^{\gamma} R_{nl}(k_f) j_l(bk_f x) (k_f^{\gamma} - \nu \varepsilon_f)^{-\mu}, \quad (36)$$

که در آن

$$D = (\nu \pi)^{\nu} i^{l'-1} (\nu K)^{-l-\tau} \times C; \quad a = \xi/\nu K; \quad b = J/K. \quad (37)$$

است.

از آنجا که حل تحلیلی چنین انتگرالی امکان پذیر نیست،

آخرین جمله را نیز می توانیم با استفاده از رابطه (۲۱) مانند جمله $A_n^{(ra)}$ به حاصل ضرب دو انتگرال سه بعدی مستقل به صورت زیر تبدیل کنیم:

$$A_n^{(rb)} = D' \int dk_i dk_f \phi_f^*(k_f) \phi_i(k_i) (k_i^\gamma - \nu \varepsilon_i)^{-\rho} (k_f^\gamma - \nu \varepsilon_f)^\delta, \quad (44)$$

که در آن

$$D' = -\left(\frac{\nu}{\pi}\right) Z_P Z_T e^{i\pi\delta} \frac{\Gamma(1-\delta)^\gamma \Gamma(1+\gamma)}{\Gamma(1-\gamma)} e^{-i\pi\rho} \frac{\Gamma(1+\rho)^\gamma \Gamma(1-\sigma)}{\Gamma(1+\sigma)} \times (\nu \mu_n \nu^\gamma)^{\gamma-\delta} (\nu \nu)^{\nu(\rho-\sigma)} \nu^{2\sigma-\gamma} \left(\frac{1}{\nu} \nu^\gamma + \varepsilon_f\right)^{\delta-\rho-1} J^{-\gamma-2\gamma}. \quad (45)$$

با جایگزینی توابع موج اولیه و نهایی در عبارت فوق و محاسبه قسمت زاویه ای انتگرال در نهایت داریم

$$A_n^{(rb)} = \nu D' \delta_{l'_0} \delta_{m'_0} \delta_{l_0} \delta_{m_0} \int_0^\infty dk_i k_i^\gamma R_{nl'}(k_i) (k_i^\gamma - \nu \varepsilon_i)^{-\rho} \times \int_0^\infty dk_f k_f^\gamma R_{nl}(k_f) (k_f^\gamma - \nu \varepsilon_f)^\delta. \quad (46)$$

انتگرالهای یک بعدی مستقل در عبارت فوق را نیز می توان با روشهای عددی کلاسیک محاسبه کرد. دامنه کل از مجموع دامنه های محاسبه شده در (۲۶)، (۳۶)، (۴۰)، (۴۳) و (۴۶) بدست می آید

$$A_{FWL} = A_e + A_n = A_{B_1} + A_e^{(\nu)} + A_n^{(i)} + A_n^{(ra)} + A_n^{(rb)}, \quad (47)$$

و در نهایت سطح مقطع جزئی الکترون در چارچوب آزمایشگاه برای برخورد پرتون با اتم هیدروژن را می توان در تقریب مورد نظر از رابطه زیر محاسبه کرد

$$\left(\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega}\right)_{lab} = \frac{1}{4\pi^\gamma} M_P^\gamma \left| \langle f | T_R | i \rangle \right|^2 = \frac{1}{4\pi^\gamma} M_P^\gamma |A_{FWL}|^2, \quad (48)$$

که دامنه FWL را می توان از رابطه (۴۷) در آن جایگزین کرد.

۴. نتایج و بحث

اگر چه آنچه را که تا کنون ارائه داده ایم برای تمام گذارهای ممکن $nml \rightarrow n'm'l'$ در برخورد یونهای پرانرژی با اتمهای هیدروژن مانند کاربرد دارد ولی ما در این بخش نتایج محاسبه سطح مقطع جزئی ربایش الکترون در برخورد پرتونهای پرانرژی با اتمهای هیدروژن در حالت زمینه و گذار به چند حالت خاص را به عنوان نمونه می آوریم و بیشتر توجه خود را

$$B' = \nu \pi Z_P Z_T e^{i\pi\delta} \frac{\Gamma(1-\delta)^\gamma \Gamma(1+\gamma)}{\Gamma(1-\gamma)} (\nu \mu_n \nu^\gamma)^{\gamma-\delta}. \quad (39)$$

انتگرال فوق دارای دو ماکزیمم موضعی در مکانهای $k_i \cong 0$ و $k_i \cong \nu$ است و چون فاصله بین این دو ماکزیمم بسیار زیاد است می توانیم آنها را از یکدیگر جدا کنیم، سپس با جایگزین توابع موج اولیه و نهایی در آن داریم

$$A_n^{(i)} = (\nu \pi)^\gamma B' \times \left[J^{-\gamma-2\gamma} (\nu^\gamma - \nu \varepsilon_f)^\delta \phi_f^*(-\nu) \delta_{l'_0} \delta_{m'_0} \int_0^\infty dk_i k_i^\gamma R_{nl'}(k_i) (k_i^\gamma - \nu \varepsilon_i)^\delta + K^{-\gamma-2\gamma} (\nu^\gamma - \nu \varepsilon_i)^\delta \times \phi_i(\nu) \delta_{l_0} \delta_{m_0} \int_0^\infty dk_i k_i^\gamma R_{nl}(k_i) (k_i^\gamma - \nu \varepsilon_f)^\delta \right]. \quad (40)$$

در عبارت فوق نیز دو انتگرال یک بعدی وجود دارد که اگر چه ما نتوانستیم آنها را در حالت کلی به صورت تحلیلی حل کنیم، ولی به روشهای عددی ساده و کلاسیک و با دقت بسیار خوبی قابل حل هستند.

(ب) جملات بین هسته ای مرتبه دوم

۱. جمله $A_n^{(ra)}$

با توجه به رابطه (۲۰) به ترتیبی که گذشت می توانیم جمله $A_n^{(ra)}$ را به حاصل ضرب دو انتگرال سه بعدی مستقل به صورت زیر تبدیل کنیم:

$$A_n^{(ra)} = C' \int dk_i dk_f \phi_f^*(k_f) \phi_i(k_i) (k_i^\gamma - \nu \varepsilon_i)^\delta (k_f^\gamma - \nu \varepsilon_f)^\mu, \quad (41)$$

که در آن

$$C' = -\left(\frac{\nu}{\pi}\right) Z_P Z_T e^{i\pi\delta} \frac{\Gamma(1-\delta)^\gamma \Gamma(1+\gamma)}{\Gamma(1-\gamma)} e^{-i\pi\mu} \frac{\Gamma(1-\mu)^\gamma \Gamma(1+\nu)}{\Gamma(1-\nu)} \times (\nu \mu_n \nu^\gamma)^{\gamma-\delta} (\nu \nu)^{\nu(\mu-\nu)} \nu^{2\nu-\gamma} \left(\frac{1}{\nu} \nu^\gamma + \varepsilon_f\right)^{\delta-\mu-1} K^{-\gamma-2\gamma}. \quad (42)$$

با جایگزینی توابع موج اولیه و نهایی در عبارت فوق و محاسبه قسمت زاویه ای انتگرال در نهایت داریم

$$A_n^{(ra)} = \nu C' \delta_{l'_0} \delta_{m'_0} \delta_{l_0} \delta_{m_0} \int_0^\infty dk_i k_i^\gamma R_{nl'}(k_i) (k_i^\gamma - \nu \varepsilon_i)^\delta \times \int_0^\infty dk_f k_f^\gamma R_{nl}(k_f) (k_f^\gamma - \nu \varepsilon_f)^{-\mu}. \quad (43)$$

انتگرالهای یک بعدی مستقل در عبارت فوق را نیز می توان با روشهای عددی کلاسیک حل کرد.

۲. جمله $A_n^{(rb)}$

جمله غالب است ولی در مجموع دامنه ها به قدری کوچک می شوند که می توان آنها را نسبت به گذارهای بحث شده در بالا نادیده انگاشت.

شکل ۵ سطح مقطعهای جزئی $(d\sigma_{(s \rightarrow r, \dots)} / d\Omega)_{lab}$ ، $(d\sigma_{(s \rightarrow r, l, \pm)} / d\Omega)_{lab}$ و نیز حاصل جمع آنها یعنی سطح مقطع جزئی گذار به مدار $n=2$ را به ازای انرژی فرودی $2/8 \text{ MeV}$ نشان می دهد، که البته مجموع آنها با سطح مقطع مربوط به گذار $2s$ تفاوت محسوسی ندارد. به عبارت دیگر سطح مقطع جزئی گذار به حالت های $(1+)$ و $(2+)$ بسیار ناچیز و قابل چشم پوشی است.

شکل ۶ سطح مقطعهای جزئی $(d\sigma_{(s \rightarrow rs)} / d\Omega)_{lab}$ ، $(d\sigma_{(s \rightarrow rp)} / d\Omega)_{lab}$ و نیز مجموع آنها را نشان می دهد. همانگونه که دیده می شود در زوایای کوچک ابتدا سطح مقطع گذار $3s$ غالب است ولی با بزرگتر شدن زاویه سطح مقطع گذارهای $3p$ و $3d$ بیشتر می شود به طوری که در زاویه های انتهائی، هر دو بزرگتر از مقدار متناظر برای گذار $3s$ هستند.

در شکل ۷ سطح مقطع جزئی گذار به مدارهای $n=1$ و $n=2$ $(d\sigma_{(s \rightarrow r, \dots)} / d\Omega)_{lab}$

$$(d\sigma_{(s \rightarrow r)} / d\Omega)_{lab} = \sum_{l=1}^{l=1} \sum_{m=-1}^{m=1} (d\sigma_{s \rightarrow (r, l, m)} / d\Omega)_{lab}$$

$$(d\sigma_{(s \rightarrow r)} / d\Omega)_{lab} = \sum_{l=2}^{l=2} \sum_{m=-1}^{m=1} (d\sigma_{s \rightarrow (r, l, m)} / d\Omega)_{lab}$$

به ازای همان انرژی فرودی با هم مقایسه شده و حاصل جمع آنها نیز نشان داده شده است. به وضوح دیده می شود سهم گذار به مدار $n=3$ کوچکتر از سهم مربوط به گذار $n=2$ و به همین ترتیب سهم گذار مربوط به $n=2$ کوچکتر از سهم مربوط به گذار $n=1$ است، یا به عبارت دیگر گذار به حالت $1s$ بیشترین سهم را در سطح مقطع ربایش الکترون در برخورد پروتون با هیدروژن در حالت زمینه دارد. این به دلیل شکل خاص توابع موج در حالت های ذکر شده است، با افزایش n تعداد صفرهای تابع موج بیشتر شده و این باعث کاهش مقدار انتگرالهای موجود در دامنه ها می شود. با محاسباتی مشابه آنچه که گذشت به طور کلی می توان نشان داد که سهم گذار به مدارهای بالاتر از دو، نسبت به مدار اول بسیار ناچیز است و مهمترین جمله همان گذار به حالت $1s$ است. در واقع می توان

به فرایند بازچینی زیر معطوف می داریم

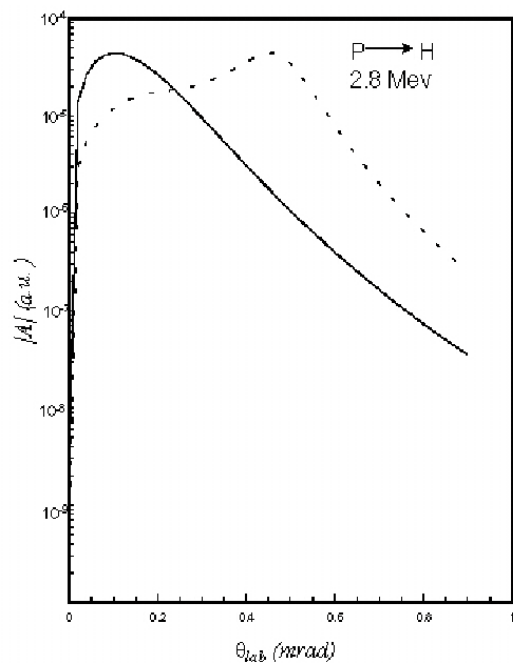


گرچه برای حالت های $n \geq 4$ نیز می توان بحث را به طور مشابه ادامه داد ولی خواهیم دید که سطح مقطع جزئی چنین گذارهایی نسبت به حالت های بحث شده ناچیز است و بحث در مورد آنها لزوم چندانی ندارد.

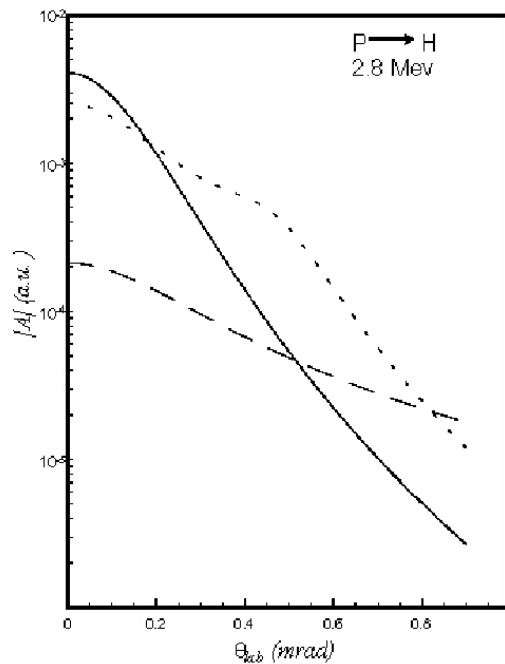
شکل ۱ مقدار مطلق دامنه های $A_n^{(i)}$ ، A_{B1} و A_n برای برخورد پروتون با انرژی فرودی $2/8 \text{ MeV}$ با هیدروژن در حالت زمینه و گذار به حالت نهائی $1s$ را نشان می دهد. همان گونه که دیده می شود در زوایای بسیار کوچک تقریب اول بورن جمله غالب است، پس از آن ناحیه ای وجود دارد که در اثر تداخل جملات مختلف یکدیگر را خنثی می کنند، بعد از آن ناحیه دیگری وجود دارد که در آن مکانیزم پراکندگی دو گانه توماس غالب است و باعث ایجاد قله توماس می شود در محاسبات انجام شده این قله ناشی از جمله $A_n^{(i)}$ است و در جایی قرار دارد که $a=\alpha=0$ است (یعنی $\theta=0/47 \text{ mrad}$) و بالاخره ناحیه ای وجود دارد که در آن برهمکنش های بین هسته ای نقش غالب را ایفا می کنند. بررسی های ما نشان می دهد که به طور کلی مقدار مطلق دامنه های جزئی مختلف برای گذار به حالت ns وضعیتی مشابه با وضعیت ارائه شده در گذار به حالت $1s$ دارند.

شکل های ۲ و ۳ به ترتیب مقدار مطلق دامنه های جزئی ربایش الکترون را به ازای انرژی $2/8 \text{ MeV}$ در گذار به حالت های $(1+)$ و $(2+)$ و $(1+)$ نشان می دهند. برای گذار اول وضعیت مشابه چیزی است که در شکل ۱ آمده است و این وضعیت قابل تعمیم به سایر گذارهای $(n, l, 0)$ است. برای گذارهای دوم جمله بین هسته ای برابر صفر است، علاوه بر این به ازای زاویه پراکندگی صفر جملات هسته الکترونی نیز بسیار کوچک و تقریباً برابر صفرند. ولی به ازای زوایای بزرگتر از صفر ابتدا تقریب اول بورن جمله غالب است و با بزرگ شدن تدریجی زاویه پراکندگی جمله $A_n^{(i)}$ غالب می گردد. این وضعیت نیز نمونه ای از رفتار دامنه های جزئی در گذار به حالت های مشابه با $m=\pm 1$ است.

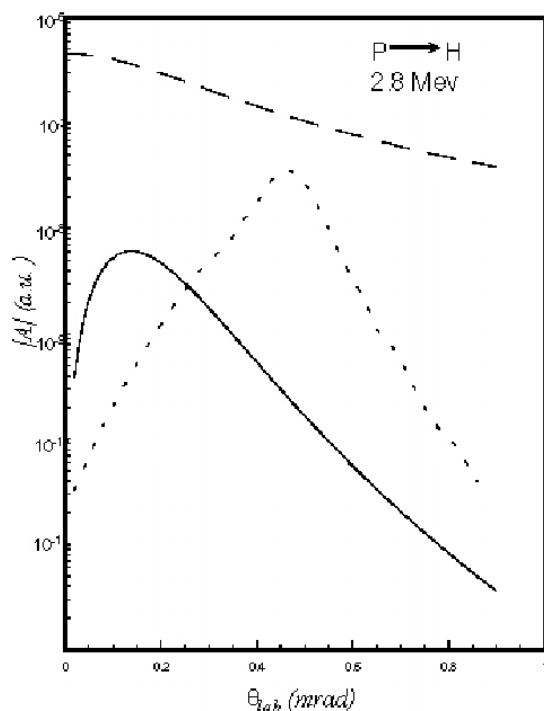
شکل ۴ مقدار مطلق دامنه های گذار $(2 \pm)$ و $(3 \pm)$ را به ازای همان انرژی نشان می دهد. همان گونه که دیده می شود در این گذارها بر همکنش بین هسته ای در تمام زوایای مورد نظر



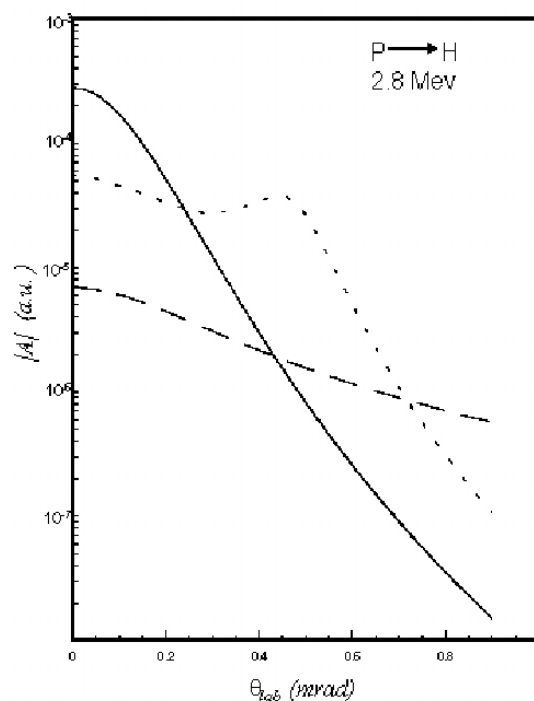
شکل ۲. دامنه های جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون با اتم هیدرژن در گذار $1s \rightarrow (2, 1, 0)$ به ازای انرژی فرودی 2.8 MeV ، خط ممتد: A_{B1} ، خط چین: $A_e^{(+)}$.



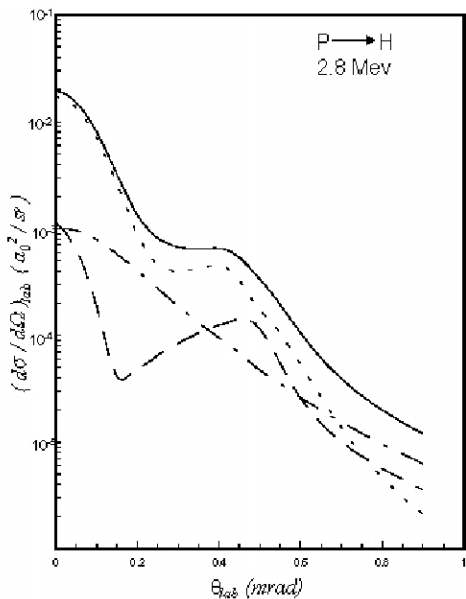
شکل ۳. دامنه های جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون با اتم هیدرژن در گذار $1s \rightarrow (2, 1 \pm 1)$ به ازای انرژی فرودی 2.8 MeV ، خط ممتد: A_{B1} ، خط چین کوتاه: $A_e^{(+)}$ ، خط چین بلند: A_n .



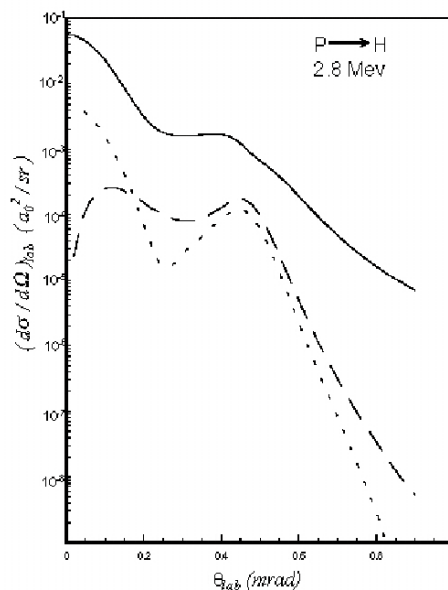
شکل ۴. دامنه های جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون با اتم هیدرژن در گذار $1s \rightarrow (3, 2 \pm 2)$ به ازای انرژی فرودی 2.8 MeV ، خط ممتد: A_{B1} ، خط چین کوتاه: $A_e^{(+)}$ ، خط چین بلند: A_n .



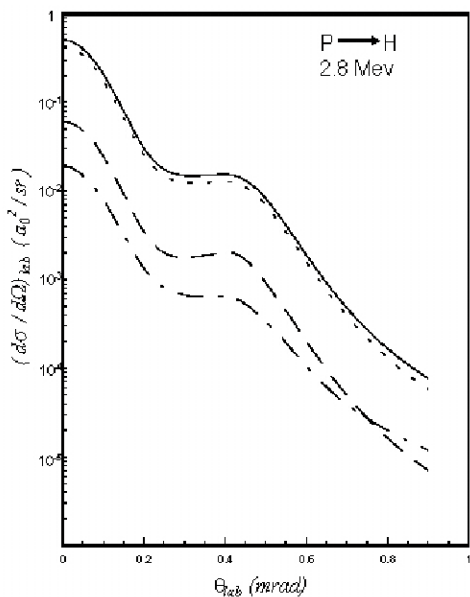
شکل ۵. دامنه های جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون با اتم هیدرژن در گذار $1s \rightarrow (2, 1 \pm 1)$ به ازای انرژی فرودی 2.8 MeV ، خط ممتد: A_{B1} ، خط چین کوتاه: $A_e^{(+)}$ ، خط چین بلند: A_n .



شکل ۶. سطح مقطع جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون با اتم هیدروژن در گذار از حالت ۱s به حالت‌های ۳s، ۳p و ۳d و مجموع آنها به ازای انرژی فرودی ۲/۸ MeV، خط ممتد: مجموع، خط چین کوتاه: ۳s، خط چین بلند: ۳p و خط چین کوتاه-بلند: ۳d.



شکل ۵. سطح مقطع جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون با اتم هیدروژن در گذار از حالت ۱s به حالت‌های (۲، ۰، ۰)، (۲، ۱، ۰) و (۲، ۱، ۱) به ازای انرژی فرودی ۲/۸ MeV، خط ممتد: (۲، ۰، ۰)، خط چین کوتاه: (۲، ۱، ۰) و خط چین بلند: (۲، ۱، ۱).



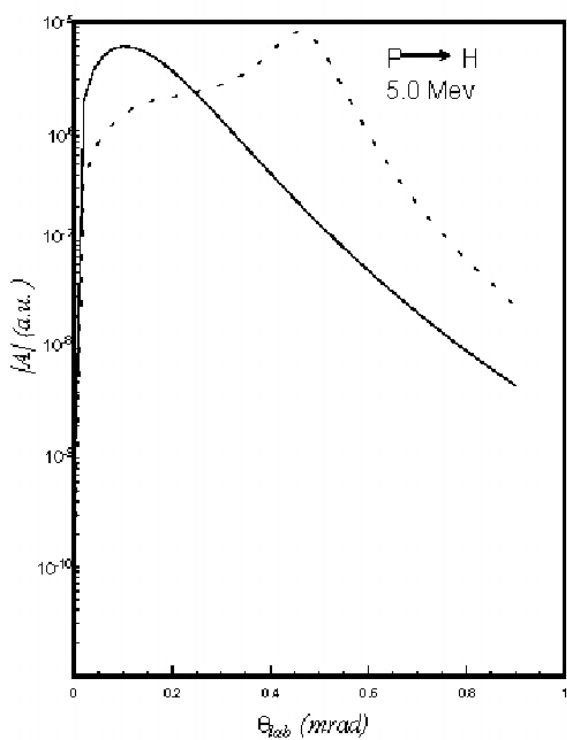
شکل ۷. سطح مقطع جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون با اتم هیدروژن در گذار از حالت ۱s به مدارهای n=۱، n=۲ و n=۳ و مجموع آنها به ازای انرژی فرودی ۲/۸ MeV، خط ممتد: مجموع، خط چین کوتاه: n=۱، خط چین بلند: n=۲ و خط چین کوتاه-بلند: n=۳.

گفت که در همه کانالهای واکنشی فقط حالت زمینه اتم هیدروژن است که باقی می ماند و سهم مربوط به گذار به حالت زمینه بسته به انرژی فرودی پرتابه بین ۸۵ تا ۱۰۰ درصد سطح مقطع گذار به همه حالتها را در بر دارد. نکته جالب توجه دیگر آنست که برای تمام گذارها قله توماس به وضوح در سطح مقطعهها مشاهده می شود.

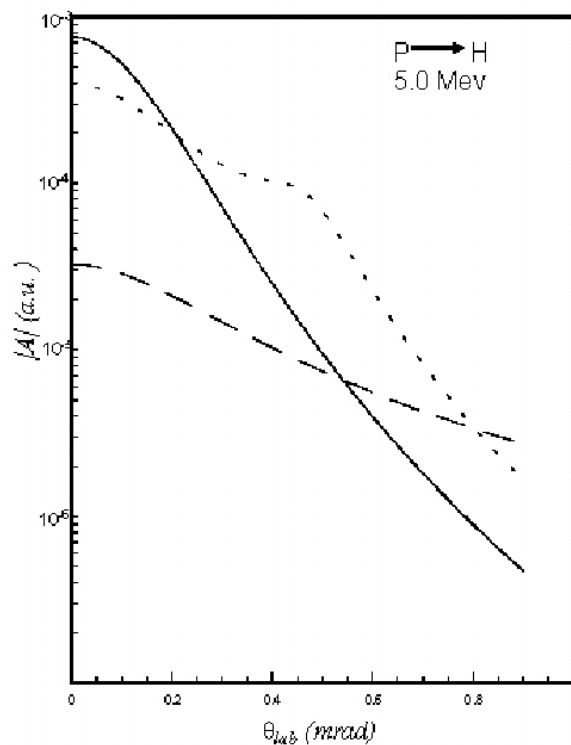
شکل‌های ۸ تا ۱۴ به ترتیب متناظر با شکل‌های (۱ تا ۷ به ازای انرژی فرودی ۵/۰ MeV است که بحث‌های ارائه شده در مورد آنها نیز صادق است.

در شکل ۱۵ سطح مقطع جزئی گذار به حالت ۱s یعنی $(d\sigma_{(1s \rightarrow 1s)})_{lab} / d\Omega$ به ازای انرژیهای ۲/۸ MeV و ۵/۰ MeV که به ترتیب متناظر با سرعت های ۱۰/۶ a.u. و ۱۴/۱ a.u. هستند با سطح مقطع جزئی گذار به همه حالتها در انرژیهای مذکور مقایسه شده است.

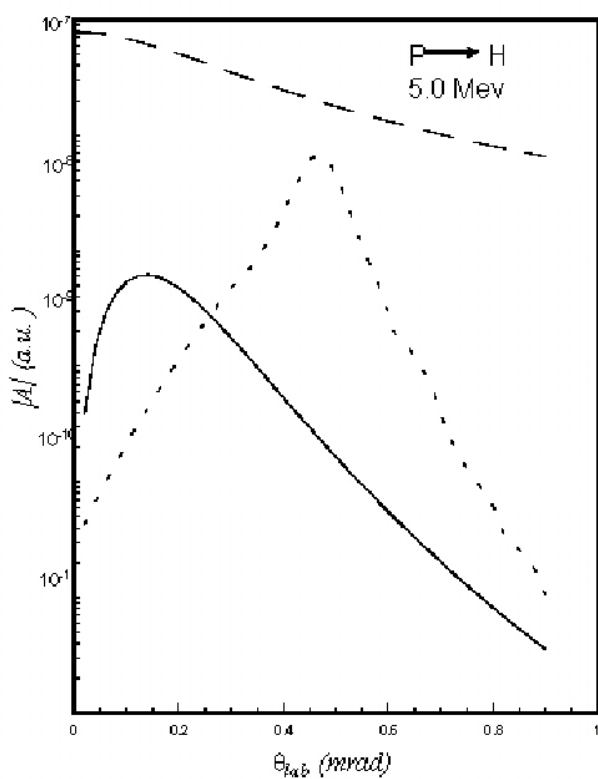
در نهایت در شکل ۱۶، مجموع سطح مقطعههای محاسبه شده به عنوان سطح مقطع گذار به همه حالتها با نتایج تجربی متناظر [۲۱] مقایسه شده است که توافق بسیار خوبی را نشان



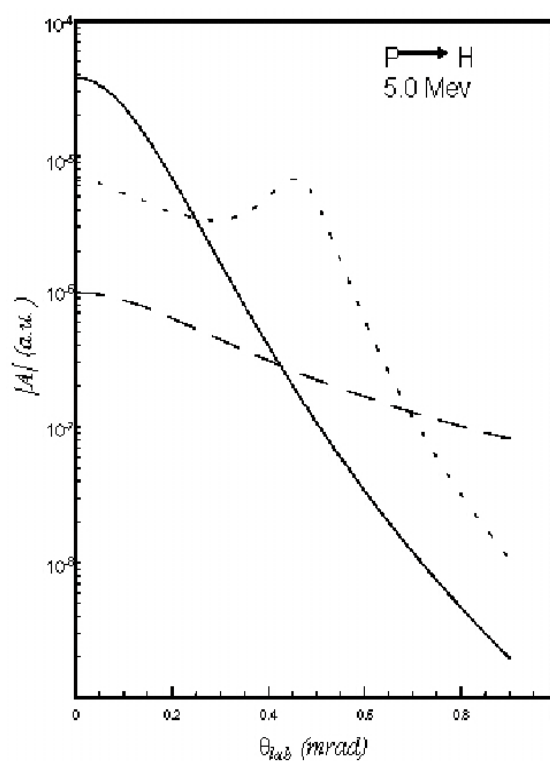
شکل ۹. همانند شکل ۲ به ازای انرژی فرودی ۰.۵ MeV.



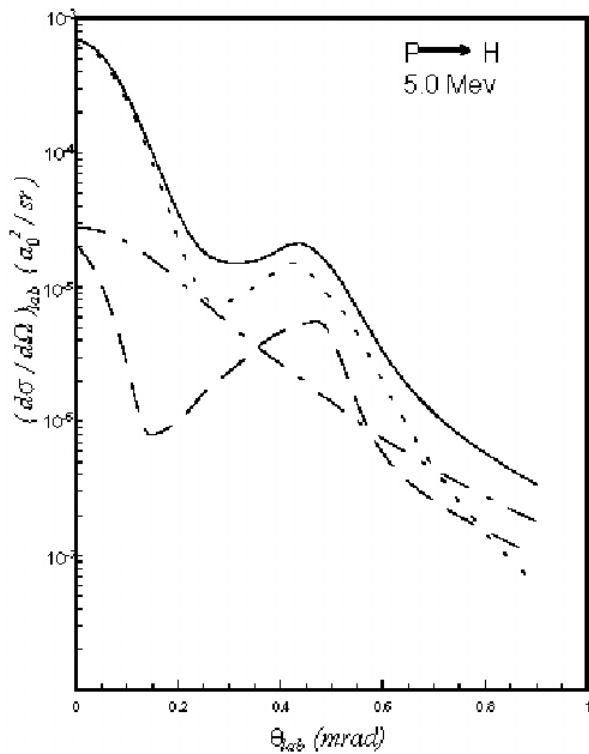
شکل ۸. همانند شکل ۱ به ازای انرژی فرودی ۰.۵ MeV.



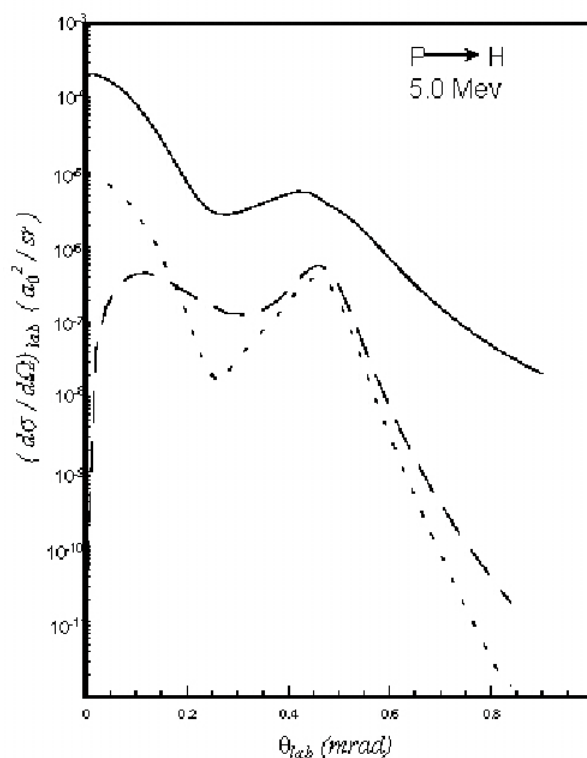
شکل ۱۱. همانند شکل (۴) به ازای انرژی فرودی ۰.۵ MeV.



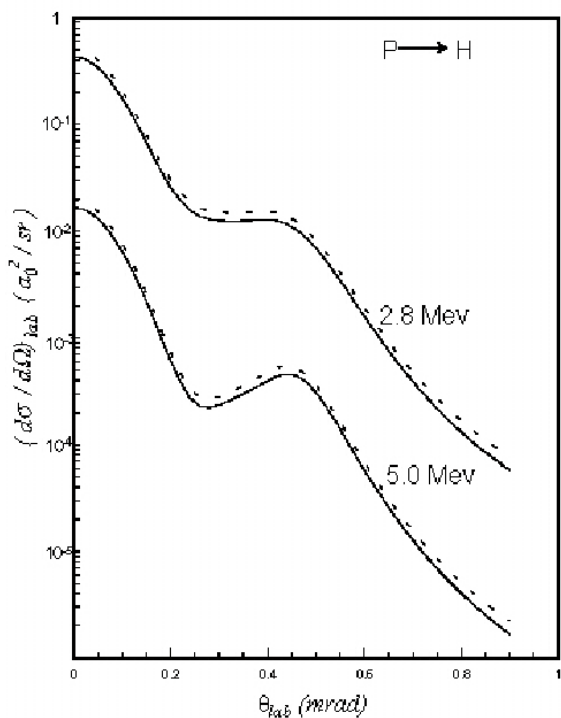
شکل ۱۰. همانند شکل ۳ به ازای انرژی فرودی ۰.۵ MeV.



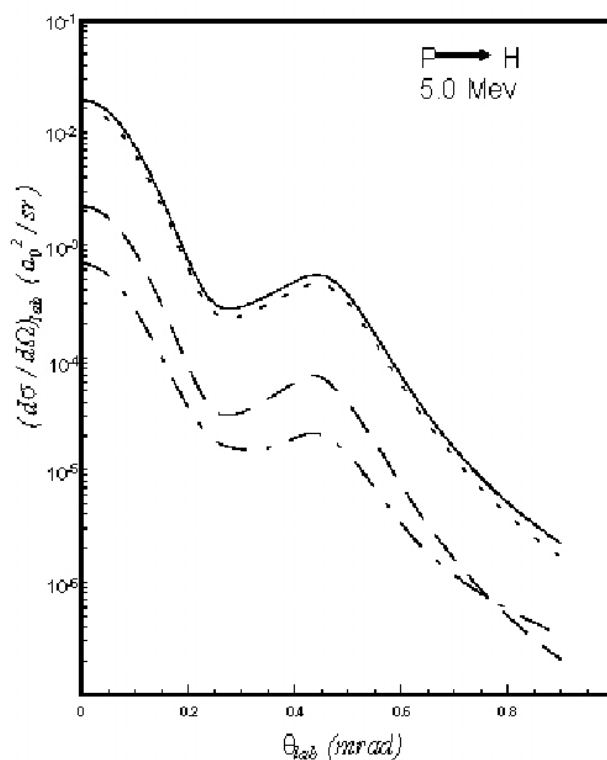
شکل ۱۳. همانند شکل ۶ به ازای انرژی فرودی ۰/۰ MeV.



شکل ۱۴. همانند شکل ۵ به ازای انرژی فرودی ۰/۰ MeV.



شکل ۱۵. مقایسه سطح مقطع جزئی گذار به حالت ۱s با سطح مقطع گذار به همه حالتها به ازای انرژیهای فرودی ۲/۸ MeV و ۰/۰ MeV، خط ممند: گذار به حالت ۱s، خط چین: گذار به همه حالتها.



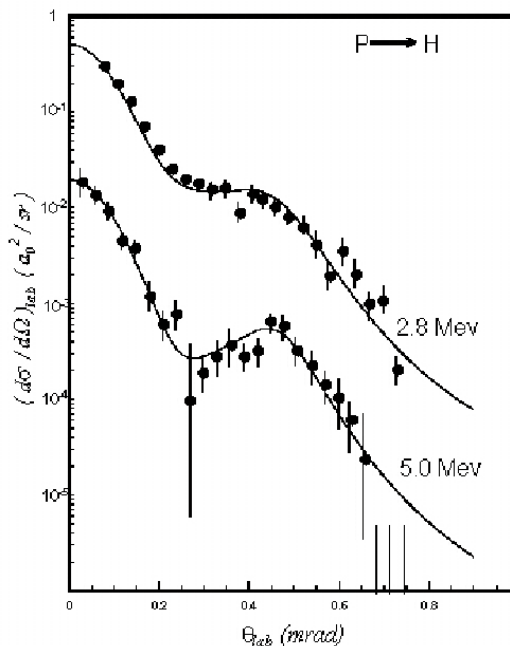
شکل ۱۶. همانند شکل ۷ به ازای انرژی فرودی ۰/۰ MeV.

۵. جمع‌بندی

هدف اصلی این تحقیق به کارگیری رهیافت سه جسمی FWL به عنوان یک ابزار قوی و با ارزش برای محاسبه فرایند بازچینی در برخوردهای پرانرژی یون اتمی بوده است. در طول محاسبات از ماتریسهای دو جسمی و روشهای تحلیلی و عددی برای انجام محاسبات استفاده کرده‌ایم. و به این روش جنبه‌های جالب فرایند رایش الکترون را به طور تفصیلی بررسی کردیم. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که به طور کلی در زاویه‌های پراکندگی نزدیک به صفر سطح مقطع گذار به حالت‌های s بزرگتر از سطح مقطع گذار به حالت‌های p، d و سایر حالت‌های نوعی با $l \neq 0$ است، علاوه بر این گذار به مدار n در مقایسه با گذار $n+1$ به مهمتر و سهم آن بزرگتر است. به ویژه سطح مقطع گذار به حالت زمینه، بسیار بزرگتر از سطح مقطع گذار به سایر حالتهاست، و می‌توان آن را به طور تقریب معادل با سطح مقطع گذار به همه حالتها در نظر گرفت. علاوه بر این نشان داده ایم که بسط مرتبه دوم عملگر در رهیافت فادیف برای رایش الکترون در توافق عالی با داده‌های آزمایشگاهی برای برخورد پروتون-هیدروژن است.

قدردانی

نویسندگان از مرکز بین المللی علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی کرمان برای پشتیبانی مالی از این فعالیت تحقیقاتی تشکر می‌نمایند.



شکل ۱۶. مقایسه سطح مقطع جزئی گذار به همه حالتها با نتایج تجربی متناظر به ازای انرژیهای فرودی $2/8 \text{ MeV}$ و $5/0 \text{ MeV}$. نقاط: داده‌های تجربی، خط ممتد: محاسبه. پاره‌خط‌های عمودی خطای اندازه‌گیری را در داده‌های تجربی نشان می‌دهند.

می‌دهد و بر خلاف آلستون [۱۳]، ما معتقدیم که رهیافت FWL برای برخورد پروتون با هیدروژن نتایج را پیشگویی می‌کند که در توافق عالی با داده‌های تجربی است.

مراجع

1. J R Oppenheimer, *Phys. Rev.* **31** (1928) 349.
2. H C Brinkman and H A Kramers, *Proc. Acad. Sci. (Amsterdam)* **33** (1930) 973.
3. J D Jackson and H Schiff, *Phys. Rev.* **89** (1953) 359.
4. R A Mapleton, *Proc. Phys. Soc. Lond.* **83** (1964) 895.
5. L H Thomas, *Proc. R. Soc.* **114** (1927) 561.
6. R M Drisko, Ph. D. thesis, Carengie Institute of Technology (1955).
7. K Taulbjerg and J S Briggs, *J. Phys.* **B16** (1983) 3811.
8. I M Cheshire, *Proc. Phys. Soc. London* **84** (1964) 89.
9. Dz Belkic, R Gayet and A Salin, *Phys. Rep.* **56** (1979) 279.
10. Dz Belkic, S Saini and H S Taylor, *Z. Phys.* **D 3** (1986) 59.
11. Dz Belkic, S Saini and H S Taylor, *Phys. Rev. A* **36** (1986) 59.
12. S Alston, *Phys. Rev. A* **27** (1983) 2342.
13. S Alston, *Phys. Rev. A* **42** (1990) 331.
14. S Alston, *Phys. Rev. A* **54** (1996) 2011.
15. E Ghanbari Adivi, M. Sc. Thesis, Shahid Bahonar University (1995).
16. G V Avakov, A R Ashurov, L D Blokhintsev, A M Mukhamedzhanov and M V Poletayeva, *J Phys. B* **23** (1990) 2309s.
17. E O Alt, P Grassberger and W Sandhas, *Nucl. Phys. B* **2** (1967) 167.
18. E O Alt, A S Kadyrov and A M Mukhamedzhanov, *Phys. Rev. A* **60** (1999) 314; E O Alt, A S Kadyrov and A M Mukhamedzhanov, *Nucl. Phys. A* **684** (2001) 693c.
19. C J Joachain, *Quantum Collision Theory* (North-Holland, Amsterdam, 1975).
20. L D Faddeev, *Sov. Phys. JETP* **12** (1961) 1014; K M Watson, *Phys. Rev.* **88** (1952) 1163; C Lovelace, *Phys. Rev.* **135** (1964) B1225.
21. H Vogt, R Schuch, E Justiniano, M Schulz and W Schwab, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 2256.