مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۴، شمارهٔ ۲، تابستان ۱۳۹۳

محاسبهٔ سطح مقطع جزئی و کل در تقریب مرتبهٔ دوم بورن- فادیف در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در کانال تهییج

رضا فتحی

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

پست الکترونیکی: rfatahi@uk.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۳/۶ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۳۹۲/۱۲/۲۰)

چکیده

در کار حاضر از فرمول‌بندی برخورد سه جسمی در کانال تهییج در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن استفاده شده است. در محاسبات پتانسیل‌های برهم‌کنش جایگزین ماتریس گذار گردیده‌اند. سطح مقطع جزئی و کل با در نظر گرفتن جملات مرتبهٔ اول و دوم سری فادیف- لاولیس- واتسون در گذار اتم هیدروژن از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته محاسبه شده است. محدودهٔ انرژی برخورد ۱۰۰eV تا ۱keV و زاویهٔ پراکندگی پوزیترون (۱۸۰-۰) درجه انتخاب گردیده است. در نهایت نتایج به‌دست آمده با سایر نتایج موجود در دسترس از نظریه‌های قبلی مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: برخورد سه جسمی، سطح مقطع جزئی برخورد، پوزیترون، کانال تهییج، فادیف

۱. مقدمه

در یک برخورد سه جسمی که موضوع مقالهٔ حاضر می‌باشد می‌توان دستگاه را تحت عنوان یک پرتابه که اغلب یون برهنه به‌صورت B^{Z_B+} و یک هدف با یک الکترون فعال به شکل $(A^{Z_A+}+e^-)$ می‌باشد، معرفی نمود. فرآیندهای برخورد مربوط به این دستگاه سه ذره‌ای را می‌توان به‌صورت زیر نشان داد:

$$B^{Z_B+}+(A^{Z_A+}+e^-)\rightarrow B^{Z_B+}+(A^{Z_A+}+e^-)\,, \qquad (۱)$$

$$B^{Z_B+}+(A^{Z_A+}+e^-)\rightarrow B^{Z_B+}+(A^{Z_A+}+e^-)^*\,, \qquad (۲)$$

$$B^{Z_B+}+(A^{Z_A+}+e^-)\rightarrow (B^{Z_B+}+e^-)+A^{Z_A+}\,, \qquad (۳)$$

$$B^{Z_B+}+(A^{Z_A+}+e^-)\rightarrow B^{Z_B+}+A^{Z_A+}+e^- \qquad (۴)$$

فرآیند شماره (۱) برخورد الاستیک و فرآیندهای شماره (۲)، (۳) و (۴) برخوردهای غیرالاستیک و به‌ترتیب تهییج مستقیم، انتقال بار الکتریکی و یونیزاسیون نامیده می‌شوند. اگر هر دو هستهٔ A و B یکی باشند برخورد را متقارن[۱] می‌نامند و برخورد به‌صورت:

$$H^+ + H(1s)\rightarrow H(1s)+H^+\,, \qquad (۵)$$

را که در آن دو طرف دارای انرژی داخلی یکسانی باشند، فرآیند

۱. Symmetric

تشدیدی[۱] نامگذاری می‌کنند. ممکن است در یک برخورد غیرمتقارن[۲] مانند:

$$He^{2+} + H(1s) \rightarrow He^{+}(2s) + H^{+} \qquad (۶)$$

نیز فرآیند تشدیدی مشاهده شود.

سطح مقطع برخورد، احتمال حادثه مورد بررسی در برخورد اتمی را مشخص می‌سازد. به‌عنوان مثال اگر ذرهٔ A با شار N_A بر روی هدفی با n_B ذره فرود آید و نتیجهٔ برخورد ذرهٔ C باشد نرخ تولید این ذره برحسب سطح مقطع کل برخورد σ به‌شکل:

$$N_C(s^{-1}) = N_A(s^{-1}m^{-2}) n_B \sigma_{[A+B\rightarrow C]}(m^2) \qquad (۷)$$

نوشته خواهد شد.

سطح مقطع جزئی برخورد $(\frac{d\sigma}{d\Omega})$ برای یک رویداد اتمی همان تعریف سطح مقطع کل ولی برای یک جهت (زاویهٔ فضایی) مشخص خواهد بود و به‌صورت زیر به سطح مقطع کل مرتبط خواهد شد:

$$\sigma_{tot} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left[\frac{d\sigma(\theta,\phi)}{d\Omega}\right]\sin(\theta)d\theta d\phi \quad . \qquad (۸)$$

نواحی مختلف پراکندگی توسط نسبت سرعت پرتابه (υ_P) به سرعت مداری الکترون فعال در زیر دستگاه مقید (υ_e) تعیین می‌شود. در انرژی بالا $(\upsilon_P >> \upsilon_e)$ می‌توان از تقریب‌های بورن[۳] برای محاسبهٔ سطح مقطع بهره گرفت [۱]. در این انرژی سطح مقطع فرآیند تهییج بزرگ و سطح مقطع فرآیند انتقال بار کوچک است. همچنین برای محاسبهٔ سطح مقطع فرآیند تهییج در این انرژی که موضوع کار این مقاله نیز می‌باشد می‌توان از روش‌های کلاسیکی مانند مسیرهای کلاسیکی مونت‌کارلو[۴] استفاده کرد [۲].

در انرژهای میانی $(\upsilon_P \approx \upsilon_e)$ که فرآیند انتقال بار از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است از روش‌های نیمه‌کلاسیکی از جمله جفت‌شدگی نزدیک[۵] استفاده می‌گردد [۳].

در انرژی پائین $(\upsilon_P << \upsilon_e)$ دستگاه مورد نظر به‌صورت مولکول مورد بررسی قرار می‌گیرد چون در این محدودهٔ انرژی، فاصلهٔ جدایی هسته‌ها به کندی انجام می‌پذیرد و تغییر انرژی در ساختار الکترونی با انرژی جنبشی هسته‌ها قابل مقایسه است. در این انرژی از روش حالت‌های ایستای مختل شده[۶] استفاده می‌شود [۴].

برخورد یون با اتم هیدروژن از این لحاظ حائز اهمیت می‌گردد که دینامیک برخورد دستگاه‌های سه جسمی را در اختیار ما قرار می‌دهد. مطالعهٔ فرآیندهای پراکندگی در پلاسمای هیدروژن دمای پائین در محیط‌های آزمایشگاهی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. سطح مقطع پراکندگی فرآیندهای موجود در این محیط و آهنگ گذار بین حالت‌های مختلف کوانتمی درک صحیحی را از این محیط امکان‌پذیر می‌سازد و شکل خطوط طیفی مربوط به فرآیندهای انجام شده در پلاسما اطلاعات دقیقی در مورد دما، نوع ترکیبات و چگالی این محیط را در اختیار ما قرار می‌دهد [۵].

از جمله کارهای انجام شده در خصوص برخورد یون با اتم هیدروژن به‌کارگیری تقریب مرتبهٔ اول بورن است که در سال ۱۹۵۳ توسط بیت و گریفینگ انجام پذیرفت [۶]. در همین راستا تقریب مرتبهٔ اول اپنهایمر- برینکمن- کرامرز برای مطالعهٔ کانال انتقال بار الکترون استفاده شده بود [۷]. جکسون و شیف پیشنهاد دادند که سهم برهم‌کنش هسته‌ای نیز در تقریب مرتبهٔ اول بورن گنجانده شود [۸].

در سال ۱۹۶۴ مدل دیگری که موج خروجی را مختل شده در نظر می‌گرفت مطرح شد و در برخورد الکترون و پروتون با اتم هیدروژن به‌کار گرفته شد [۹ و ۱۰]. بعداً نشان داده شد که این تقریب در زوایای کوچک پراکندگی تقریب مناسبی نیست. در محدودهٔ انرژی میانی از روش‌های به‌کار گرفته شده می‌توان به‌روش پارامتر برخورد و جفت شدگی نزدیک اشاره کرد [۱۱]. از جملهٔ روش‌های اختلالی که در کانال تهییج به‌کار برده شده، مدل موج کولنی[۷] CW است [۱۲]. یکی از مهم‌ترین جنبه‌های

۱. Resonant processes

۲. Non-symmetric

۳. Born series

۴. Classical trajectory Monte Carlo method

۵. Close-coupling

۶. Perturbed stationary state

۷. Coulomb Waves

پراکندگی اتمی بلند برد بودن پتانسیل کولنی است که در نظریه‌های مبتنی بر عملگر گذار استاندارد (اختلالی توسعه یافته) باعث بروز تکینگی می‌شود، بنابراین با اعمال شرایط مرزی تصحیح شده نظریهٔ موج واپیچیدهٔ پیوسته[۱] CDW در فیزیک اتمی مطرح شده است [۱۳].

برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن به‌عنوان یک دستگاه سه جسمی کولنی بسیار مورد توجه بوده و در تحقیقات شاخه‌های مختلف فیزیک از نتایج این برخورد استفادهٔ بسیاری شده است [۱۴].

از جمله واکنش‌هایی که در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن صورت می‌پذیرد می‌توان موارد زیر را نام برد

$$e^+ + \mathrm{H} \rightarrow \begin{cases} e^+ + \mathrm{H} \\ \mathrm{P} + \mathrm{ps}^* \\ e^+ + \mathrm{H}^* \\ e^+ + e^- + \mathrm{P} \\ \mathrm{P} + \gamma \end{cases} . \qquad (۹)$$

کانال‌های یاد شده به‌ترتیب برخورد الاستیک، تشکیل پوزیترونیم، تهییج، یونیزاسیون و کانال نابودی می‌باشند. در کانال یونیزاسیون می‌توان با مطالعهٔ توزیع انرژی و زاویه‌ای الکترون خارج شده برحسب زوایای مختلف، مدل مورد نظر را با سایر مدل‌های نظری مقایسه نمود. در کانال تهییج نیز می‌توان با وارد نمودن ضریب پلاریزاسیون که کمیت بسیار حساسی است، دقت مدل انتخاب شده در مقایسه با سایر مدل‌های نظری دیگر را مورد بررسی قرار داد [۱۵].

در کانال‌های مختلف این برخورد از مدل‌های متفاوتی استفاده گردیده که از جملهٔ آنها می‌توان به مدل[۲] DWPO و محاسبات انجام شده توسط روش CTMC در کانال تهییج [۱۶]، روش جفت شدگی نزدیک با مدل‌های مختلف و نظری عملگر گذار و معادلات جفت شدهٔ لیپمن- شوینگر در تشکیل پوزیترونیم، [۱۷] و مدل موج واپیچیده در کانال یونیزاسیون اشاره نمود [۱۸].

روش استفاده شده در کار حاضر که یک نظریهٔ اختلال تعمیم یافته است و توسط دامنه‌های سری فادیف- واتسون- لاولیس انجام پذیرفته، یک روش کاملاً کوانتمی است. این روش اندرکنش‌ها و سهم هر یک از جملات در اندرکنش مورد نظر را مشخص نموده و از طرفی با کامپیوترهای شخصی تا حد زیادی قابل انجام است. لازم به‌ذکر است یادآور شویم در کل محاسبات از یکای اتمی استفاده شده است.

۲. نظریه

کانال تهییج به‌صورت:

$$\mathrm{P} + (\mathrm{T} + \mathrm{e}) \rightarrow \mathrm{P} + (\mathrm{T} + \mathrm{e})^* \qquad (۹)$$

تعریف می‌شود که در آن P پرتابه به جرم M_{P} و $(T+e)$ هدفی با یک الکترون فعال است. در رابطه با هدفی مانند هلیوم نیاز به طرح مدل الکترون فعال است که در رابطه با اتم هیدروژن که مورد بحث ما می‌باشد موضوعیت ندارد. در دستگاه مختصات مرکز جرم دستگاه سه ذره‌ای [۱۹]، سطح مقطع دیفرانسیلی در گذار از حالت اولیهٔ i به حالت نهایی f با رابطهٔ:

$$\left(\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega}\right)_{\mathrm{C.M}} = \frac{v_i v_f}{۴\pi^۲}\frac{K_f}{K_i}|T_{i\to f}|^۲ \qquad (۱۰)$$

به عملگر گذار T مرتبط می‌شود. در این رابطه v_i و v_f به‌ترتیب جرم‌های کاهش یافته و K_i و K_f اندازه حرکت‌های نسبی اولیه و نهایی پرتابه می‌باشند.

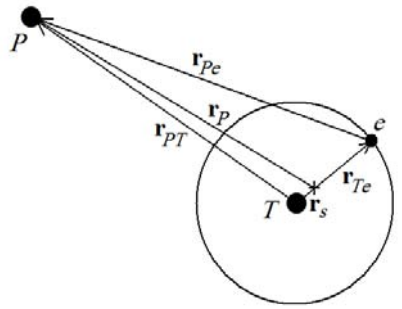
دقت می‌نماییم که در محاسبات سطح مقطع دیفرانسیلی توسط روش فادیف به‌جای $T_{i\to f}$ کمیت A_{FWL} که دامنهٔ پراکندگی فادیف ـ واتسون ـ لاولیس می‌باشد جایگزین خواهد شد. سطح مقطع دیفرانسیلی در چارچوب آزمایشگاه و مرکز جرم به‌صورت [۲۰]:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mathrm{lab}} = \frac{(۱+\tau^۲+۲\tau\cos\theta)^{۳/۲}}{|۱+\tau\cos\theta|}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mathrm{C.M}} \qquad (۱۱)$$

به هم مرتبط می‌شوند، به‌طوری‌که در این رابطه θ زاویهٔ پراکندگی پرتابه در چارچوب مرکز جرم و τ نسبت جرم پرتابه به جرم هدف ($M_{\mathrm{P}}/M_{\mathrm{T}}$) می‌باشد. سری پراکندگی

۱. Continuum Distorted Wave

۲. Distorted Wave Polarized Orbital



شکل ۱. بردارهای توصیف کنندهٔ دستگاه سه جسمی در کانال تهییج.

فادیف ـ واتسون ـ لاولیس برای عملگر گذار متناظر با کانال تهییج به‌صورت [۲۰]:

$$\tau_E = T_{\rm Pe} + T_{\rm PT} + T_{\rm PT}\, G_{\circ}^{+}\, T_{\rm Pe} + T_{\rm Pe}\, G_{\circ}^{+}\, T_{\rm PT} + \ldots \qquad (۱۲)$$

می‌باشد که T_{xy} عملگر گذار دو جسمی مربوط به اندرکنش دو جسم x و y است. اگر پتانسیل برهم‌کنش این دو ذره با V_{xy} نمایش داده شود، عملگر گذار دو جسمی به‌صورت:

$$T_{xy} = V_{xy} + V_{xy}\, G_{\circ}^{+}\, T_{xy} \qquad (۱۳)$$

تعریف می‌شود. $G_{\circ}^{+}$ عملگر گرین انتشار آزاد کل دستگاه سه ذره‌ای است. برای مشاهدهٔ جزئیات بیشتر سینماتیک و دینامیک مسئله به مرجع [۱۹] و فصل برخوردهای سه جسمی مرجع [۲۰] مراجعه شود.

برای محاسبهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی و کل در کانال تهییج باید دامنه‌های پراکندگی متناظر با این کانال را با قرار دادن عناصر عملگر گذار این کانال، بین حالت‌های اولیه و نهایی دستگاه به‌دست آورد.

در تمامی محاسبات دامنه‌های پراکندگی این مقاله از جملهٔ اول عملگر گذار یعنی پتانسیل برهم‌کنش استفاده شده است و این پتانسیل‌ها به‌صورت کولنی در نظر گرفته شده‌اند. عبارت (۱۲) شامل جملاتی است که در برگیرندهٔ برهم‌کنش مستقیم الکترون و همچنین جملات برهم‌کنش غیرمستقیم الکترون و یا به عبارتی برهم‌کنش‌های بین هسته‌ای می‌باشد که آنها را به‌ترتیب با $\Re_e$ و $\Re_n$ نمایش می‌دهیم به‌طوری‌که:

$$\Re_e = V_{\rm Pe}\ , \qquad (۱۴)$$

و

$$\Re_n = V_{\rm PT} + V_{\rm PT}\, G_{\circ}^{+}\, V_{\rm Pe} + V_{\rm Pe}\, G_{\circ}^{+}\, V_{\rm PT}\ . \qquad (۱۵)$$

بنابراین می‌توان نوشت:

$$\tau_E = \Re_e + \Re_n \qquad (۱۶)$$

همان‌طورکه گفته شد دامنهٔ پراکندگی فادیف ـ واتسون ـ لاولیس ($\mathrm{A_{FWL}}$) با محاسبهٔ عناصر عملگر گذار بین حالت‌های اولیه و نهایی به‌دست می‌آیند و می‌توان دامنهٔ تهییج تا تقریب مرتبهٔ دوم را به‌صورت زیر نمایش داد:

$$\mathrm{A}_{FWL} = \langle f | \tau_E | i \rangle = \langle f | \Re_e | i \rangle + \langle f | \Re_n | i \rangle == \mathrm{A}_e^{(۱)} + \mathrm{A}_n \qquad (۱۷)$$

$\mathrm{A}_e^{(۱)}$ جملهٔ مرتبهٔ اول دامنهٔ پراکندگی برهم‌کنش مستقیم الکترون است و به‌صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$\mathrm{A}_e^{(۱)} = \langle f | V_{\rm Pe} | i \rangle\ . \qquad (۱۸)$$

جملهٔ A_n شامل سه جمله به‌صورت:

$$\mathrm{A}_n = \mathrm{A}_n^{(۱)} + \mathrm{A}_n^{(۲a)} + \mathrm{A}_n^{(۲b)} \qquad (۱۹)$$

است. $\mathrm{A}_n^{(۱)}$ دامنهٔ پراکندگی برهم‌کنش مرتبهٔ اول مستقیم بین هسته‌ای و $\mathrm{A}_n^{(۲a)}$ و $\mathrm{A}_n^{(۲b)}$ دامنه‌های پراکندگی مرتبهٔ دوم برهم‌کنش غیرمستقیم الکترون می‌باشند به‌طوری‌که:

$$\mathrm{A}_n^{(۱)} = \langle f | V_{\rm PT} | i \rangle\ , \qquad (۲۰)$$

$$\mathrm{A}_n^{(۲a)} = \langle f | V_{\rm PT}\, G_{\circ}^{+}\, V_{\rm Pe} | i \rangle\ , \qquad (۲۱)$$

$$\mathrm{A}_n^{(۲b)} = \langle f | V_{\rm Pe}\, G_{\circ}^{+}\, V_{\rm PT} | i \rangle\ . \qquad (۲۲)$$

در جملهٔ $\mathrm{A}_n^{(۲a)}$ ابتدا P (پرتابه) و e (الکترون) و سپس P و T (هستهٔ هدف) اندرکنش می‌کنند در صورتی‌که در جملهٔ $\mathrm{A}_n^{(۲a)}$ ابتدا P و T و در نهایت P و e برهم‌کنش می‌نمایند. لازم به‌ذکر است که $|i\rangle$ و $\langle f|$ به‌ترتیب نشان‌دهندهٔ حالت‌های اولیه و نهایی دستگاه سه ذره‌ای می‌باشند.

برای معرفی پتانسیل‌های برهم‌کنش در تقریب مرتبهٔ اول می‌بایست نکاتی در خصوص هامیلتونی مطرح شود: با توجه به شکل (۱) مجموعه مختصات (r_P, r_{Te}) توصیف‌کنندهٔ دستگاه بوده و هامیلتونی کل دستگاه سه ذره‌ای در دستگاه مختصات مرکز جرم را می‌توان به شکل:

$$H = -\frac{۱}{۲\nu_i}\nabla^{۲}_{r_{\rm P}} - \frac{۱}{۲\mu_i}\nabla^{۲}_{r_{\rm Te}} + V$$

$$V = V_{\rm Pe} + V_{\rm Te} + V_{\rm PT} = -\frac{۱}{r_{\rm Pe}} - \frac{۱}{r_{\rm Te}} + \frac{۱}{r_{\rm PT}} \qquad (۲۳)$$

نوشت. در هامیلتونی ذکر شده ν_i و μ_i جرم‌های کاهش یافته می‌باشند. اگر هامیلتونی کل به دو قسمت H_i و V_i شکسته شود $(\mathrm{H}=\mathrm{H}_i+\mathrm{V}_i)$ به روش جداسازی متغیرها می‌توانیم به‌راحتی توابع موج مربوط به هامیلتونی H_i را به‌دست آورده و از V_i به‌عنوان پتانسیل اختلالی استفاده نماییم. هدف از انجام این کار این است که حل دقیق توابع موج مربوط به هامیلتونی کل امکان‌پذیر نیست

$$H_i=-\frac{1}{2\nu_i}\nabla^2_{r_P}-\frac{1}{2\mu_i}\nabla^2_{r_{\mathrm{Te}}}+V_{\mathrm{Te}}\ ,$$

$$V_i=V_{\mathrm{Pe}}+V_{\mathrm{PT}}=-\frac{1}{r_{\mathrm{Pe}}}+\frac{1}{r_{\mathrm{PT}}}\ . \qquad (۲۴)$$

جواب‌های هامیلتونی H_i به‌صورت حاصل ضرب توابع موج اتم هیدروژن برای زیر دستگاه مقید و تابع موج تخت به‌عنوان تابع موج پرتابه ظاهر خواهند شد.

اگر K_i و K_f به‌ترتیب اندازهٔ حرکت اولیه و نهایی ذرهٔ P در دستگاه مختصات مرکز جرم P و $(\mathrm{T+e})$ باشند و انرژی‌های قیدی اولیه و نهایی زیردستگاه مقید به‌ترتیب با ε_i و ε_f نشان داده شوند، می‌توان انرژی کل دستگاه در کانال تهییج را به‌صورت:

$$E=\frac{1}{2\nu_i}K_i^2+\varepsilon_i=\frac{1}{2\nu_i}K_f^2+\varepsilon_f \qquad (۲۵)$$

نوشت که در آن $K_i=\nu_i v_i$ و $K_f=\nu_i v_f$ بوده و ν_i و ν_f به‌ترتیب سرعت اولیه و نهایی P نسبت به مرکز جرم زیر دستگاه مقید $(\mathrm{T+e})$ و ν_i جرم کاهش یافته می‌باشد که در ادامه تعریف خواهد شد. اگر تابع موج ذرهٔ آزاد به‌صورت $\langle k|r\rangle=e^{ik.r}$ بهنجار شده باشد این رابطه منجر به روابط بهنجارش $\langle k|k'\rangle=(2\pi)^3\delta(k-k')$ و $\langle r|r'\rangle=\delta(r-r')$ خواهد شد و توابع موج اولیه و نهایی کل دستگاه را در فضای اندازه حرکت به‌صورت:

$$\langle k,K\,|\,i\rangle=(2\pi)^{\frac{3}{2}}\tilde{\varphi}_i(k)\,\delta(K-K_i)\ , \qquad (۲۶)$$

$$\langle k,K\,|\,f\rangle=(2\pi)^{\frac{3}{2}}\tilde{\varphi}_f(k)\,\delta(K-K_f) \qquad (۲۷)$$

نوشته می‌شود.

تابع موج قیدی اتم هیدروژن در فضای اندازه حرکت را می‌توان به شکل:

$$\tilde{\varphi}_{nlm}(k)=R_{nl}(k)Y_{lm}(\hat{k}) \qquad (۲۸)$$

نوشت. (n,l,m) اعداد کوانتمی جهت توصیف حالت کوانتمی الکترون می‌باشند و همان‌طورکه مشاهده می‌شود تابع موج به دو قسمت شعاعی یعنی جملهٔ $R_{nl}(k)$ و قسمت زاویه‌ای یعنی $Y_{lm}(\hat{k})$ تقسیم شده است که Y_{lm}ها هماهنگ‌های کروی هستند. قسمت شعاعی به‌صورت:

$$R_{nl}(k)=N_{nl}\frac{k^l}{(k^2-2\varepsilon_n)^{l+2}}C^{l+1}_{n-l-1}\left(\frac{k^2+2\varepsilon_n}{k^2-2\varepsilon_n}\right) \qquad (۲۹)$$

تعریف می‌شود. N_{nl} ثابت بهنجارش بوده و عبارت است از:

$$N_{nl}=(2\pi)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{2^{4l+5}n(n-l-1)!}{\pi(n+1)!}\right)^{\frac{1}{2}}l!(-2\varepsilon_n)^{(2l+5)/4}\ . \qquad (۳۰)$$

ε_n انرژی قیدی الکترون $\varepsilon_n=-Z^2/2n^2$ و $C^{l+1}_{n-l-1}(X)$ چندجمله‌ای‌های گگن‌باور می‌باشند. لازم به‌ذکر است تأکید نماییم که اگر جایی صحبت از جملهٔ هسته‌ای می‌شود فرآیند مورد نظر یک فرآیند هسته‌ای نبوده و اتمی است و منظور از این فرآیند برهم‌کنش کولنی پرتابه با هستهٔ اتم می‌باشد. هر چند شکل‌های تعدیل یافتهٔ پتانسیل کولنی را می‌توان با وارد کردن اثرهای پوششی سایر ذرات و یا با میانگین‌گیری خاصی روی پتانسیل پرتابه و هسته انجام داد. در این صورت توابع موج ظاهر شده در محاسبات تغییر کرده و روش، تحت عنوان موج واپیچیده عنوان خواهد شد که موضوع کار مقالهٔ حاضر نیست. در این مقاله تمامی پتانسیل‌ها به‌صورت کولنی با بار مؤثر $Z=z_1z_2$ برای دو ذرهٔ برهم‌کنشی ۱ و ۲ ظاهر می‌گردد.

در مرجع [۱۵] شکل انتگرالی دامنه‌های مرتبه اول الکترونی و هسته‌ای و نحوهٔ محاسبه آنها آورده شده است که از تکرار مجدد آنها صرف‌نظر می‌نماییم. همان‌طوری‌که در مرجع یاد شده مشاهده می‌شود محاسبات مربوط به دامنهٔ مرتبهٔ اول الکترونی منجر به محاسبهٔ شکل عامل غیرالاستیک گردیده و در محاسبهٔ دامنهٔ مرتبهٔ اول هسته‌ای با پتانسیل برهم‌کنش کولنی به‌دلیل تعامد توابع موج عدد صفر ظاهر می‌گردد و این دامنه با پتانسیل برهم‌کنش کولنی به‌گونه‌ای عمل می‌کند که گویا هیچ سهمی در سطح مقطع کل ندارد. این مسئله در محاسبات مربوط به مرجع [۱۲] نیز مشاهده می‌شود هر چند مدلی

که در این مقاله مطرح گردیده با کار حاضر متفاوت است. بنابراین برای محاسبهٔ دامنهٔ مرتبهٔ اول هسته‌ای می‌بایست از عملگر گذار دو جسمی استفاده نمود که در کار حاضر موضوعیت ندارد.

شکل انتگرالی دامنه‌های مرتبهٔ دوم در کانال تهییج به‌صورت:

$$\begin{aligned}\mathrm{A}_n^{(2a)} &= \left\langle f \left| V_{\mathrm{PT}} G_\circ^+ V_{\mathrm{Pe}} \right| i \right\rangle \\ &= (2\pi)^{-3} \int d\boldsymbol{k}_i \, d\boldsymbol{k}_f \, \tilde{\varphi}_f^*(\boldsymbol{k}_f)\, \tilde{\varphi}_i(\boldsymbol{k}_i) \\ &\quad V_{\mathrm{PT}}(U_f, \boldsymbol{U}_f - \boldsymbol{K}_f + \boldsymbol{k}_i + \alpha \boldsymbol{K}_i) \times \\ &\quad G_\circ^+(E_i) V_{\mathrm{Pe}}(\boldsymbol{k}_f - \alpha' \boldsymbol{K}_f + \alpha' \boldsymbol{k}_i + \\ &\quad \alpha\alpha' \boldsymbol{K}_i, \beta \boldsymbol{k}_i - (1-\alpha\beta)\boldsymbol{K}_i)\end{aligned} \tag{۳۱}$$

و

$$\begin{aligned}\mathrm{A}_n^{(2b)} &= \left\langle f \left| V_{\mathrm{Pe}} G_\circ^+ V_{\mathrm{PT}} \right| i \right\rangle \\ &= (2\pi)^{-3} \int d\boldsymbol{k}_i \, d\boldsymbol{k}_f \, \tilde{\varphi}_f^*(\boldsymbol{k}_f)\, \tilde{\varphi}_i(\boldsymbol{k}_i) \\ &\quad V_{\mathrm{Pe}}(\beta \boldsymbol{k}_f - (1-\alpha\beta)\boldsymbol{K}_f, \alpha' \boldsymbol{k}_f + \alpha\alpha' \boldsymbol{K}_f + \boldsymbol{k}_i - \alpha' \boldsymbol{K}_i) \\ &\quad \times G_\circ^+(E_i') V_{\mathrm{PT}}(U_i - K_i + k_f + \alpha K_f, U_i)\end{aligned} \tag{۳۲}$$

خواهند بود.

عملگرهای انتشارگر که در روابط (۳۱) و (۳۲) ظاهر شده‌اند عبارت‌اند از:

$$G_\circ^+(E_i) = \frac{1}{E_i - \frac{1}{2\mu_i}(k_f - \alpha' K_f + \alpha' k_i + \alpha\alpha' K_i)^2 + i\eta} \; ; \; \eta \to 0^+ \tag{۳۳}$$

و

$$G_\circ^+(E_i') = \frac{1}{E_i' - \frac{1}{2\mu_i}(\alpha' k_f + \alpha\alpha' K_f + k_i - \alpha' K_i)^2 + i\eta} \; ; \; \eta \to 0^+ \; . \tag{۳۴}$$

نسبت‌های جرمی و جرم‌های کاهش یافته ظاهر شده در روابط (۳۱) الی (۳۴) و رابطهٔ (۲۳) و (۲۵) به صورت:

$$\alpha = \frac{M_T}{m + M_T} \quad , \quad \beta = \frac{M_P}{m + M_P} \quad , \quad \alpha' = \frac{m}{m + M_T} \tag{۳۵}$$

و

$$\nu_i = \frac{M_P (m + M_T)}{m + M_P + M_T} \quad , \quad \mu_i = \frac{m M_P}{m + M_P} \tag{۳۶}$$

تعریف می‌گردند. E_i و E_i' به انرژی‌های پراکندگی معروفند [۱۹].

چون گذار از حالت پایهٔ اتم هیدروژن قرار است محاسبه شود، با استفاده از روابط (۲۸) الی (۳۰) می‌توان نتیجه گرفت که تابع موج حالت $1s$ در فضای اندازه حرکت به‌صورت:

$$\tilde{\phi}_{1s}(k) = \frac{2^{3/2} Z^{5/2}}{\pi (k^2 + Z^2)^2} \quad , \tag{۳۷}$$

و تبدیل فوریهٔ پتانسیل جاذبهٔ کولنی به شکل:

$$\tilde{V}_C(k) = -\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{Z}{k^2} \tag{۳۸}$$

خواهد بود.

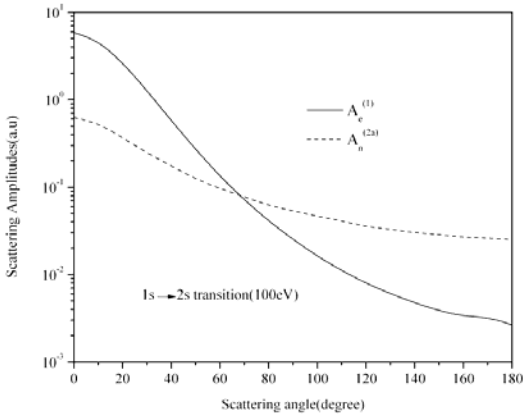
همان‌طورکه گفتیم به جای عملگر گذار دوجسمی در محاسبهٔ تمامی دامنه‌ها از پتانسیل برهم‌کنش استفاده نمودیم بنابراین خواهیم داشت [۱۹]:

$$T_C(k', k, E) \cong (2\pi)^{3/2} \tilde{V}_C(k' - k) \; . \tag{۳۹}$$

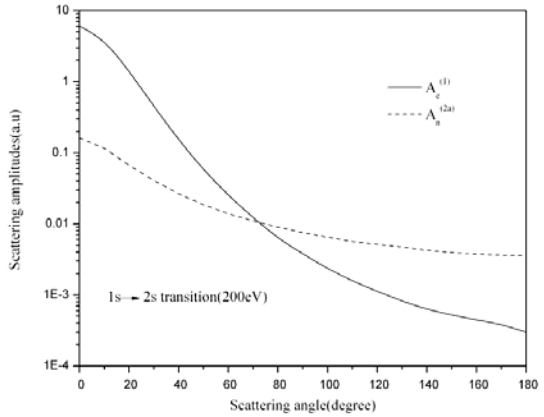
هدف این مقاله نشان دادن تأثیر جملات مرتبهٔ دوم با در نظر گرفتن پتانسیل کولنی با بار مؤثر $Z = z_1 z_2$ در سطح مقطع جزئی و کل می‌باشد، بنابراین فکر می‌کنیم وارد شدن در جزئیات محاسبات عددی ما را از هدف مقاله دور می‌کند. ولی لازم به‌ذکر است گفته شود که انتگرال‌های موجود را می‌توان با روش تبدیلات فوریه و یا با استفاده از انتگرال‌های فاینمن تا حد زیادی ساده نموده و در نهایت به‌روش عددی کوادراتور گاؤس حل نمود. بنابراین با استفاده از روابط نوشته شده نتایج به‌صورت زیر حاصل خواهند شد.

۳. نتایج

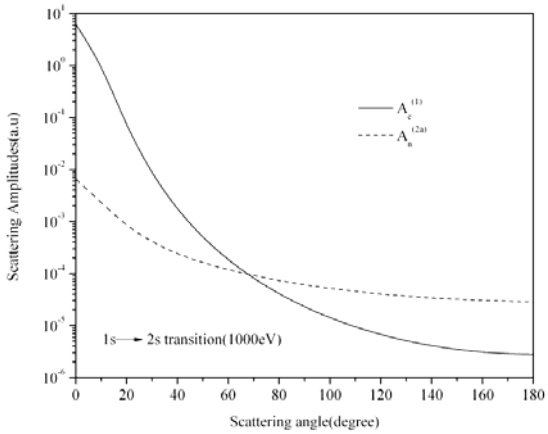
همان‌طوری‌که از منحنی‌های شکل‌های (۲) الی (۴) مشخص است در زوایای کوچک پراکندگی سهم دامنهٔ مرتبهٔ اول نسبت به جملهٔ مرتبهٔ دوم بزرگ بوده و بنابراین سهم عمده‌ای را در سطح مقطع کل خواهد داشت هرچند با افزایش زاویهٔ پراکندگی این جمله کوچک شده و دامنهٔ مرتبهٔ دوم بر این جمله غالب می‌گردد. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی برخورد جملهٔ مرتبهٔ اول بزرگ‌تر شده و جملهٔ مرتبهٔ دوم عملکرد متفاوتی را نشان می‌دهد و با افزایش انرژی کاهش می‌یابد. مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی، جملهٔ مرتبهٔ اول سریع‌تر



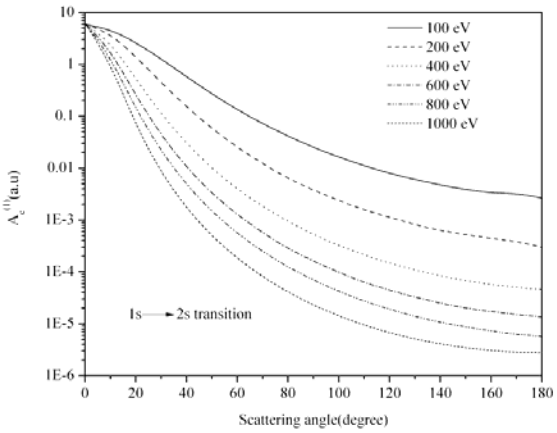
شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) دامنه‌های پراکندگی مرتبهٔ اول الکترونی و مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته در انرژی برخورد ۱۰۰ الکترون ولت.



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) دامنه‌های پراکندگی مرتبهٔ اول الکترونی و مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته در انرژی برخورد ۲۰۰ الکترون ولت.

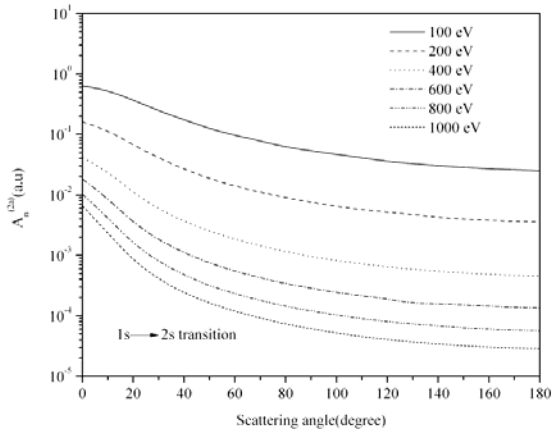


شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) دامنه‌های پراکندگی مرتبهٔ اول الکترونی و مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته در انرژی برخورد ۱۰۰۰ الکترون ولت.

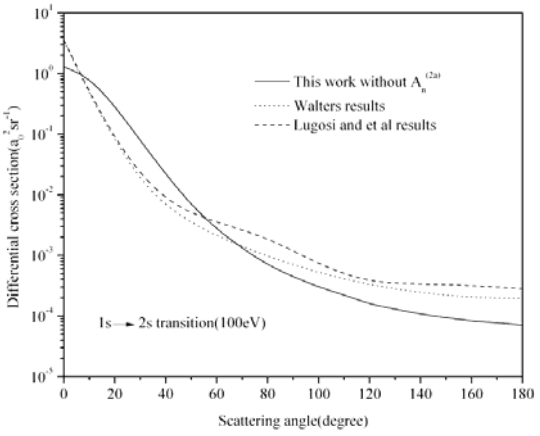


شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) دامنه‌های پراکندگی مرتبهٔ اول الکترونی در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته در انرژی‌های برخورد ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ الکترون ولت برحسب زاویهٔ پراکندگی.

به سمت مقادیر کوچک‌تر پیش می‌رود که این امر در خصوص جملهٔ مرتبهٔ دوم نیز به چشم می‌خورد. همچنین این منحنی‌ها نشان می‌دهند که با افزایش انرژی، جملهٔ مرتبهٔ دوم در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی بر جملهٔ اول غالب می‌گردد. منحنی شکل (۵) بیانگر این مطلب است که با افزایش انرژی برخورد و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته با افزایش زاویهٔ پراکندگی این جمله به سرعت کوچک می‌شود. این امر در مورد جملهٔ مرتبهٔ دوم در شکل (۶) نیز مشهود است، با این تفاوت که در جملهٔ مرتبهٔ اول الکترونی و در زاویهٔ نزدیک به صفر این جمله مقدار تقریباً یکسانی برای انرژی‌های متفاوت دارد در حالی‌که در این زوایا و با افزایش انرژی جملهٔ مرتبهٔ دوم کاهش چشمگیری را دارا می‌باشد و در ضمن سرعت کاهش این دامنه با افزایش انرژی برخورد به سرعت دامنهٔ مرتبهٔ اول الکترونی انجام نمی‌پذیرد. لازم به‌ذکر است گفته شود که



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) دامنه‌های پراکندگی مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته در انرژی‌های برخورد ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ الکترون ولت برحسب زاویهٔ پراکندگی.



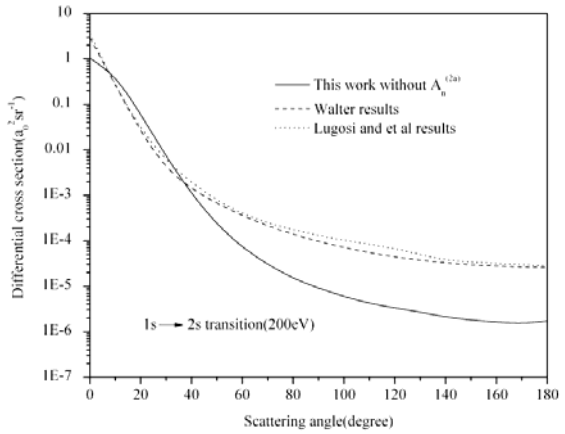
شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر بدون در نظر گرفتن جملهٔ مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۱۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته با نتایج موج واپیچیده [۱۶] و روش جفت‌شدگی نزدیک [۲۱].

جملات $A_n^{(2a)}$ و $A_n^{(2b)}$ از نظر مقداری خیلی به هم نزدیک هستند و لذا از آوردن منحنی‌های مربوط به جملهٔ $A_n^{(2b)}$ صرف نظر نمودیم. منحنی‌های مربوط به شکل‌های (۶) و (۷) مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر بدون در نظر گرفتن جملهٔ مرتبهٔ دوم را با دو روش نظری موج واپیچیده [۱۶] و جفت‌شدگی نزدیک [۲۱] نشان می‌دهند.

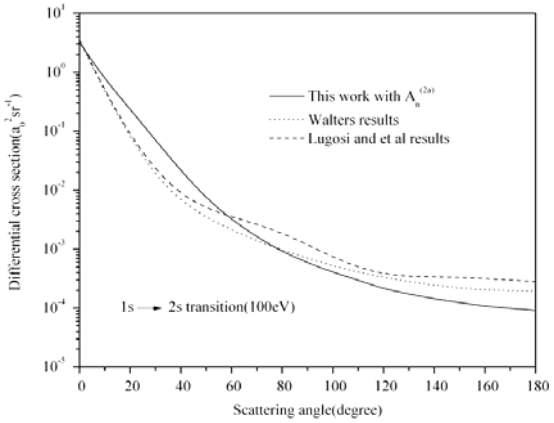
همان‌طوری‌که مشاهده می‌شود دو نتیجهٔ موج واپیچیده و جفت‌شدگی نزدیک به هم نزدیک‌ترند. به‌خصوص در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی، اختلاف نتایج کار حاصل با دو روش نظری دیگر دارای بیشتر می‌شود. در زوایای نزدیک به صفر منحنی‌های مربوط به شکل‌های (۷) و (۸) نیز این اختلاف قابل ملاحظه است. با این مقایسه به نظر می‌رسد که جملهٔ مرتبهٔ اول الکترونی به تنهایی نمی‌تواند توصیف خوبی از این دستگاه داشته باشد و به‌همین دلیل نیاز به جملهٔ مربوط به برهم‌کنش هسته‌ای و جملات با تقریب‌های بالاتر محسوس است. همان‌طورکه گفته شد، در نظر گرفتن جملهٔ مربوط به برهم‌کنش هسته‌ای با پتانسیل برهم‌کنش کولنی منجر به عدد صفر خواهد شد، از این‌رو جملات مرتبهٔ دوم را وارد محاسبات نمودیم.

در شکل‌های (۹) و (۱۰) جملات مرتبهٔ دوم به محاسبات اضافه می‌گردند. مقایسهٔ منحنی‌ها بیانگر این مطلب است که اختلاف‌ها کمتر شده‌اند و این امر در زوایای کوچک پراکندگی بیشتر به چشم می‌خورد. در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی اختلاف‌ها کوچک‌تر شده‌اند، ولی هنوز به قوت خود باقی هستند. دلیل این امر ناشی از نبود جملهٔ مرتبه اول هسته‌ای است. مقایسهٔ منحنی‌های شکل‌های (۹) و (۱۰) نشان می‌دهد که با افزایش انرژی برخورد، اختلاف نتایج کار مورد نظر با دو روش نظری دیگر کمتر می‌گردد، که دلیل این امر را می‌توان به توابع موج انتخابی در محاسبات نسبت داد و اینکه با افزایش انرژی برخورد تقریب موج تخت برای ذرهٔ ورودی و پراکنده شده از اعتبار بیشتری برخوردار است. علاوه بر اینها با افزایش انرژی برخورد با تقریب بهتری می‌توان پتانسیل برهم‌کنش را با عملگر گذار جایگزین نمود.

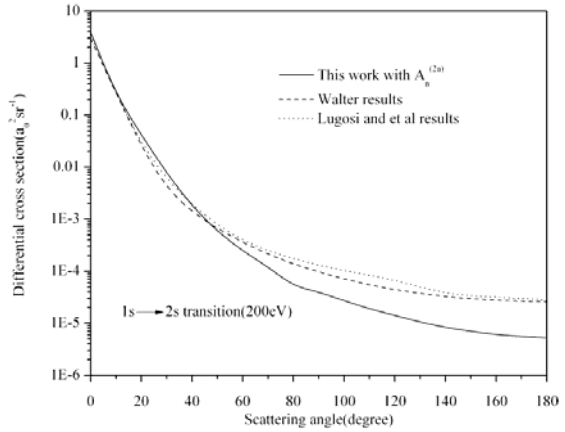
این جایگزینی از طرفی باعث ساده‌تر شدن محاسبات و از طرف دیگر باعث از دست رفتن برخی اطلاعات از جمله عملکرد جملهٔ مرتبه اول هسته‌ای در زوایای مختلف پراکندگی خواهد شد. همان‌طورکه از شکل (۱۱) مشخص می‌باشد سطح مقطع کل محاسبه شده در کار حاضر با سایر روش‌های نظری



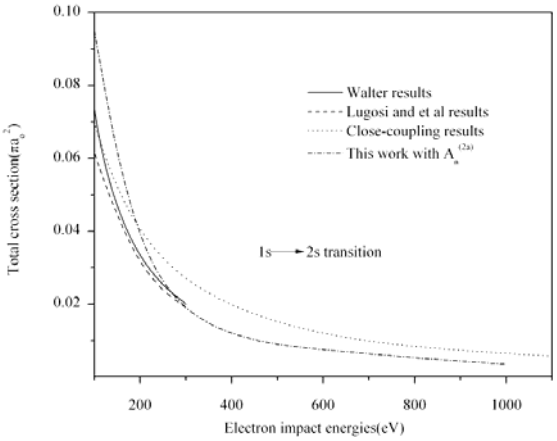
شکل ۸ (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر بدون در نظر گرفتن جملهٔ مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۲۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته، با نتایج موج واپیچیده [۱۶] و روش جفت‌شدگی نزدیک [۲۱].



شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر با در نظر گرفتن جملهٔ مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۱۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته، با نتایج موج واپیچیده [۱۶] و روش جفت‌شدگی نزدیک [۲۱].



شکل ۱۰. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر با در نظر گرفتن جملهٔ مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۲۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته، با نتایج موج واپیچیده [۱۶] و روش جفت‌شدگی نزدیک [۲۱].



شکل ۱۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسهٔ سطح مقطع کل محاسبه شده در کار حاضر (خط- نقطه چین) با در نظر گرفتن جملهٔ مرتبهٔ دوم در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در محدودهٔ انرژی ۱۰۰-۱۱۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته، با نتایج روش جفت‌شدگی نزدیک [۲۱] (خط توپر)، موج واپیچیده [۱۶] (خط چین)، جفت‌شدگی نزدیک (۳و۳) [۲۲] (نقطه‌چین).

از جمله جفت‌شدگی نزدیک (۳ و ۳) [۲۲] در انرژی‌های کوچک‌تر توافق کمتری دارد و با افزایش انرژی این اختلاف کمتر می‌گردد. نکتهٔ قابل توجه این است که در انرژی‌های بالا برخلاف انرژی‌های کوچک‌تر نتایج مربوط به سطح مقطع کل کار حاصل زیر منحنی مربوط به جفت‌شدگی نزدیک و موج واپیچیده قرار می‌گیرد که دلیل آنرا می‌توان در منحنی‌های سطح

مقطع دیفرانسیلی به وضوح مشاهده کرد. همان‌طورکه می‌دانیم بیشترین سهم سطح مقطع دیفرانسیلی در سطح مقطع کل مربوط به زوایای کوچک پراکندگی است و در این زوایا و در انرژی‌های کوچک‌تر برخلاف انرژی‌های بزرگ‌تر پراکندگی نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کار مورد نظر در بالای دو روش نظری دیگر قرار می‌گیرد.

حدس می‌زنیم که اگر می‌توانستیم نقش جملهٔ مرتبه اول هسته‌ای را در محاسباتمان وارد نماییم، وجود اختلاف فاز مخرب بین دامنهٔ مرتبهٔ اول الکترونی و مرتبهٔ اول هسته‌ای در زوایای کوچک‌تر پراکندگی و اختلاف فاز سازنده در زوایای بزرگ پراکندگی باعث می‌گردید که سطح مقطع دیفرانسیلی در زوایای کوچک پراکندگی کوچک‌تر و در زوایای بزرگ پراکندگی بزرگ‌تر شده و نتایج حاصل شده در خصوص سطح مقطع دیفرانسیلی و کل با نتایج سایر نظریه‌ها همخوانی کامل داشته باشد. دلیل این امر را می‌توان در مرجع [۲۳] که توسط نویسندهٔ مقالهٔ حاضر و در مورد پراکندگی پروتون با اتم هیدروژن در انرژی‌های میانی و بالا و در کانال تهییج انجام گردیده و در آن از اختلاف فاز بین دامنه‌های مرتبهٔ اول الکترونی و مرتبهٔ اول هسته‌ای صحبت شده مشاهده کرد. همان‌طورکه از این مقاله مشخص است در زوایای کوچک پراکندگی اختلاف فاز دامنه‌های مرتبهٔ اول الکترونی و هسته‌ای مخرب بوده و با افزایش زاویهٔ پراکندگی اختلاف فاز این دو دامنه به‌صورت سازنده ظاهر می‌گردد.

این امر باعث کاهش سطح مقطع دیفرانسیلی در زوایای کوچک‌تر و افزایش آن در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی شده و نتایج سطح مقطع کل را تصحیح می‌نماید. در منحنی اختلاف فاز بین دو دامنهٔ مرتبه اول الکترونی و هسته‌ای این مقاله دیده می‌شود که با افزایش انرژی، مخرب بودن فازها در زوایای کوچک‌تر پراکندگی اتفاق می‌افتد و به همین ترتیب سازنده بودن فازها هم در منحنی مربوط به اختلاف فاز این دو دامنه در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته از زوایای کوچک‌تر پراکندگی شروع می‌گردد. این امر با الگوهای تصحیحی که پیش‌بینی می‌شد همخوانی کامل دارد. بنابراین می‌توان ادعا نمود که با وارد نمودن جملهٔ مرتبهٔ اول هسته‌ای و به‌عبارتی قرار دادن عملگر گذار به جای پتانسیل برهم‌کنش در محاسبات، نتایج حاصل شده در خصوص سطح مقطع دیفرانسیلی و کل به نتایج نظریه‌های آورده شده در مقالهٔ حاضر بسیار نزدیک شده هر چند از طرفی محاسبات دامنه‌ها را پیچیده خواهد نمود.

مراجع

1. M Charlton and J Humberston, "*Positron Physics*" Cambridge University Press (2001).
2. D G Seely *et al.*, *Phys. Rev.* A **45** (1992) 1287.
3. I Bray and A T Stelbovics, *Phys. Rev.* A **46** (1992) 6995.
4. H S W Massey and R A Smith, *Proc. Roy. Soc.* A **142** (1933) 142.
5. R Balian, P Encrenaz, and J Lequeux, "*Atomic and molecular physics and the interstellar matter*", North-Holland, Amsterdam (1974).
6. D R Bates and G W Griffing, *Proc. Roy. Soc. London. Ser.* **66** (1953) 961.
7. H C Brinkman and H A Kramers, *Proc. Acad. Sci.* **33** (1930) 973.
8. J D Jackson and H Schiff, *Phys. Rev.* **89** (1953) 359.
9. D F Crothers and R McCarrol, *Proc. Roy. Soc. London. Ser.* **86** (1965) 753.
10. R McCarrol and A Salin, *Proc. Phys. Soc.* **90** (1967) 63.
11. M R Flannery, *J. Phys.* B **2** (1969) 1044.
12. S Saxena, G P Gupta, and K C Mathur, *J. Phys.* B **17** (1984) 3743.
13. Dz Belkic and R K Janev, *J. Phys.* B **6** (1973) 1020.
14. D Salzman, "*Atomic physics in hot plasmas*", Oxford University Press (1998).
15. R Fathi, M A Bolorizadeh, F Shojaei Akbarabadi, and M J Brunger, *J. Phys.* B **45** (2012) 205201.
16. L Lugosi, B Paripas, I K Gyemant, and K Tokesi, *Radiation Physics and Chemistry Journal*. **68** (2003) 100.
17. J Mitroy, *Aust. J. Phys.* **46** (1993) 751.
18. J Fiol and R E Olson, *J. Phys.* B **35** (2002) 1173.
19. S Alston, *Phys. Rev.* A **42** (1989) 331.
20. C J Joachain, "*Quantum collision theory*", North-Holand, Amsterdam (1975).
21. H R Walters, *J. Phys.* B **21** (1988) 1893.
22. K Ratnavelu, J Mitory, and A T Stelbovics, *J. Phys.* B **29** (1996) 2775.
23. R Fathi, E Ghanbari-Adivi, M A Bolorizadeh, F Shojaei, and M G Brunger, *J. Phys.* B **42** (2009) 125203.