

## به کارگیری تقریب مرتبه اول بورن- فدیف در کانال یونش

سعیده امیری بیدوری و رضا فتحی

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

پست الکترونیکی: rfathi@uk.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۱۲/۱۲؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۰۴/۲۰)

### چکیده

در کار حاضر سطح مقطع‌های جزئی سه‌گانه و دوگانه یونش اتم هیدروژن در برخورد با پروتون در محدوده انرژی‌های میانی و بالا محاسبه شده است. پتانسیل‌های برهم‌کنش به صورت کولنی در نظر گرفته شده و محاسبات سطح مقطع جزئی سه‌گانه با استفاده از تقریب مرتبه اول بورن- فدیف به صورت کاملاً تحلیلی انجام شده است. سطح مقطع‌های جزئی سه‌گانه در انرژی‌های فرودی و اندازه حرکت‌های انتقالی مختلف با یکدیگر و با نتایج تقریب مرتبه اول بورن مقایسه شده است. در نهایت نتایج سطح مقطع جزئی دوگانه به دست آمده در این تقریب با نتایج تجربی و سایر نظریه‌های در دسترس مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: یونش، تقریب بورن- فدیف، سطح مقطع جزئی سه‌گانه (کامل)

### ۱. معرفی

مربوط به فرایند برخورد هستند، نقش مهمی را در فهم دینامیک برخوردهای یون- اتم و یون- مولکول در این کانال ایفا می‌کند. روش‌های تجربی [۵-۹] و نظری [۱۰-۱۲] فراوانی برای اندازه‌گیری و محاسبه سطح مقطع‌های جزئی سه‌گانه و دوگانه برای هدف‌ها و پرتابه‌های مختلف ارائه شده است. به عنوان مثال میکروسکوپ‌های واکنشی که اخیراً توسعه پیدا کرده‌اند، به عنوان طیف‌سنج اندازه حرکت یون بازگشتی هدف شناخته می‌شوند و به فرد امکان می‌دهند توزیع سه بعدی حرکت الکترون‌های یونیده شده در طول برخورد را همزمان با یون باقیمانده برای به دست آوردن داده‌های کامل سینماتیکی با دقت بالا اندازه‌گیری کند.

در سال‌های اخیر بررسی تجربی و نظری یونش اتم‌ها و مولکول‌ها در برخورد یون‌های سریع به علت کاربرد یون‌ها و الکترون‌های حاصل در علوم مختلف به ویژه شاخه‌های مختلف فیزیک اهمیت ویژه‌ای پیدا کرده است. به عنوان مثال می‌توان به کاربردهای فرایند یونش در برخورد یون‌های سریع با اتم‌ها در فیزیک نجومی [۱]، پلاسما [۲] و همچنین زمینه‌های کاربردی مانند پرتو درمانی توسط هادرون‌ها [۳] و طراحی راکتورهای هم‌جوشی [۴] اشاره کرد. در این میان مطالعه سطح مقطع‌های سه‌گانه یا سطح مقطع‌های کامل که حاوی دقیق‌ترین اطلاعات

عملگر گذار  $T_{ij}$ ، کمیت  $A_{FWL}$  که دامنه پراکندگی فدیف-واتسون-لاولیس می‌باشد جایگزین خواهد شد.

سری پراکندگی فدیف - واتسون-لاولیس برای عملگر گذار متناظر با کانال یونش به صورت

$$T = T_{PT} + T_{Pe} + T_{Te}G_0^+T_{PT} + T_{Te}G_0^+T_{Pe} + \dots, \quad (3)$$

است.  $T_{ij}$  عملگر گذار دو جسمی مربوط به برهم‌کنش دو جسم  $i$  و  $j$  است. اگر پتانسیل برهم‌کنش این دو ذره با  $V_{ij}$  نمایش داده شود. عملگر گذار دو جسمی با عبارت

$$T_{ij} = V_{ij} + V_{ij}G_0^+T_{ij}, \quad (4)$$

تعریف می‌شود.  $G_0^+$  عملگر گرین انتشار آزاد کل دستگاه سده‌ای است [۱۷ و ۱۸]. در تقریب مرتبه اول، عملگر گذار فدیف-واتسون-لاولیس به صورت

$$T = V_{PT} + V_{Pe} + V_{PT}G_0^+T_{PT} + V_{Pe}G_0^+T_{Pe}, \quad (5)$$

ظاهر می‌شود. در محاسبات این مقاله عملگرهای گذار دو جسمی در رابطه (۵) با جمله اول عملگر گذار یعنی پتانسیل برهم‌کنش جایگزین شده‌اند که تقریب مرتبه اول بورن-فدیف نامیده می‌شود. در این تقریب و برای یونش اتم هیدروژن دامنه پراکندگی از رابطه

$$A_{FWL} = \left\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{R}} \left| T \right| \varphi_i(\vec{r}) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{R}} \right\rangle, \quad (6)$$

محاسبه می‌شود.  $\vec{R}$  فاصله پرتابه تا هسته هدف،  $\varphi_i$  تابع موج حالت پایه اتم هیدروژن و  $\psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r})$  تابع موج الکترون آزاد شده است که به صورت موج کولنی

$$\psi_{k_e}^{(-)}(\vec{r}) = N(k_e) e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} F_1(i\alpha, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \cdot \vec{r})), \quad (7)$$

$$N(k_e) = e^{-\frac{\pi}{\gamma}} \Gamma(1-i\alpha), \quad \alpha = -\frac{1}{k_e}, \quad (8)$$

در نظر گرفته می‌شود. با محاسبه دامنه پراکندگی، سطح مقطع سه‌گانه (کامل) از رابطه (۲) محاسبه شده و با انتگرال‌گیری بر روی زوایای پرتابه یا الکترون خارج شده از رابطه (۲) به صورت

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_e dE_e} = \int \frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e dE_e} d\Omega_s, \quad (9)$$

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_s dE_e} = \int \frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e dE_e} d\Omega_e, \quad (10)$$

در نظریه برخورد یون-اتم نیز پیشرفت چشمگیری حاصل شده است و روش‌های سه‌جسمی و چهارجسمی بسیاری از جمله  $WP\ CCC$  [۱۳]،  $CDW-EIS$  [۱۴] و روش‌های مبنی بر تقریب بورن [۱۵ و ۱۶] برای بررسی فرایند یونش توسعه یافته‌اند که همخوانی قابل قبولی را با نتایج تجربی نشان می‌دهند. با این وجود زمانی که صحبت از سطح مقطع‌های جزئی سه‌گانه می‌شود حتی پیچیده‌ترین رویکردها نیز برای برخی از نواحی انرژی با چالش‌های مختلفی رو به رو هستند.

در کار حاضر سطح مقطع‌های جزئی سه‌گانه و دوگانه در برخورد سه‌جسمی پروتون با اتم هیدروژن در نواحی انرژی میانی و بالا به روش کاملاً کوانتومی محاسبه شده است. به این منظور فرایند یونش به روش اختلالی تعمیم یافته فدیف-واتسون-لاولیس فرمول‌بندی شده و تقریب مرتبه اول آن برای عملگر گذار استفاده شده است. در نهایت عملگرهای گذار دو جسمی در تقریب مرتبه اول با پتانسیل‌های برهم‌کنش جایگزین شده است. محاسبات سطح مقطع سه‌گانه به صورت کاملاً تحلیلی انجام و با انتگرال‌گیری عددی، نتایج سطح مقطع دوگانه حاصل شده است. نتایج حاصل با نتایج تجربی و نظری در دسترس مقایسه شده است.

در کل محاسبات از یکای اتمی استفاده شده و نتایج ارائه شده در چارچوب آزمایشگاه می‌باشند.

## ۲. مدل نظری

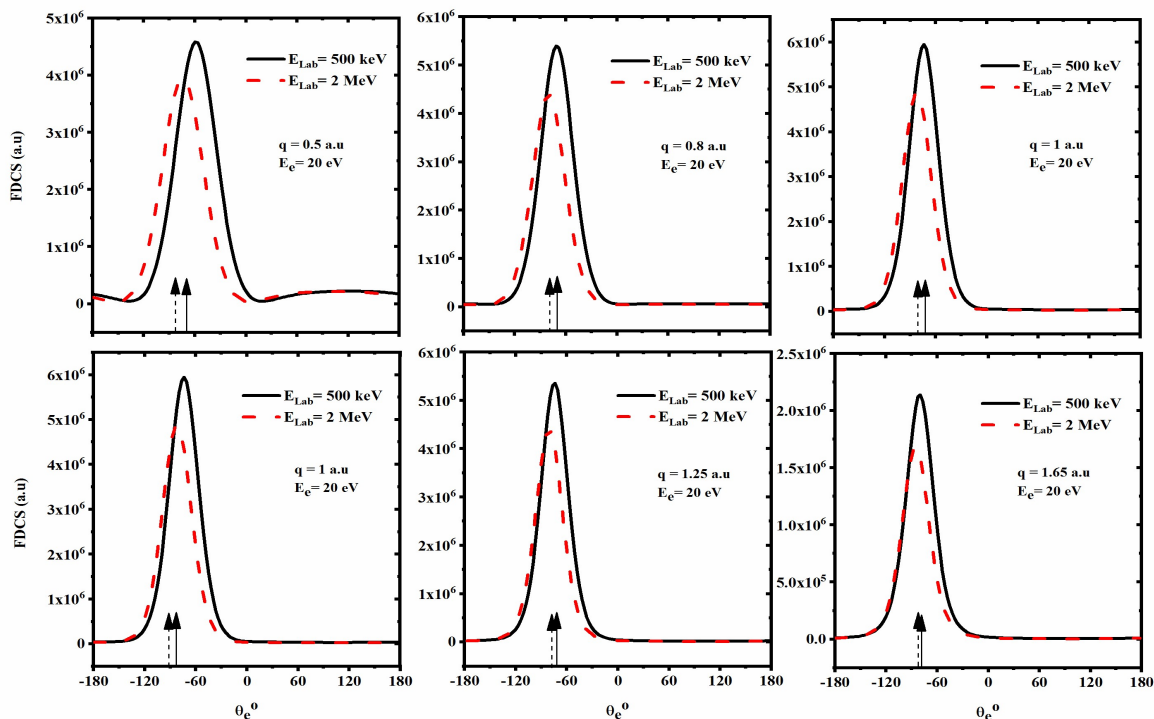
فرایند یونش در برخورد سه‌جسمی به صورت

$$p + (T + e) \rightarrow p + T + e, \quad (1)$$

در نظر گرفته می‌شود. سطح مقطع جزئی سه‌گانه (کامل) در چنین فرایندی از رابطه

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e dE_e} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{if}|^2, \quad (2)$$

حاصل می‌شود.  $\vec{k}_e$  اندازه حرکت الکترون یونیده شده  $(E_e = \frac{K_e}{\gamma})$ ،  $\vec{k}_i$  اندازه حرکت اولیه و  $\vec{k}_s$  اندازه حرکت نهایی پرتابه است. در روش فدیف-واتسون-لاولیس به جای



شکل ۱. نتایج سطح مقطع جزئی سه گانه (کامل) تقریب بورن- فدیف در صفحه پراکندگی ( $\phi_e = 0^\circ$ ) برای انرژی‌های فرودی  $500 \text{ keV}$  و  $2 \text{ MeV}$ ، انرژی الکترون یونیده شده  $E_e = 20 \text{ eV}$  و اندازه حرکت‌های انتقال یافته  $q = 0.5, 0.8, 1, 1.25, 1.65 \text{ a.u.}$

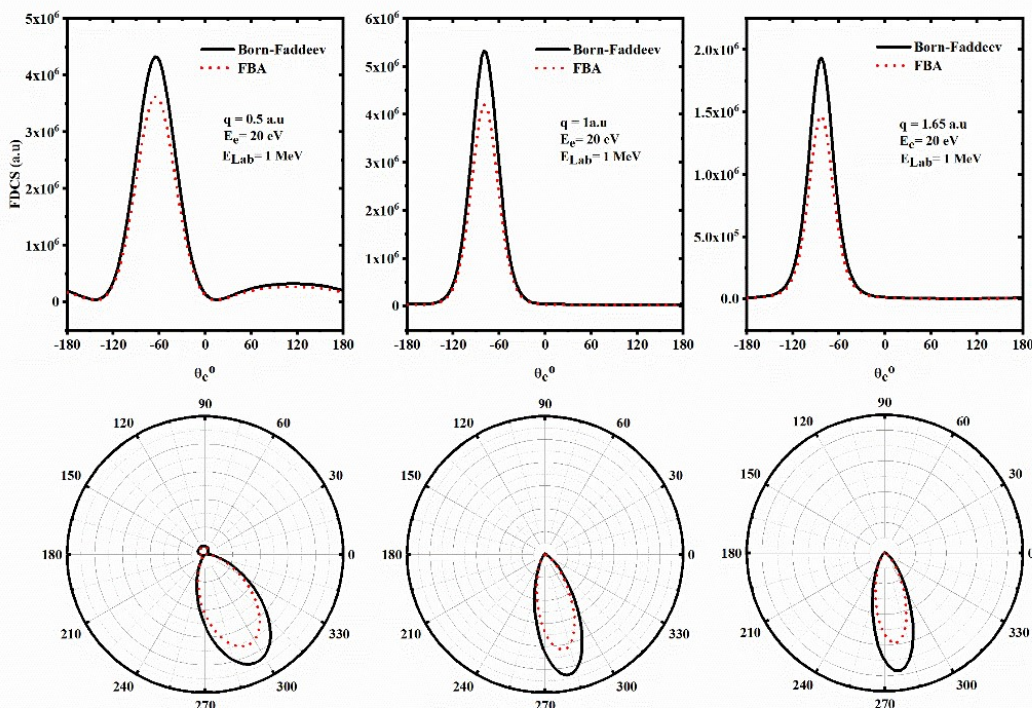
زاویه  $\phi_e$  نسبت به محور X ها از  $-180^\circ$  تا  $+180^\circ$  درجه در نظر گرفته شده است.

در شکل ۱ نمودار سطح مقطع کامل (سه‌گانه) حاصل از کار حاضر برای پروتون‌هایی با انرژی فرودی  $500 \text{ keV}$  و  $2 \text{ MeV}$  و اندازه حرکت‌های انتقال یافته مختلف با یکدیگر مقایسه شده‌اند. انرژی الکترون یونیده شده  $E_e = 20 \text{ eV}$  در نظر گرفته شده است. همان طور که مشاهده می‌شود برای یک انرژی الکترون یونیده شده ثابت با افزایش اندازه حرکت انتقالی از  $q = 0.5 \text{ a.u.}$  تا  $q = 1 \text{ a.u.}$  اندازه قله‌های رو به جلو افزایش یافته و با افزایش بیشتر اندازه حرکت انتقال یافته از  $q = 1 \text{ a.u.}$  تا  $q = 1.65 \text{ a.u.}$  قله‌های رو به جلو کاهش می‌یابد؛ در حالی که قله‌های پس‌زنی همواره با افزایش اندازه حرکت انتقال یافته کاهش پیدا کرده و در نهایت حذف می‌شوند. همچنین اگر انرژی الکترون یونیده شده ثابت باشد، با افزایش انرژی پرتابه سطح مقطع سه‌گانه کاهش می‌یابد. از طرف دیگر با

سطح مقطع‌های جزئی دوگانه محاسبه می‌شوند.

### ۳. بحث و نتیجه‌گیری

در این بخش نتایج سطح مقطع‌های جزئی سه‌گانه (کامل) و دوگانه حاصل از تقریب مرتبه اول بورن- فدیف برای یونش اتم هیدروژن در برخورد با پروتون با نتایج تجربی و نظری در دسترس مقایسه شده است. رفتار سطح مقطع سه‌گانه در مقادیر مختلف اندازه حرکت انتقالی و انرژی الکترون یونیده شده در سه صفحه پراکندگی، عمودی و سمتی مورد بررسی قرار گرفته است. صفحه سمتی ( $\theta_e = 90^\circ$ ) صفحه عمود بر اندازه حرکت پرتابه فرودی تعریف می‌شود در حالی که صفحه عمودی ( $\phi_e = 90^\circ$ ) به وسیله اندازه حرکت اولیه پرتابه و بردار یک عمود بر سطح صفحه پراکندگی تعریف می‌شود. تغییرات زاویه الکترون یونیده شده نسبت به راستای فرودی پرتابه از  $-180^\circ$  تا  $+180^\circ$  درجه در نظر گرفته شده و برای نتایج صفحه سمتی،



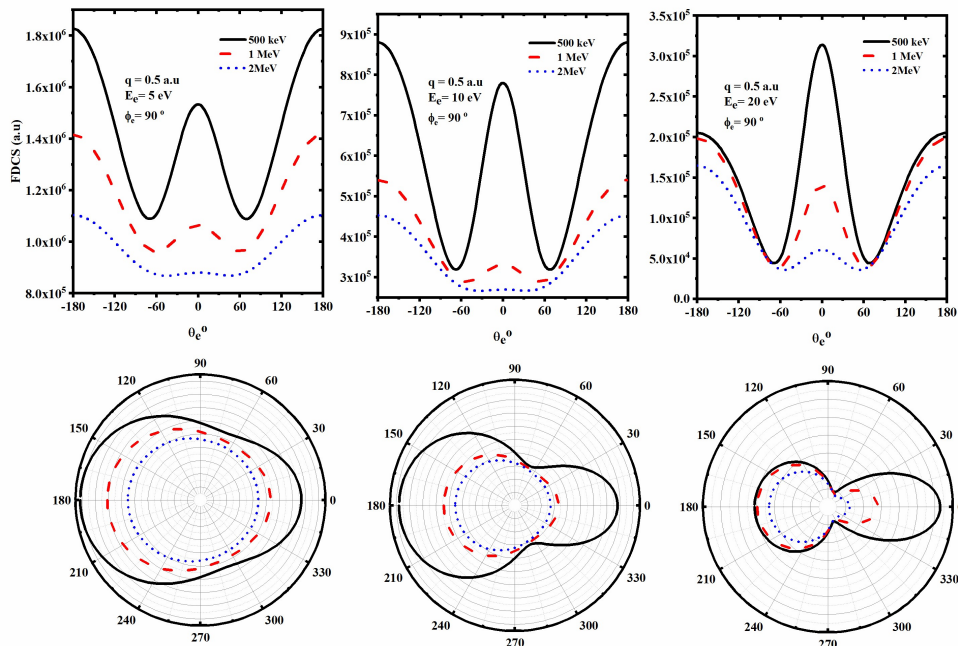
شکل ۲. مقایسه نتایج سطح مقطع کامل با تقریب مرتبه اول بورن در صفحه پراکندگی ( $\phi_e = 0^\circ$ ). انرژی فرودی  $E_{Lab} = 1 \text{ MeV}$ ، انرژی الکترون یونیده شده  $E_e = 20 \text{ eV}$  و اندازه حرکت‌های انتقال یافته  $q = 0.5, 1, 1.65 \text{ a.u.}$

پیش‌بینی کار حاضر برای سطح مقطع کامل در صفحه سمتی را نشان می‌دهد. در این صفحه و برای انرژی‌های پروتون فرودی  $1 \text{ MeV}$ ،  $2 \text{ MeV}$ ،  $500 \text{ keV}$  با اندازه حرکت انتقال یافته ثابت و برابر با  $q = 0.5 \text{ a.u.}$  مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی الکترون یونیده شده و افزایش انرژی پرتابه، موقعیت قله‌های رو به جلو و پس‌زنی ثابت بوده و مقادیر آنها کاهش می‌یابد. متأسفانه نتایج نظری و تجربی برای سطح مقطع سه‌گانه برخورد پروتون با اتم هیدروژن در ناحیه انرژی مورد بحث در دسترس نیست و پیچیده بودن جزئیات دینامیک برخورد در فرایند یونش بحث در خصوص نتایج را سخت می‌کند. در کار حاضر مانند سایر مقالات اخیر، نتایج پیش‌بینی شده برای سطح مقطع سه‌گانه در صفحات مختلف گزارش شده است [۱۳].

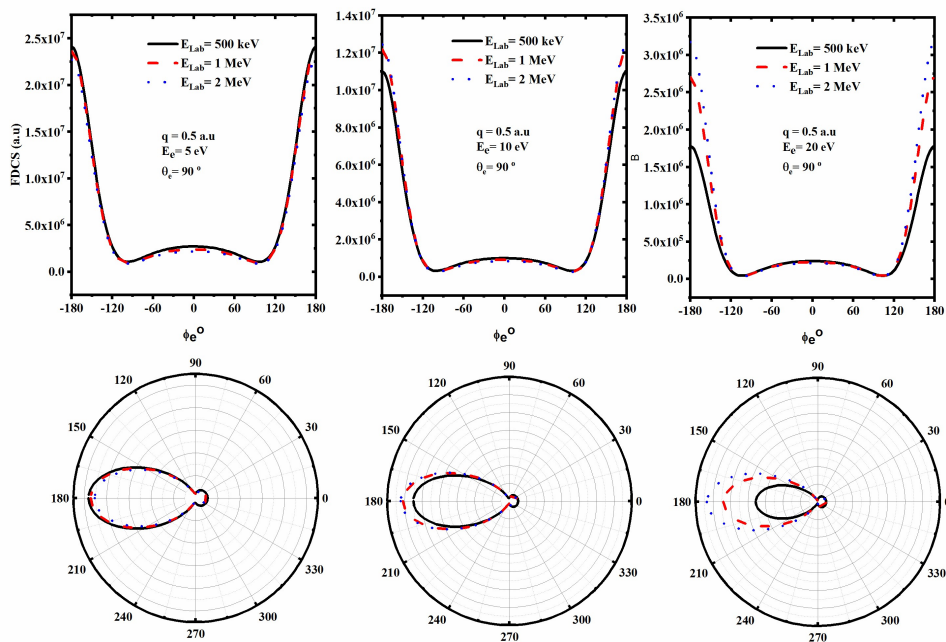
نتایج سطح مقطع دوگانه برحسب زاویه پراکندگی در انرژی‌های الکترون یونیده شده  $16/4$ ،  $26/4 \text{ eV}$  که با

افزایش اندازه حرکت انتقال یافته، وابستگی موقعیت قله‌های رو به جلو به انرژی پرتابه فرودی کمتر می‌شود. در شکل ۲ نتایج به دست آمده با تقریب مرتبه اول بورن برای پروتون‌های با انرژی فرودی  $1 \text{ MeV}$ ، انرژی الکترون یونیده شده  $E_e = 20 \text{ eV}$  و اندازه حرکت‌های انتقال یافته  $q = 0.5, 1, 1.65 \text{ a.u.}$  مقایسه شده است. با افزایش اندازه حرکت انتقال یافته، موقعیت قله‌های رو به جلو تقریباً ثابت مانده و اندازه آنها کاهش می‌یابد. قله‌های پس‌زنی ظاهر شده، که می‌تواند ناشی از برهم‌کنش هسته با پرتابه باشد، در انرژی مورد بحث با افزایش اندازه حرکت انتقال یافته حذف می‌شود.

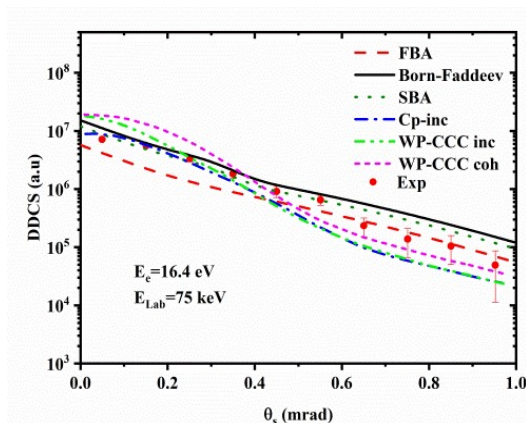
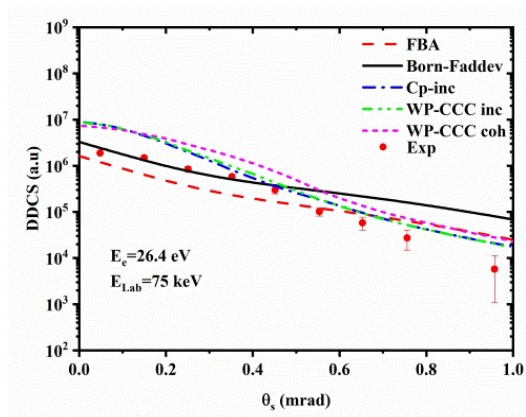
پیش‌بینی کار حاضر برای سطح مقطع سه‌گانه (کامل) در صفحه عمودی  $\phi_e = 90^\circ$  در شکل ۳ ارائه شده است. مقادیر سطح مقطع سه‌گانه با افزایش انرژی پرتابه و افزایش انرژی الکترون یونیده شده کاهش می‌یابد. اندازه حرکت انتقال یافته در تمام موارد ثابت و یکسان فرض شده است. شکل ۴



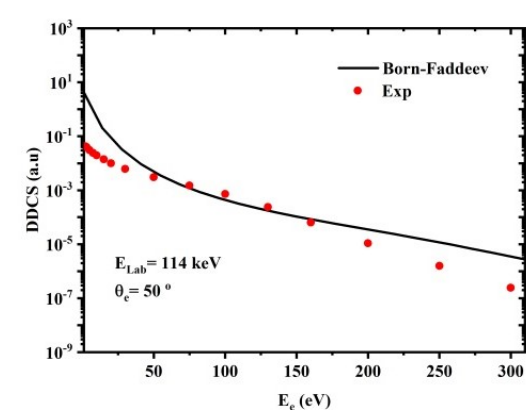
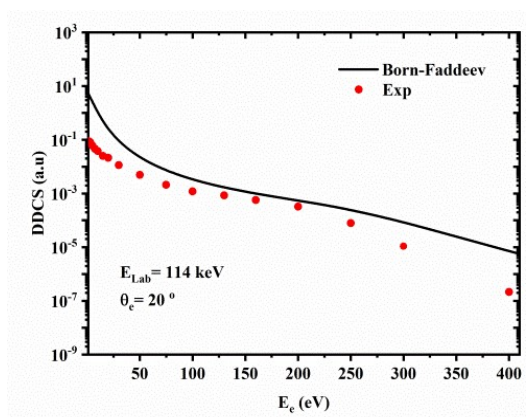
شکل ۳. مقایسه نتایج سطح مقطع کامل برای انرژی‌های فرودی  $500\text{ keV}$ ،  $1\text{ MeV}$ ،  $2\text{ MeV}$  در صفحه عمودی  $\phi_e = 90^\circ$  برای انرژی الکترون یونیده شده  $E_e = 5, 10, 20\text{ eV}$  و اندازه حرکت انتقال یافته  $q = 0.5\text{ a.u.}$ .



شکل ۴. مقایسه نتایج سطح مقطع کامل برای انرژی‌های فرودی  $500\text{ keV}$ ،  $1\text{ MeV}$ ،  $2\text{ MeV}$  در صفحه سمتی  $\theta_e = 90^\circ$  برای انرژی الکترون یونیده شده  $E_e = 5, 10, 20\text{ eV}$  و اندازه حرکت انتقال یافته  $q = 0.5\text{ a.u.}$



شکل ۵. مقایسه نتایج سطح مقطع دوگانه تقریب بورن-فدیف با نتایج تجربی [۷] و نظری [۱۹]. انرژی پروتون فرودی  $E_{Lab} = 75 \text{ keV}$  و انرژی‌های الکترون‌های یونیده شده  $E_e = 16.4, 26.4 \text{ eV}$ .



شکل ۶. مقایسه نتایج سطح مقطع دوگانه تقریب بورن-فدیف با نتایج تجربی [۲۰]. انرژی پروتون فرودی  $E_{Lab} = 114 \text{ keV}$  و زاویه الکترون یونیده شده  $\theta_e = 20^\circ, 50^\circ$ .

بالا، انتظار می‌رود همخوانی خوب مشاهده شده در زوایای کوچک پراکندگی با افزایش انرژی پرتابه از محدوده انرژی‌های میانی به انرژی‌های بالا در زوایای بزرگ‌تر نیز مشاهده شود. در نهایت مقایسه سطح مقطع دوگانه در زوایای الکترون یونیده شده  $\theta_e = 20^\circ, 50^\circ$  برحسب انرژی الکترون یونیده شده در شکل ۶ با نتایج تجربی [۲۰] ارائه شده است. انرژی پروتون‌های فرودی  $114 \text{ keV}$  است و انتظار می‌رود در صورت وجود نتایج برای انرژی‌های فرودی بالاتر همخوانی مشاهده شده بیشتر باشد. متأسفانه نتایج تجربی و نظری برای فرایند مورد نظر در محدوده انرژی‌های بالا در دسترس نیست.

انتگرال‌گیری روی زاویه فضایی الکترون یونیده شده حاصل می‌شود در شکل ۵ با نتایج تجربی [۷] و نظری [۱۹] مقایسه شده است. انرژی پروتون پرتابه  $75 \text{ keV}$  و در ناحیه انرژی‌های میانی است. همخوانی بسیار بهتر نتایج تقریب مرتبه اول بورن-فدیف نسبت به نتایج تقریب مرتبه اول بورن کاملاً مشهود است. حضور جملات برهم‌کنش غیر مستقیم الکترون در تقریب مرتبه اول بورن-فدیف، که قسمتی از جملات تقریب مرتبه دوم بورن را پوشش می‌دهد، نزدیک شدن نتایج کار حاضر به نتایج تقریب مرتبه دوم بورن در انرژی  $16.4 \text{ eV}$  و انرژی فرودی  $75 \text{ keV}$  را نتیجه می‌دهد. با توجه به اختلالی بودن روش به‌کار گرفته شده و مناسب بودن آن برای انرژی‌های

## مراجع

14. R T Pedlow, S F. C O'Rourke, and D S F Crothers, *Phys. Rev. A* **72** (2005) 062719.
۱۵. س امیری بیدوری و ر فتحی، ب چابکی، مجله پژوهش فیزیک ایران **۱۹**، ۳ (۱۳۹۸) ۵۵۹.
15. S Amiri Bidveri, R Fathi, B Chaboki, *Iran, J. Phys, Res.* **19**, 3 (2019) 559.
16. S Amiri Bidvari and R Fathi, *Eur. Phys. J. D* **74**, 1 (2020) 55.
17. S. Alston, *Phys. Rev. A* **42** (1989) 331.
۱۸. ر فتحی، مجله پژوهش فیزیک ایران **۱۴**، ۲ (۱۳۹۳) ۱۲۳.
18. R Fathi, *Iran, J. Phys, Res.* **14**, 3 (2014) 123.
19. I B Abdurakhmanov, J J Bailey, A S Kadyrov, and I Bray, *Phys. Rev. A* **97** (2018) 032707.
20. G W Kerby et al., *Phys. Rev. A* **51** (1995) 2256.
1. D Tselikhovich, C M. Hirata and, K Heng, *Mon. Not. R. Astron. Soc* **422** (2012) 2357.
2. S Sen, P Mandal, P K Mukherjee, *Eur. Phys. J. D* **62** (2011) 379.
3. G De Lellis et al., *Nuclear Physics A* **853** (2011) 124.
4. A Simonin, *New J. Phys* **18** (2016) 125005.
5. J Ullrich and et al., *Rep. Prog. Phys* **66** (2003) 1463.
6. M Schulz et al., *Nature (London)* **422** (2003) 48.
7. A Laforge et al., *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 053201.
8. H Gassert et al., *Phys. Rev. Lett.* **116** (2016) 073201.
9. M Schulz et al., *Phys. Rev. A* **81** (2010) 052705.
10. P D Fainstein and L Gulyas, *J Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **38** (2005) 317.
11. Y H Duan, S Y Sun and X F Jia, *EPL* **110** (2015) 13001.
12. O Chuluunbaatar et al., *Phys. Rev. A* **96** (2017) 042716.
13. I B Aburakhmanov et al., *Phys. Rev. A* **100** (2019) 062708.