

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

سعیده امیری بیدوری و رضا فتحی

دانشکده فیزیک دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

پست الکترونیکی: rfathi@uk.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۱۱/۱۳؛ دریافت نسخه 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 محاسبه سطح مقطع جزئی و کل برخورد یون-اتم در محدوده انرژی‌های بالا استفاده از تقریب مرتبه 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 مرتبه اول بورن با به کارگیری فرمول‌بندی آیکونال چندحالتی است. در نهایت نشان داده خواهد شد که با ساده کردن این نظریه 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

شاخه‌های فیزیک به کار برده می‌شود که از جمله می‌توان به کاربرد آن در فیزیک پلاسما [۱]، فیزیک نجومی [۲]، جستجوی ماده تاریک در کیهان‌شناسی [۳] و شناخت نیروهای موجود در ماده چگال [۴] اشاره نمود.

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

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 هسته 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 مطالعه پراکندگی ذرات و طیف‌نمایی می‌باشد. نتایج مربوط به سطح مقطع پراکندگی در اغلب

دیفرانسیل جفت شده حاصل می شود. این مجموعه نامحدود باید در گستره تابع موج و اندازه حرکت زاویه ای همگرا شود و این مشکل بزرگ روش جفت شدگی نزدیک است. این روش در انرژی های بالای برخورد غیر قابل استفاده است.

تقریب های نیمه کلاسیکی از این جهت با روش های تمام کوانتومی نظریه پراکندگی متفاوت هستند که حرکت نسبی دستگاه های برخورد کننده را با یک روش نیمه کلاسیکی بررسی می کنند و برای بیش از یک محدوده انرژی مناسب هستند. از این دسته می توان به تقریب (JWKB)^۳ و تقریب آیکونال اشاره نمود. شاید اولین نظریه نیمه کلاسیکی قابل توجه توسط بتس^۴ [۹] ارائه گردید که به روش پارامتر برخورد معروف است. این روش در حوزه برخورد ذرات سنگین به موفقیت بزرگی دست یافت [۱۰]. بیشتر روش های مبنی بر روش (JWKB) توسط بتس و هالت^۵ [۱۱] و کروتزر^۶ [۱۲] توسعه یافته اند. یک روش متفاوت نیمه کلاسیکی که روش نیمه کوانتومی نامیده می شود 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.

نظریه کاملاً کلاسیکی [۱۴] گزینه دیگری برای بررسی فرآیندهای یونش است. یک گزارش مفصل از برخورد دو جسمی و نظریه برخورد کلاسیکی توسط ورینز^۸ [۱۵] داده شده است. بررسی نظریه های موجود نشان می دهد که برای طیف وسیعی از کاربردها نظریه های نیمه کلاسیکی از موفقیت بزرگی برخوردار بوده اند.

تقریب مرتبه اول بورن به دلیل ساده بودن محاسبات به یکی از روش های رایج در محاسبه سطح مقطع جزئی و کل برخورد یون-اتم تبدیل شده است. ولی از آن جایی که در این تقریب

ولت بوده درحالی که در فیزیک هسته ای حداقل چند مگا الکترون ولت است. به طور کلی محدوده انرژی در فیزیک اتمی به سه ناحیه تقسیم می شود؛ ناحیه اول برخورد با انرژی کم، ناحیه دوم برخورد با انرژی میانی و ناحیه سوم برخورد با انرژی بالا می باشد. برای موارد خاص برخورد پروتون با اتم هیدروژن و برخورد الکترون با اتم هیدروژن محدوده انرژی میانی و بالا، که هدف این کار حاضر می باشد، به ترتیب در محدوده ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ کیلو الکترون ولت و ۵۰ تا ۵۰۰ الکترون ولت در نظر گرفته می شود.

برای بررسی فرآیندهای تهیج، تبادل بار و یونش در برخورد یون-اتم نظریه واحدی که بتواند در تمام محدوده انرژی پاسخگو باشد وجود ندارد. بنابراین برای محاسبه این سطح مقطع ها روش های متعددی توسعه یافته است که هر کدام از این روش ها برای یک محدوده انرژی مناسب می باشند. این روش ها در سه دسته کلی روش های کاملاً کوانتومی، روش های نیمه کلاسیکی و روش های کلاسیکی قرار می گیرند.

شاید ساده ترین محاسبه کوانتومی تقریب بورن [۵] و تصحیحات آن باشد که شامل تقریب مرتبه دوم بورن، تقریب بورن موج واپیچیده [۶] و تقریب بت^۱ [۷] می باشد. تقریب بورن و تصحیحات آن اصولاً نظریه های انرژی بالا هستند، مبنی بر این فرض که تنها جفت شدگی مهم این فرآیند، جفت شدگی مستقیم بین گذار از حالت اولیه به حالت نهایی دستگاه پراکندگی است و از جفت شدگی معکوس از حالت نهایی به حالت اولیه صرف نظر شده است. تابع موج دستگاه در این روش به وسیله تابع حالت اولیه شرح داده می شود. روش کوانش دوم که دقت قابل توجهی برای بررسی برخورد الکترون-اتم دارد روش جفت شدگی نزدیک^۲ است [۸]. در تقریب جفت شدگی نزدیک تابع موج دستگاه به وسیله مجموعه ای از توابع موج اتمی بسط داده می شود و به محض جایگذاری این تابع موج در معادله شرودینگر به ازای هر مقدار اندازه حرکت زاویه ای کل یک مجموعه نامحدود از معادلات

۳. Jeffrey-Wentzel-Kramers-Brillouin

۴. Bates

۵. Holt

۶. Crothers

۷. Flannery

۸. Vriens

۱. Bethe

۲. Close-coupling

واپیچیده) جایگزین می‌شود و می‌توان از آن به عنوان تصحیح تقریب مرتبه اول بورن یاد کرد.

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

$$\psi(\vec{R}) = e^{iS(\vec{R})}, \quad (1)$$

قابل بیان است به طوری که

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

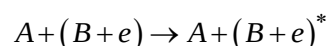
باشد [۹]. در رابطه فوق E انرژی جنبشی پرتابه، V پتانسیل برهم‌کنش و $\vec{k}$ بردار موج حرکت نسبی دستگاه در دستگاه مختصات مرکز جرم می‌باشد. بردار $\vec{R}$ فاصله پرتابه نسبت به هسته زیر دستگاه مقید است. از آن جایی که تقریب آیکونال، یک تقریب برای انرژی‌های بالا یا پتانسیل برهم‌کنشی ضعیف است، در این شرایط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

$$\left| \frac{m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} v dz \right| \ll 1 \quad (3)$$

است.

۳. نظریه پراکندگی چندحالتی

در کار حاضر واکنشی از نوع



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

$$H_{\text{lab}} = -\frac{\hbar^2}{2M_A} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2M_B} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_3^2 + V_{AB} + V_{BE} + V_{Ae} \quad (4)$$

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 نمی‌کند، 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 مرتبه اول بورن استفاده شود. به عبارت بهتر یک روش نیمه کلاسیکی برای برخوردهای یون-اتم کشسان و غیرکشسان مطرح شده است که در آن حرکت نسبی دستگاه‌های برخورد کننده به وسیله تقریب آیکونال شرح داده شده و حرکت داخلی الکترونی دستگاه‌ها به وسیله یک بسط چندحالتی بررسی شده است. این نظریه برای طیف وسیعی از برخوردها کاربرد داشته و برای بیش از یک محدوده انرژی، از نزدیکی آستانه تهییج تا انرژی‌های خیلی بالا، معتبر می‌باشد. در انتها نشان داده می‌شود که با اتخاذ یک تقریب ساده می‌توان از نظریه حاضر به تعدادی از فرمول‌بندی‌های متداول در بحث برخورد یون-اتم از جمله تقریب بورن، تقریب بورن موج واپیچیده و تقریب گلابیر [۱۶] دست یافت.

۲. نظریه

به طور کلی تقریب آیکونال وضعیت‌هایی را پوشش می‌دهد که $V(x)$ در فاصله‌ای از مرتبه طول موج λ (که می‌توان آن را کوچک در نظر گرفت) تغییرات بسیار کمی داشته باشد. توجه می‌نماییم که نیازی به کوچک بودن پتانسیل نیست بلکه تنها کافیهست $|V| \gg E$ باشد. بنابراین محدوده 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 مرتبه اول بورن برای محاسبه دامنه 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

$$v = \frac{m(M_A + M_B)}{M_A + M_B + m}, \quad (۷. ج)$$

باشند. برهم‌کنش‌های V_{AB} و V_{Be} ، V_{Ae} از موقعیت مرکز جرم مستقل هستند. بنابراین حرکت دستگاه مرکز جرم به وسیله 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

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

مناسب‌تر است. تابع موج توصیف کننده دستگاه کل در مختصات مرکز جرم در رابطه

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

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

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) \xrightarrow{R_A \rightarrow \infty} \sum \left(\delta_{no} e^{ik_n \vec{R}_A} + f_{no}(\theta) \frac{e^{ik_n R_A}}{R_A} \right) \psi_n(\vec{r}) \quad (۱۰)$$

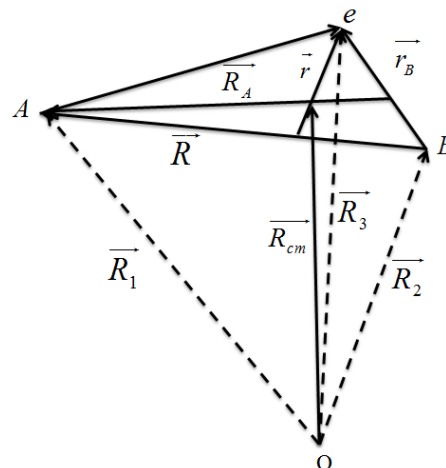
حل می‌شود که در آن بردار موج حرکت نسبی در کانال n ام، ψ_n تابع موج مختل نشده در کانال n ام و $f_{no}(\theta)$ دامنه پراکندگی می‌باشد.

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

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

بسط داده می‌شود. $\chi_n(\vec{R}, \vec{r})$ تابع موج داخلی دستگاه است که به صورت یک مجموعه 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 نشده دستگاه‌های برخورد کننده انتخاب می‌شود و ضرایب بسط $F_n(\vec{R})$ نشان‌دهنده حرکت نسبی دستگاه است که معادله 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 رابطه (۱۱) باید در شرط مرزی



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

نوشته خواهد شد. در رابطه (۴) M_A, M_B و m جرم‌های مربوط به ذرات A به عنوان پرتابه، B به عنوان هسته اتم مقید و e به عنوان الکترون فعال هستند. $\vec{V}_i (i=1,2,3)$ به ترتیب نشان‌دهنده مشتق‌گیری نسبت به مختصه $\vec{R}_i$ است. V_{Be}, V_{Ae} 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 رابطه (۴) تغییر متغیرهای

$$\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_r, \quad (۵. الف)$$

$$\vec{r} = \vec{R}_r - \frac{M_A \vec{R}_1 + M_B \vec{R}_r}{M_A + M_B}, \quad (۵. ب)$$

$$\vec{R}_{cm} = \frac{M_A \vec{R}_1 + M_B \vec{R}_r + m \vec{R}_r}{M_A + M_B + m}. \quad (۵. ج)$$

اعمال می‌گردد. مختصه $\vec{R}$ فاصله نسبی پرتابه و هسته اتم مقید، مختصه $\vec{r}$ 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

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

نوشته می‌شود به طوری که

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

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

$\nabla_R^\dagger |\chi_m F_m\rangle$ خواهیم داشت

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^\dagger + \frac{\hbar^2}{2\mu} k_n^\dagger - V_{nn} \right] |F_n\rangle = \sum_{m \neq n} V_{nm} |F_m\rangle - \sum_m \frac{\hbar^2}{2\mu} \quad (20)$$

$$\left[\langle \chi_n | \nabla_R^\dagger | \chi_m \rangle |F_m\rangle + \langle \chi_n | \bar{\nabla}_R | \chi_m \rangle \cdot \bar{\nabla}_R |F_m\rangle \right].$$

معمولاً توابع χ_n به صورت توابع کند تغییری از $\bar{R}$ انتخاب می‌شوند. بنابراین می‌توان از جمله $\nabla_R^\dagger |\chi_m\rangle$ نسبت به جمله $\bar{\nabla}_R |\chi_m\rangle$ صرف نظر نمود. بنابراین رابطه (۲۰) به صورت

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^\dagger + \frac{\hbar^2}{2\mu} k_n^\dagger - V_{nn} \right] |F_n\rangle = \sum_{m \neq n} V_{nm} |F_m\rangle - \sum_m \overline{\gamma_{nm}} \cdot \bar{\nabla}_R |F_m\rangle, \quad (21)$$

بازنویسی می‌شود. به طوری که داریم

$$\overline{\gamma_{nm}} = \frac{\hbar^2}{\mu} \langle \chi_n | \bar{\nabla}_R | \chi_m \rangle, \quad (22)$$

در بسیاری موارد $\chi_n(\bar{R}, \vec{r})$ مستقل از $\bar{R}$ انتخاب می‌شود که در این مورد $\bar{\nabla}_R |\chi_n\rangle$ و در نتیجه عبارت (۲۲) صفر بوده و بنابراین معادله (۲۱) بسیار ساده خواهد شد. برای استفاده از

تقریب آیکونال در حل معادله (۲۱) تابع $F_n(\bar{R})$ به شکل

$$F_n(\bar{R}) = \square_h(\bar{R}) A_n(\bar{R}), \quad (23)$$

نوشته می‌شود و $\Xi_n(\bar{R})$ در معادله همگن

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^\dagger + \frac{\hbar^2}{2\mu} k_n^\dagger - V_{nn} \right] \Xi_n(\bar{R}) = 0, \quad (24)$$

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

$$\Xi_n(\bar{R}) = \exp\{iS(\bar{R})\}, \quad (25)$$

در فرمول‌بندی آیکونال می‌توان نوشت

$$S_n(\vec{\rho}, z) = k_n z + \int_{-\infty}^z \left[\sqrt{k_n^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V_{nn}} - k_n \right] dz. \quad (26)$$

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

$$\bar{R} = \vec{\rho} + \vec{z}, \quad (27)$$

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

$$F_n(\bar{R}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \sum_n \left(\delta_{no} e^{ik_n \bar{R}} + f_{no}(\theta) \frac{e^{ik_n R}}{R} \right), \quad (12)$$

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

$$\chi_n(\bar{R}, \vec{r}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \psi_{\beta n}(\vec{r}) e^{i\beta \vec{k}_n \cdot \vec{r}_B}, \quad (13)$$

به دست می‌آید که در آن $\beta = -\frac{m}{M_B + m}$ است. به طور معمول از عامل نمایی در رابطه (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 معادله موج دستگاه و تابع موج داخلی به شکل

$$\langle \chi_n | H - E | \Psi \rangle = 0, \quad (14)$$

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

$$H = H' - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^\dagger, \quad (15)$$

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

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^\dagger + V_{Ae} + V_{Be} + V_{AB}. \quad (16)$$

انرژی کل دستگاه به صورت

$$E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} + \varepsilon_n, \quad (17)$$

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

$$\sum_m \left\langle \chi_n \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^\dagger + \frac{\hbar^2}{2\mu} k_n^\dagger \right] F_m \chi_m \right\rangle = \sum_m \langle \chi_n | H' - E | \chi_m \rangle |F_m\rangle, \quad (18)$$

در می‌آید. عناصر ماتریس برهم‌کنش به صورت

$$V_{nm}(\bar{R}) = \sum_m \langle \chi_n | H' - \varepsilon_m | \chi_m \rangle, \quad (19)$$

خواهد بود. با جانشانی رابطه (۱۹) در رابطه (۱۸) و بسط جمله

χ_n در حد مجانبی

$$\chi_n(\vec{R}, \vec{r}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \psi_{\beta n}(\vec{r}) e^{i\beta \vec{k}_n \cdot \vec{r}_B}, \quad (34)$$

صدق می کند. S_n را می توان با توجه به بردار موج $\vec{k}_n$ به صورت فشرده

$$S_n(\vec{\rho}, z) = k_n z + \int_{-\infty}^z [\kappa_n(\vec{R}) - k_n] dz, \quad (35)$$

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

$$B_n(\vec{\rho}, z) = A_n(\vec{\rho}, z) \exp \left[i \int_{-\infty}^z [\kappa_n - k_n] dz \right]. \quad (36)$$

معادله جفت شده (۳۲) به صورت

$$i\hbar \frac{\partial B_f}{\partial z} = \hbar(k_f - \kappa_f) B_f + \frac{\mu}{\hbar \kappa_f} \sum_{n \neq f} V_{fn} B_n e^{i(k_n - k_f)z} - i \frac{\mu}{\hbar \kappa_f} \sum_n \kappa_n \gamma_{fn} \cdot \vec{A} B_n e^{i(k_n - k_f)z}, \quad (37)$$

بازنویسی خواهد شد. بدین ترتیب مجموعه ای از N معادله جفت شده با شرط مرزی $B_n(\vec{\rho}, -\infty) = \delta_{ni}$ داریم که i نشان دهنده حالت اولیه دستگاه است.

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

$$f_{fi}(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{\hbar^2} \langle \psi_f | V | \Psi_i \rangle, \quad (38)$$

معرفی می شود. با در نظر گرفتن Ψ_i و ψ_f به صورت

$$\Psi_i(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_n B_n(\vec{\rho}, z) e^{ik_n} \chi_n(\vec{R}, \vec{r}) \quad (39)$$

$$\psi_f = \chi_f e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{R}} \quad (40)$$

رابطه (۳۸) به شکل

$$f_{fi}(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{\hbar^2} \int d\vec{R} \sum_n V_{fn}(\vec{R}) B_n(\vec{\rho}, z) \times e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{R}} e^{i(k_n - k_i)z} \quad (41)$$

در خواهد آمد.

$\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ بردار اندازه حرکت انتقال یافته از پرتابه به هدف در اثر برخورد می باشد. در حالت خاصی می توان وابستگی عناصر ماتریسی به زاویه φ را به صورت یک فاز مختلط در نظر گرفته و به عبارتی نوشت

دارد که انرژی جنبشی دستگاه بسیار بزرگ تر از پتانسیل های برهم کنش باشد، به عبارتی در کانال n ام نامعادله

$$\frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} \gg V_{nn}, \quad (28)$$

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 $R(t)$ نمی باشد. 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 $\vec{k}_n(\vec{R})$ به صورت

$$\kappa_n^*(\vec{R}) = k_n^* - \frac{\mu}{\hbar^2} V_{nn}(\vec{R}), \quad (29)$$

تعریف می گردد. با استفاده از روابط (۲۳)، (۲۵) و (۲۹) نتیجه

$$\nabla_R^2 F_n = \nabla_R^2 \left\{ \Xi_n(\vec{R}) A_n(\vec{R}) \right\} = \Xi_n \frac{\partial^2 A_n}{\partial z^2} + 2ik_n \Xi_n \frac{\partial A_n}{\partial z} - \kappa_n^* \Xi_n A_n, \quad (30)$$

حاصل می شود. اصولاً حرکت نسبی در راستای محور z ها می باشد، بنابراین تغییرات A_n در امتداد عمود بر محور z ها در نظر گرفته می شود و فرض بر این است که رابطه

$$\frac{\partial^2 A_n}{\partial z^2} \ll \kappa_n \frac{\partial A_n}{\partial z}, \quad (31)$$

برقرار باشد. اساس فرض مورد نظر این است که حرکت نسبی دستگاه به خوبی به وسیله موج تخت واپیچیده (۲۵) توصیف می شود. به عبارت دیگر بیشتر تغییرات $F_n(\vec{R})$ در راستای محور z ها در $\Xi_n(\vec{R})$ می باشد. با بسط جمله $\nabla_R^2 F_n$ در رابطه (۲۱) معادله جفت شده

$$2i \left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \right) \kappa_n \frac{\partial A_n}{\partial z} = \left[\sum_{m \neq n} V_{nm} A_m - \sum_m i \kappa_m \gamma_{nm} \cdot \vec{A} A_m \right] e^{i(S_m - S_n)} \quad (32)$$

برای A_n به دست می آید. بنابراین تابع موج کل دستگاه به صورت

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_n A_n(\vec{\rho}, z) e^{iS_n(\vec{\rho}, z)} \chi_n(\vec{R}, \vec{r}), \quad (33)$$

باز نویسی می شود، که در آن A_n جواب معادله (۳۲) بوده و

توسط عبارت های

$$I_1(\rho, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \kappa_f(\vec{\rho}, z) \frac{\partial C_f}{\partial z} e^{iaz} dz, \quad (50)$$

$$I_2(\rho, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\kappa_f(\kappa_f - k_f) + \frac{\mu}{\hbar^2} V_{ff} \right] \times C_f(\rho, z) e^{iaz} dz, \quad (51)$$

داده می شوند. وابستگی θ روابط (50) و (51) در پارامتر $\alpha(\theta)$ می باشد که با رابطه

$$\alpha(\theta) = K_z + k_f - k_i = k_f (1 - \cos \theta), \quad (52)$$

بیان می گردد که اختلاف بین مؤلفه z اندازه حرکت انتقالی و مقدار کمینه اندازه حرکت انتقالی است. رابطه (49) یکی از روابط اساسی در نظریه مورد بحث است.

سطح مقطع دیفرانسیلی و کل را می توان از روابط

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = \frac{k_f}{k_i} |f_{fi}(\theta, \varphi)|^2, \quad (53)$$

و

$$\sigma_{fi} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) d\Omega, \quad (54)$$

به دست آورد. رابطه (49) تقریب آیکونال کامل (چندکاناله) نامیده می شود و تاکنون هیچ تقریب دیگری وارد مسأله نشده است. اما نتایج به دست آمده تنها برای پتانسیل های مرکزی و حالتی که χ_n از موقعیت نسبی $\vec{R}$ مستقل هستند، معتبر است و برای موارد دیگر دامنه پراکندگی باید از شکل کلی (41) محاسبه شود.

۴. نتیجه گیری

به عنوان نتایجی از نظریه آیکونال چندحالتی تقریب هایی از نظریه بیان شده مطرح ساخته و به آنها پرداخته خواهد شد. ساده ترین تقریبی که می توان در نظر گرفت، صرف نظر کردن از تمام جفت شدگی های جزئی به گونه ای است که $C_n = \delta_{ni}$ باشد. به عبارتی تنها حالت اولیه و نهایی را به یکدیگر مربوط کند. در این صورت از معادله (49) نتیجه

$$f_{fi}(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{\sqrt{\pi} \hbar^2} \int V_{fi}(\vec{R}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} d\vec{R}, \quad (55)$$

حاصل می شود که دامنه پراکندگی موج بورن می باشد. در واقع تقریب بورن مستقیماً از هر کدام از تقریب هایی که در ادامه

$$V_{fn}(R, \theta, \varphi) = V_{fn}(R, \theta) e^{i\Delta_{nf}\varphi}, \quad (42)$$

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

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

$$C_n(\rho, z) e^{i\Delta_{in}\varphi} = B_n(\vec{\rho}, z), \quad (43)$$

توسط رابطه (37) به مجموعه ای از معادلات جفت شده مستقل از فاز به صورت

$$i \frac{\hbar^2}{\mu} \kappa_f(\vec{\rho}, z) \frac{\partial C_f}{\partial z}(\rho, z) + \left[\frac{\hbar^2}{\mu} \kappa_f(\kappa_f - k_f) + V_{ff}(\vec{\rho}, z) \right] C_f(\rho, z) = \sum_{n=1}^N C_n(\vec{\rho}, z) V_{fn}(\vec{\rho}, z) e^{i(k_n - k_f)z}, \quad (44)$$

با شرط مرزی

$$C_f(\vec{\rho}, -\infty) = \delta_{if}, \quad (45)$$

به دست خواهد آمد. با این فرض که توابع پایه χ_n از موقعیت نسبی $(\vec{R})$ مستقل هستند و با توجه به رابطه (43) و (37) دامنه پراکندگی به صورت

$$f_{fi}(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{\sqrt{\pi} \hbar^2} \int d\vec{R} e^{i(\vec{K} \cdot \vec{R} + \Delta_{if}\varphi)} e^{i(k_f - k_i)z} \times \left\{ i \frac{\hbar^2 \kappa_f}{\mu} \frac{\partial C_f}{\partial z} + \left[V_{ff} - \frac{\hbar^2 \kappa_f}{\mu} (k_f - \kappa_f) \right] C_f \right\}, \quad (46)$$

نتیجه می شود. ضرب نقطه ای $\vec{K} \cdot \vec{R}$ را می توان به صورت

$$\vec{K} \cdot \vec{R} = \vec{K}' \cdot \vec{\rho} + K_z z = K' \rho \cos(\varphi - \phi) + k_z z \quad (47)$$

نوشت که در آن K' مؤلفه ای از اندازه حرکت انتقالی است که بر محور z ها عمود می باشد. با توجه به انتگرال

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n\phi + z \cos \phi)} d\phi = 2\pi i^n J_n(z), \quad (48)$$

دامنه پراکندگی به صورت

$$f_{fi}(\theta, \varphi) = -i^{\Delta+1} \int_0^\infty J_\Delta(K' \rho) \times [I_1(\rho, \theta) - i I_2(\rho, \theta)] \rho d\rho \quad (49)$$

به دست می آید که در آن J_Δ تابع بسل نوع اول از مرتبه $\Delta = \Delta_{if}$ بوده و انتگرال گیری نسبت به z مربوط به I_1 و I_2

$$\chi(\rho) = -\frac{1}{\hbar v_i} \int_0^\infty V_{ii} \sqrt{\rho^2 + z^2} dz, \quad (61)$$

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

$$\psi_f(\vec{r}, \vec{R}) = \chi_f(\vec{r}) \exp\left(i\vec{k}_f \cdot \vec{R} - \frac{i}{\hbar v_f} \int_0^z V_{ff} dz\right), \quad (62)$$

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

$$f_{fi}^{DW}(\theta, \varphi) = -i^{\Delta+1} \int_0^\infty J_\Delta(K'\rho) \rho d\rho \left[\int_{-\infty}^\infty k_f \frac{\partial C_f^b}{\partial z} \times \exp\left(iaz + \frac{i}{\hbar v_f} \int_0^z V_{ff} dz'\right) dz \right] \quad (63)$$

به دست می‌آید. مورد خاصی از نتیجه موج واپیچیده، تقریب دوحالته است [۱۷] که فقط حالت اولیه و نهایی در رابطه (۵۸)

را شامل می‌شود و دامنه پراکندگی موج واپیچیده به صورت

$$f_{fi}^{DWB}(\theta, \varphi) = -i^{\Delta} \frac{\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty J_\Delta(k_f \rho \sin \theta) \rho d\rho. \quad (64)$$

$$\times \int_{-\infty}^\infty V_{fi}(\vec{\rho}, z) \exp\left\{\left[(k_i - k_f) + \alpha\right]z + \delta\varphi(z)\right\} dz,$$

$$\delta\varphi(z) = -\frac{1}{\hbar v_i} \int_{-\infty}^z V_{ii} dz - \frac{1}{\hbar v_f} \int_z^\infty V_{ff} dz, \quad (65)$$

کاهش می‌یابد. معادلات (۶۴) و (۶۵) با نتایج موج واپیچیده بورن که به وسیله چن^۱ [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 معادله جفت‌شده (۵۸) را می‌توان به صورت

$$k_n - k_f = \frac{2\varepsilon_{fn}}{\hbar(v_f + v_n)}, \quad (66)$$

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

مورد بحث قرار می‌گیرد به دست خواهد آمد.

اولین تقریب چندحالتی از بسط بردار موج موضعی κ_f به صورت

$$\kappa_f(\vec{R}) = k_f - \frac{\mu}{\hbar^2 k_f} V_{ff}(\vec{R}), \quad (56)$$

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 رابطه (۵۱) به صفر رسیده و بنابراین دامنه پراکندگی به صورت

$$\begin{aligned} f_{fi}^A(\theta, \varphi) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\vec{K} \cdot \vec{R} + \Delta\varphi)} d\vec{R} \sum_n C_n^A(\rho, z) \\ &\quad \times V_{fn}(R, \theta) e^{i(k_n - k_i)z} \\ &= -i^{\Delta+1} \int_0^\infty J_\Delta(K'\rho) \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty \kappa_f \frac{\partial C_f^A}{\partial z} e^{iaz} dz, \end{aligned} \quad (57)$$

نتیجه می‌شود. به طوری که C_f^A در معادله جفت‌شده

$$i \frac{\hbar^2 \kappa_f}{\mu} \frac{\partial C_f^A}{\partial z} = \sum_{n=1}^N C_n^A V_{fn}(\rho, z) e^{i(k_n - k_f)z}, \quad (58)$$

صدق می‌کند. تقریب دوم برای نظریه چندحالتی 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 رابطه (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 رابطه (۵۸) با $\kappa_i = k_i$ به دست می‌آید. در این صورت

$$C_i^B(\rho, z) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar v_i} \int_{-\infty}^z V_{ii}(\rho, z') dz'\right], \quad (59)$$

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

$$f_{ii}(\theta, \varphi) = -ik_i \int_0^\infty J_0\left(\sqrt{k_i} \rho \sin \frac{\theta}{2}\right) \times \left[e^{iz(\rho)} - 1\right] \rho d\rho, \quad (60)$$

حاصل می‌گردد به طوری که

بهره گرفت. بنابراین داریم

$$\sigma_{fi} = \int_0^\infty \left| C_f^C(\rho, \infty) - \delta_{fi} \right|^2 \rho d\rho, \quad (75)$$

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

$$\frac{\varepsilon_{fn}}{v_i} \approx 0. \quad (76)$$

حاصل می‌شود. بنابراین جمع روی تمام حالت‌ها از معادله (۶۹)، معادله جفت شده

$$i\hbar \frac{\partial C_f^G}{\partial z} = \frac{1}{v_i} \sum_n C_n^G(\rho, z) V_{fn}(\rho, z), \quad (77)$$

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

$$C_f^G(\rho, z) = \left\langle \chi_f \left| \exp \left[-\frac{i}{\hbar v_i} \int_{-\infty}^z V(\vec{R}, \vec{r}) dz \right] \right| \chi_i \right\rangle, \quad (78)$$

و دامنه پراکندگی معادل آن به شکل

$$f_{fi}^G(\theta, \varphi) = -\frac{ik_i}{2\pi} \int e^{i\vec{K} \cdot \vec{\rho}} \chi_f^*(\vec{r}) \times \left[e^{i\chi(\vec{\rho}, \vec{r})} - 1 \right] \chi_i(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{\rho} \quad (79)$$

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

$$\chi(\vec{\rho}, \vec{r}) = -\frac{1}{\hbar v_i} \int_{-\infty}^\infty V(\vec{r}, \vec{\rho}, z) dz \quad (80)$$

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

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

$$\sigma_{fi} = \frac{1}{k_i^2} \int_{k_i - k_f}^{k_i + k_f} dK K \int_0^{2\pi} d\varphi \left| f_{fi}(\vec{K}) \right|, \quad (81)$$

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

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

$$f_{fi}^C(\theta, \varphi) = -i^{\Delta+1} k_i \int_0^\infty J_\Delta(K'\rho) \times \int_{-\infty}^\infty \frac{\partial C_f^C}{\partial z} e^{iaz} dz \rho d\rho, \quad (67)$$

است که در آن

$$\alpha \approx K_z - \frac{\varepsilon_{fi}}{\hbar v_i}, \quad (68)$$

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

جفت‌شده

$$i\hbar v_i \frac{\partial C_f^C}{\partial z} = \sum_{n=1}^N C_n^C V_{fn} \exp \left(i \frac{\varepsilon_{fn} z}{\hbar v_i} \right), \quad (69)$$

صدق می‌کند. برای برخوردهای انرژی بالا که پراکندگی بیشتر در زوایای کوچک رخ می‌دهد، $\alpha \approx 0$ بوده و از این رو برای

زوایای کوچک $K_z = \frac{\varepsilon_{fi}}{\hbar v_i}$ می‌باشد. در نتیجه

$$f_{fi}^{C(*)}(\theta, \varphi) = -i^{\Delta+1} k_i \int_0^\infty J_\Delta(K'\rho) \times \left[C_f^C(\rho, \infty) - \delta_{fi} \right] \rho d\rho, \quad (70)$$

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

$$\sigma_{fi} = 2\pi \frac{k_f}{k_i} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left| f_{fi}(\theta, \varphi) \right|^2 \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (71)$$

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

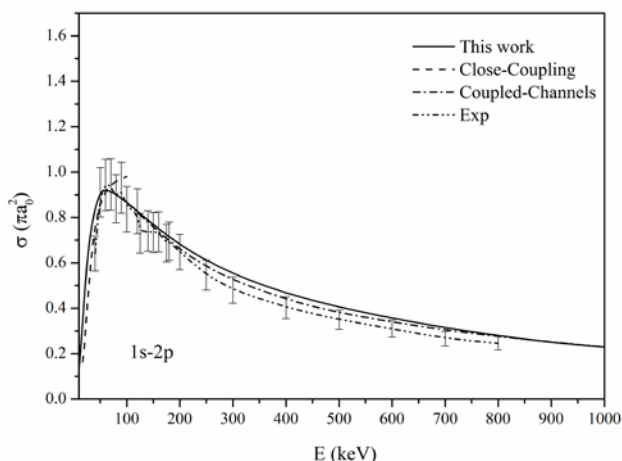
$$\sigma_{fi} \approx 2\pi \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left\{ J_\Delta(K'\rho) J_\Delta(K'\rho') \left[C_f^C(\rho, \infty) - \delta_{fi} \right] \times \left[C_f^C(\rho', \infty) - \delta_{fi} \right]^* \rho d\rho \rho' d\rho' \right\} \sin \theta d\theta, \quad (72)$$

بازنویسی کرد. با در نظر گرفتن

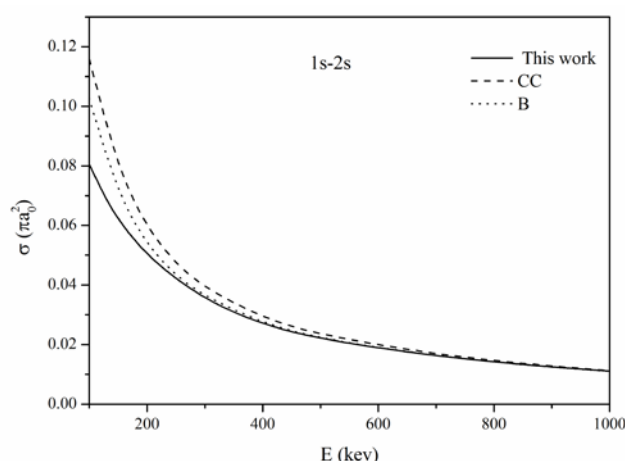
$$\sigma_{fi} \approx \int_{k_i - k_f}^{k_i + k_f} \int_0^\pi \left\{ J_\Delta(K'\rho) J_\Delta(K'\rho') \left[C_f^C(\rho, \infty) - \delta_{fi} \right] \times \left[C_f^C(\rho', \infty) - \delta_{fi} \right]^* \rho d\rho \rho' d\rho' \right\} K' dK', \quad (73)$$

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

$$\int_0^\infty J(K'\rho) J(K'\rho') K' dK' = \frac{1}{\rho} \delta(\rho - \rho'), \quad (74)$$



شکل ۳. مقایسه 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 $2p$ در محدوده انرژی ۱۰ keV تا ۱ MeV.



شکل ۲. مقایسه سطح مقطع کل به دست آمده از محاسبات با کارهای نظری تقریب بورن [۲۱] و کانال‌های جفت‌شده [۲۰] برای گذار از حالت پایه به تراز $2s$ در محدوده انرژی ۱۰۰ keV تا ۱ MeV.

تا ۱ MeV را نمایش می‌دهد. همان‌طور 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.

در شکل ۲ سطح مقطع کل تراز $2s$ با نتایج رهیافت کانال‌های جفت‌شده^۱ (CC) [۲۰] و تقریب بورن [۲۱] در محدوده انرژی ۱۰۰ keV تا ۱ MeV مقایسه شده است. خاطر نشان می‌شود نتایج تقریب بورن ذکر شده با نتایج تجربی تطبیق داده شده‌اند، درحالی‌که محاسبات انجام شده مطلق هستند. شکل ۳ مقایسه سطح مقطع محاسبه شده برای گذار $2p$ با نتایج حاصل از روش کانال‌های جفت‌شده [۲۰]، جفت‌شدگی نزدیک^۲ [۲۲] و نتایج تجربی [۲۳] در محدوده انرژی ۱۰ keV

۱. Coupling channels

۲. Close-coupling

مراجع

14. J J Thomson, *Phil. Mag.* **47** (1924) 337.
15. L Vriens, *Case Studies in Atomic Collision Physics* پ 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.
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.
۵. ر. فتحی، ف. شجاعی اکبرآبادی، م. بلوری زاده، 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, *Quantum Theory I. Elements* پ 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, *Atomic Collision Theory* پ 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.