

## مطالعه نظری یونش یگانه اتم هلیوم در برخورد با یون‌های کربن برهنه

رضا فتحی و سعیده امیری بیدوری

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

پست الکترونیکی: rfathi@uk.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۱۱/۲۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۰۱/۱۴)

### چکیده:

در کار حاضر یونش یگانه اتم هلیوم از حالت پایه و اولین حالت برانگیخته در برخورد با یون‌های کربن برهنه ( $C^{6+}$ ) با انرژی ۱۰۰ مگا الکترون ولت بررسی شده است. سطح مقطع جزئی کامل با استفاده از روش اختلالی موج واپیچیده پیوسته چهارجسمی در حالت پسین محاسبه شده است. اثرات همبستگی استاتیکی الکترون‌ها با انتخاب تابع موج سیلورمن برای حالت پایه اتم هلیوم وارد مسئله شده است. نتایج سطح مقطع جزئی کامل در صفحات سمتی مختلف برای الکترون‌های یونیزه شده با انرژی ۶/۵ الکترون ولت و اندازه حرکت انتقال یافته ۰.۷۵ در واحد اتمی با نتایج تجربی و نتایج نظری مبتنی بر فرمول‌بندی سه جسمی مقایسه شده است. همچنین تغییرات سطح مقطع دیفرانسیلی کامل در صفحه پراکندگی برای الکترون‌های یونیزه شده با انرژی‌ها و اندازه حرکت‌های انتقال یافته متفاوت در مقایسه با نتایج تجربی و نظری مورد مطالعه قرار گرفته است.

**واژه‌های کلیدی:** منبع تبخیر الکترون، پرتو، اپتیک، شبیه‌سازی

### ۱. مقدمه

در دهه‌های اخیر پیشرفت چشمگیری در تحقیقات آزمایشگاهی و اندازه‌گیری سطح مقطع‌های جزئی فرایندهای پراکندگی به ویژه یونش یگانه و دوگانه هدف‌های اتمی به وسیله یون‌های سریع اتفاق افتاده است [۱-۶]. از این رو توجه بسیاری از متخصصان آزمایشگاهی و نظریه پردازان به این فرایند جلب شده است. مطالعات تجربی و نظری بسیاری برای بررسی دینامیک یونش اتم هیدروژن به عنوان یک فرایند سه جسمی ارائه شده است [۷-۱۲]. از طرف دیگر تعیین دینامیک یونش اتم هلیوم به عنوان ساده‌ترین اتم چندالکترونی بسیار حائز اهمیت است. در حقیقت مطالعه سامانه‌های برخورد ساده این مزیت را دارد که می‌توان به صورت تجربی اطلاعات سینماتیکی کامل را با دقت

بالاتری در مورد فرایندها به دست آورد. در مورد فرایند یونش یگانه امروزه سطح مقطع‌های دیفرانسیلی کامل که همزمان نتایج را به ازای زوایای پراکندگی و انرژی‌های مختلف الکترون یونیزه شده و اطلاعات مربوط به پرتابه از جمله زاویه پراکندگی ارائه می‌دهد، در تعیین دینامیک برخورد فرایند یونش نقش بسزایی دارد. تفسیر سطح مقطع‌های دیفرانسیلی کامل یک چالش واقعی برای مدل‌سازی نظری ارائه می‌دهد. در سال‌های اخیر بحث‌های زیادی در مورد نقش برهم‌کنش بین هسته‌ای یا تأثیرات همدوسی پرتابه برای یونش اتم هلیوم انجام شده است [۱۳-۲۰].

در حالت کلی سطح مقطع دیفرانسیلی کامل، دو قله مجزا نشان می‌دهد که به قله‌های دوتایی<sup>۱</sup> و پس‌زنی معروف هستند. قله‌های دوتایی که از برهم‌کنش دوتایی پرتابه با الکترون یونیزه شده

<sup>۱</sup> Binary

می‌شود که می‌توان آن را به برهم‌کنش سه گانه پرتابه با الکترون یونیزه شده و سپس برهم‌کنش پرتابه با هسته باقی‌مانده نسبت داد. نکته قابل توجه در تمام مقالات این است که دینامیک کامل فرایند یونش یگانه به ویژه در برخورد اتم‌ها با یون‌های سنگین مشخص نیست و لازم است بررسی‌های نظری و تجربی بیشتری برای درک آن انجام شود.

از طرف دیگر با در نظر گرفتن اتم هلیوم به عنوان ساده‌ترین اتم چندالکترونی با دو الکترون فعال بررسی نقش فرایندهای چهارجسمی از جمله برهم‌کنش‌های الکترونی به صورت استاتیکی و دینامیکی نیز مطرح می‌شود که در مورد فرایند یونش در مقالات [۲۴-۲۶] مورد بررسی قرار گرفته است. از طرف دیگر نشان داده شده است که نقش اثرات و برهم‌کنش‌های چهارجسمی در مورد سطح مقطع دیفرانسیلی دوگانه نیز حائز اهمیت است. اهمیت همبستگی‌های استاتیکی با در نظر گرفتن توابع موج متفاوت در مرجع [۲۵] و توسط نویسندگان مقاله حاضر با استفاده از روش  $CDW - 4B$ <sup>۱</sup> در حالت پیشین<sup>۲</sup> بررسی و نشان داده شد که در محدوده انرژی‌های بالا و در سطح مقطع‌های سه گانه این موضوع در تعیین محل و ارتفاع قله‌های دوتایی و پس‌زنی حائز اهمیت است. در کار حاضر یونش یگانه اتم هلیوم در برخورد با یون‌های  $C^{6+}$  با انرژی ۱۰۰ مگا الکترون ولت بررسی شده است. سطح مقطع دیفرانسیلی کامل با استفاده از حالت پسین<sup>۳</sup> روش  $CDW - 4B$  محاسبه شده است [۲۶]. همبستگی استاتیکی با استفاده از تابع موج دوپارامتری سیلورمن<sup>۴</sup> در نظر گرفته شده است. نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل به ازای انرژی الکترون یونیزه شده و اندازه حرکت‌های انتقال یافته مختلف با نتایج نظری و تجربی در دسترس مقایسه شده است. از طرف دیگر نحوه توزیع زاویه‌ای الکترون یونیزه شده در صفحات مختلف سمتی به ازای انرژی و اندازه حرکت انتقال یافته ثابت مورد بررسی قرار گرفته است و با نتایج نظریه سه جسمی و نتایج تجربی در دسترس مقایسه شده است.

حاصل می‌شود، به طور معمول در راستای اندازه حرکت انتقال یافته قرار می‌گیرند. قله‌های پس‌زنی که از برهم‌کنش سه تایی پرتابه با الکترون و سپس برهم‌کنش الکترون یونیزه شده با هسته حاصل می‌شوند در خلاف جهت اندازه حرکت انتقال یافته خواهند بود. در سال ۲۰۱۴ گالیاس و همکاران نقش برهم‌کنش بین هسته‌ای و پتانسیل پلاریزاسیون را در برخورد پروتون و  $O^{8+}$  با اتم لیتیوم در حالت‌های برانگیخته  $2s$  و  $2p$  مورد بررسی قرار دادند [۲۱]. به این منظور از روش اختلالی سه جسمی  $CDW - EIS$ <sup>۱</sup> استفاده شد و نقش برهم‌کنش بین هسته‌ای با توجه به پایین بودن انرژی پرتابه  $O^{8+}$  و پارامترهای موجود در مسئله به گونه‌ای متفاوت از رهیافت‌های قبلی که به طور معمول به شکل کلاسیکی و با انتگرال‌گیری روی پارامتر برخورد با یک فاز ساده انجام می‌شد، بررسی شد. در این رهیافت از مدل الکترون فعال استفاده شده بود و نقش الکترون‌های غیر فعال در قالب یک پتانسیل میانگین و پتانسیل پلاریزاسیون در پتانسیل برهم‌کنش بین هسته‌ای گنجانده شده بود. از نتایج دریافت شد که نقش برهم‌کنش پلاریزاسیون و در نظر گرفتن پتانسیل بین هسته‌ای به این نحو برای پرتابه‌های مثبت سنگین در انرژی‌های نزدیک ناحیه میانی بسیار حائز اهمیت است. همچنین مشاهده شد که در چنین محدوده انرژی برهم‌کنش‌های پلاریزاسیون برای یونش اتم لیتیوم از ترازهای متفاوت منجر به مشاهده قله‌های اضافه‌ای در صفحه عمود بر صفحه پراکندگی خواهد شد که نشان از توزیع متفاوت الکترون یونیزه شده در فضای سه بعدی خواهد بود.

از طرف دیگر در مقالاتی از جمله [۲۲ و ۲۳] انرژی یون کربن برهنه ( $C^{6+}$ ) به عنوان پرتابه ۲ مگا الکترون ولت در نظر گرفته شده است. نتایج برای انرژی مورد نظر الکترون یونیزه شده نشان داد در این ناحیه از انرژی برای پرتابه  $C^{6+}$  قله پس‌زنی مشاهده نمی‌شود و قله دوتایی با انحرافی نسبت به جهت اندازه حرکت انتقال یافته قابل مشاهده است و قله دیگری در زاویه‌ای که منفی زاویه اندازه حرکت انتقال یافته است مشاهده

<sup>1</sup> Four Body- Continuum Distorted Wave

<sup>2</sup> Prior

<sup>3</sup> Post

<sup>4</sup> Silverman

۲. نظریه

سطح مقطع دیفرانسیلی کامل یونش یگانه اتم هلیوم در برخورد با یونهای برهنه از رابطه

$$\frac{d^2\sigma}{dE_e d\Omega_e d\Omega_s} = \frac{\mu_i k_e}{4\pi^2} |T_{if}^+|^2, \quad (1)$$

حاصل می شود. ماتریس گذار حالت پسین در روش موج واپیچیده پیوسته است که با توجه به تقریب مرتبه اول سری داد و گیردر از رابطه

$$T_{if}^+ = \langle \psi_f^- | U_f | \chi_i^+ \rangle, \quad (2)$$

محاسبه می شود.  $\mu_i = \frac{M_p(M_T + 2)}{M_p + M_T + 2}$  جرم کاهش یافته،

$M_p$  جرم پرتابه و  $M_T$  جرم هسته هدف است.  $(\Omega_s, \Omega_e)$  زاویه فضایی مربوط به الکترون یونیزه شده (پرتابه پراکنده

شده) و  $E_e = \frac{k_e^2}{2}$  انرژی الکترون یونیزه شده است. در روش

موج واپیچیده پیوسته چهارجسمی با توجه به شرایط مرزی و انتخاب پتانسیل های صحیح اختلالی، توابع موج کل به صورت توابع موج واپیچیده پیوسته کامل در کانال اولیه و نهایی محاسبه شده است [۲۵ و ۲۶].

در کار حاضر، به منظور محاسبه تابع موج واپیچیده پیوسته در کانال اولیه، پتانسیل واپیچیده کننده به صورت

$$U_i \chi_i^+ = Z_p \left( \frac{Z_T}{R} - \frac{1}{S_1} \right) \chi_i^+ \quad (3)$$

$$- \sum_{j=1}^2 \frac{1}{b} \bar{\nabla}_{x_j} \varphi_i \cdot \bar{\nabla}_{s_j} \xi_i^+, \quad (b = \frac{M_T}{M_T + 1})$$

در نظر گرفته شده و تابع موج حالت اولیه به صورت

$$\chi_i^+ = N_i N_1^+(v_p) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2), F_1(i\nu_p, \lambda, i\alpha' k_i s_\nu + i\alpha' \vec{k}_i \cdot \vec{s}_\nu), \quad (4)$$

محاسبه شده است. در رابطه (۴) از فرض تابع  $\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \xi_i^+$  استفاده شده است. موج حالت اولیه اتم هلیوم است و با تابع موج سیلورمن [۲۷] توصیف شده است.

به منظور توصیف صحیح فرایند یونش در کانال نهایی پتانسیل واپیچیده کننده به صورت

$$U_f \psi_f^- = \left[ Z_p \left( \frac{Z_T}{R} - \frac{1}{S_1} \right) + \frac{1}{r_\nu} \right] \chi_f^+ \quad (5)$$

$$- (\bar{\nabla}_{x_1} \cdot \bar{\nabla}_{s_1}) \xi_f^- - \frac{1}{2} \bar{\nabla}_{x_1} \varphi_f \cdot \bar{\nabla}_{x_1} \xi_f^-,$$

در نظر گرفته شده و با فرض  $\chi_i^+ = \varphi_f(\vec{x}_1) \xi_f^-$  تابع موج نهایی به صورت

$$\psi_f^- = N_f N_1^-(\xi) N_\nu^-(\nu) e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_i + i\vec{k}_e \cdot \vec{x}_1} \varphi_f(\vec{x}_1), F_1(-i\xi, \lambda, -i(k_e + \alpha k_f) x_\nu) \quad (6)$$

$$- i(\vec{k}_e + \alpha \vec{k}_f) \cdot \vec{x}_2)$$

$$F_1(i\nu, \lambda, -i k_f s_\nu - i \vec{k}_f \cdot \vec{s}_\nu),$$

محاسبه شده است.  $\varphi_f(\vec{x}_1)$  تابع موج هیدروژن گونه برای یون هلیوم باقی مانده در کانال نهایی است. در روابط (۴) و (۶)  $N_i$  و  $N_f$  ضرایب بهنجارش،

$$N_j^\pm(y) = \Gamma(1 \mp iy) e^{\pm \pi y / \sqrt{y}}, (y = \xi, \nu, \nu_p), (j = 1, 2)$$

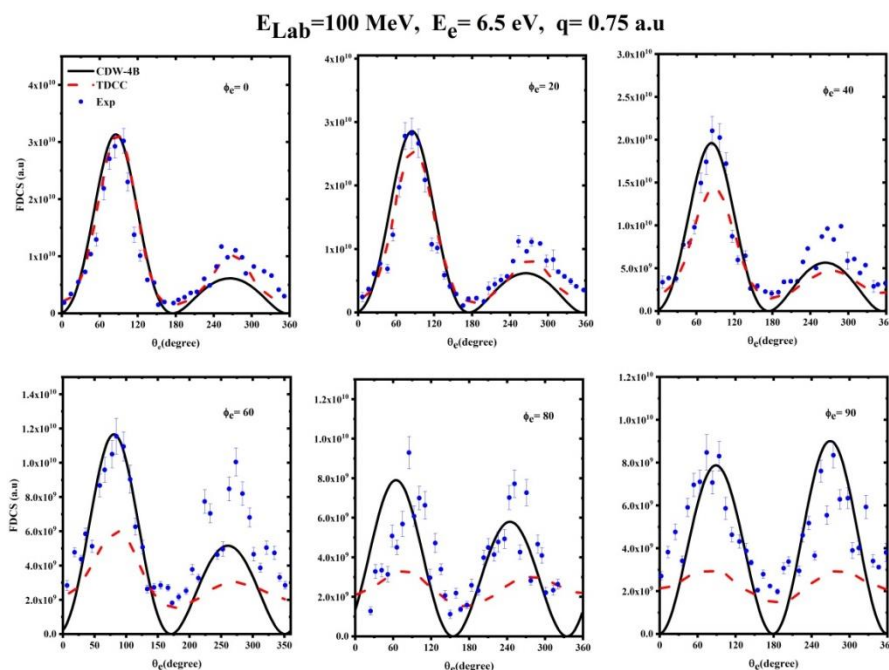
$$\nu = \frac{Z_p}{k_f} \text{ و } \xi = \frac{Z_T}{|k_f + \vec{k}_e|}, \quad \nu_p = \frac{Z_p(M_T + 2)M_p}{k_i(M_T + M_p + 3)}$$

هستند. توابع فوق هندسی هم شار نشان دهنده رفتار تابع موج واپیچیده هستند که با در نظر گرفتن پتانسیل های صحیح متناسب با شرایط مرزی مسئله و پتانسیل های بلند برد کولنی ظاهر شده اند.

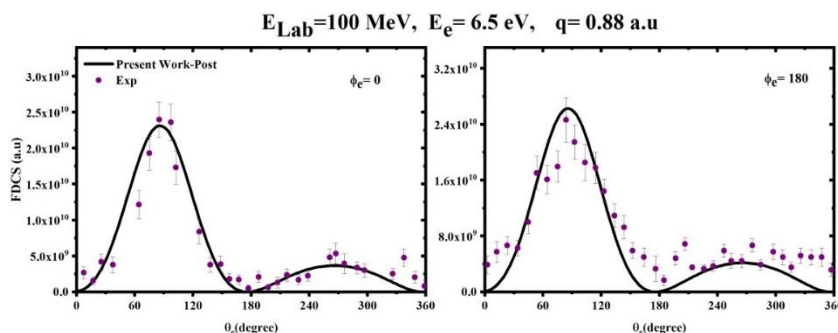
با جایگذاری توابع موج کل (۴) و (۶) و پتانسیل (۵) در رابطه (۲) دامنه گذار حالت پسین به صورت

$$T_{if}^+ = N_i N_1^+(v_p) N_\nu^+(v) N_f^* N_\nu^*(\xi) N_\nu^-(v') \frac{1}{\sqrt{4}} [1 + P_\nu] \int d\vec{s}_\nu d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) F_1(i\nu_p, \lambda, i\alpha_\nu k_i s_\nu + i\alpha_\nu \vec{k}_i \cdot \vec{s}_\nu) \left[ Z_p \left( \frac{Z_T}{R} - \frac{1}{S_1} \right) + \frac{1}{r_\nu} - (\bar{\nabla}_{x_1} \cdot \bar{\nabla}_{s_1}) \circ \frac{1}{\varphi_f(\vec{x}_1)} - \frac{1}{2} \bar{\nabla}_{x_1} \varphi_f \cdot \bar{\nabla}_{x_1} \circ \frac{1}{\varphi_f(\vec{x}_1)} \right] \quad (7)$$

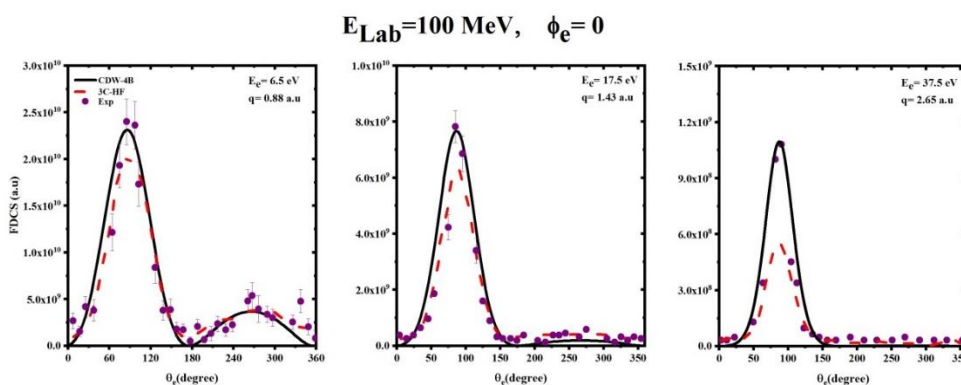
$$e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_i - i\vec{k}_e \cdot \vec{x}_1} \varphi_f^*(\vec{x}_1), F_1(i\xi, \lambda, i(k_e + \alpha k_f) x_\nu), i(\vec{k}_e + \alpha \vec{k}_f) \cdot \vec{x}_2, F_1(-i\nu, \lambda, i k_f s_\nu + i \vec{k}_f \cdot \vec{s}_\nu)$$



شکل ۱. مقایسه نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل یونش اتم هلیوم از حالت پایه در صفحات سمتی مختلف با نتایج تجربی [۱۵] و نظری [۲۸].



شکل ۲. مقایسه نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل یونش اتم هلیوم از حالت پایه در صفحات  $\phi_e$  برابر  $0^\circ$  و  $180^\circ$  درجه و با نتایج تجربی [۳۱].



شکل ۳. مقایسه نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل یونش اتم هلیوم از حالت پایه با نتایج تجربی و نظری [۳۱] در صفحه پراکندگی.

انتگرال‌گیری نوردسیک و روش‌های تعمیم یافته آن تا جای ممکن به صورت تحلیلی حل شده و سپس با روش‌های عددی از جمله گوس مهلر، گوس لژاندر و گوس لاگر به حل

حاصل می‌شود. علامت  $(\circ)$  در رابطه  $(V)$  به این معناست که عملگر گرادیان روی تابع موج  $\varphi_f(\vec{x}_1)$  مقابل آن عمل نمی‌کند. انتگرال‌های موجود در رابطه  $(V)$  با استفاده از تکنیک

انتگرال‌های باقی‌مانده پرداخته شده است.

### ۳. نتایج و بحث

در این بخش نتایج حاصل از محاسبه سطح مقطع دیفرانسیلی کامل برای یونش اتم هلیوم در برخورد با یون‌های کربن برهنه  $(C^{6+})$  به صورت تابعی از زاویه پراکندگی الکترون یونیزه شده و زاویه سمتی الکترون یونیزه شده که با استفاده از نظریه بیان شده در بخش قبل محاسبه شده ارائه شده است. نتایج حاضر با نتایج تجربی و نتایج نظری برای انرژی یون کربن فرودی ۱۰۰ مگا الکترون ولت و برای انرژی‌های الکترون یونیزه شده و اندازه حرکت‌های انتقال یافته متفاوت در صفحات متفاوت مقایسه شده و دینامیک برخورد با استفاده از نظریه حاضر به خوبی پیش بینی شده است.

در شکل ۱ نتایج کار حاضر برای سطح مقطع دیفرانسیلی کامل یونش اتم هلیوم در برخورد با یون‌های کربن بر حسب زاویه قطبی الکترون یونیزه شده  $(\theta_e)$  در صفحات مختلف سمتی  $(\phi_e)$  ارائه شده است. انرژی الکترون یونیزه شده ۶/۵ الکترون ولت و اندازه حرکت انتقال یافته ۰/۷۵ در واحد اتمی در نظر گرفته شده است. نتایج کار حاضر با نتایج تجربی [۱۵] و نتایج نظریه سه جسمی<sup>۱</sup> (TDCC) [۲۸] مقایسه شده است. این مقایسه نشان می‌دهد که نظریه حاضر که یک نظریه اختلالی از مرتبه اول است در پیش بینی دینامیک فرایند مورد نظر موفق بوده است. در این نظریه اثرات برهم‌کنش چهارجسمی با در نظر گرفتن تابع موج مناسب و بازچینی مناسب پتانسیل اختلالی مسئله وارد شده است. همچنین در پتانسیل اختلالی اثرات پس از برخورد و جفت‌شدگی برهم‌کنش الکترون یونیزه شده با پرتابه و یون باقی‌مانده در نظر گرفته شده است. هر دو نظریه سه جسمی و چهارجسمی در تعیین دینامیک برخورد موفق بوده و دو قله را در تمام صفحات پیش بینی می‌کنند. قله‌های مشاهده شده در صفحات  $\phi_e$  برابر ۰ تا ۶۰ درجه را می‌توان قله‌های دوتایی و پس‌زنی معمول در نظر گرفت که به ترتیب به دلیل برهم‌کنش دوتایی پرتابه با الکترون یونیزه شده و برهم‌کنش دومرحله‌ای پرتابه-الکترون-هسته

ایجاد می‌شود. قله‌های موجود در صفحات  $\phi_e$  برابر ۸۰ و ۹۰ نشان از توزیع الکترون یونیزه شده در راستای عمود بر صفحه پراکندگی است. چنین توزیع زاویه‌ای در برخی نظریه‌های اختلالی از جمله تقریب مرتبه اول بورن که در محدوده انرژی‌های بالا به ویژه برای پرتابه الکترون نتایج خوبی را در صفحه پراکندگی ارائه می‌دهد، به خوبی قابل پیش بینی نیست [۲۳ و ۲۹]. نظریه حاضر با وجود این که یک نظریه اختلالی مرتبه اول است با در نظر گرفتن کامل تر برهم‌کنش‌ها این توزیع را به خوبی پیش بینی کرده و به نظر می‌رسد نسبت به نظریه سه جسمی ارائه شده در مقاله [۲۸] پیش بینی بهتری را ارائه می‌دهد. همان‌طور که در مقاله [۲۵] مورد بررسی قرار گرفته است وارد کردن اثرات چهارجسمی از جمله همبستگی‌های استاتیکی که در نقش تابع موج حالت پایه اتم هلیوم ظاهر می‌شوند تأثیر بسزایی در تعیین ارتفاع و پهنای قله‌ها دارند بنابراین چنین نتیجه‌ای دور از انتظار نیست. از طرف دیگر با توجه به بحث‌های انجام شده در مقاله [۲۳]، نتایج مشاهده شده در صفحه عمودی می‌تواند ناشی از برهم‌کنش‌های چند مرحله‌ای از جمله برهم‌کنش پرتابه با الکترون یونیزه شده و سپس برهم‌کنش پرتابه با یون باقی‌مانده باشد که در نهایت برهم‌کنش پس از برخورد یون باقی‌مانده با الکترون، موجب انحراف الکترون یونیزه شده به صفحه عمودی می‌شود. برهم‌کنش غالب در نظریه حاضر برهم‌کنش پس از برخورد است که ابتدا به صورت پتانسیل کولنی برهم‌کنش پرتابه با الکترون و هسته هدف با الکترون در تعیین تابع موج ظاهر می‌شود و سپس به صورت یک پتانسیل عملگری جفت‌شده در پتانسیل اختلالی و محاسبه ماتریس گذار وارد مسئله می‌شود. با توجه به پیش‌بینی خوب این نظریه برای سطح مقطع کامل در صفحه عمودی به نظر می‌رسد می‌توان توزیع الکترون‌های یونیزه شده در صفحات عمودی را به این برهم‌کنش نسبت داد.

با توجه به مفهوم صفحات مختلف سمتی، انتظار می‌رود که نتایج سطح مقطع کامل برای صفحه پراکندگی با  $\phi_e$  صفر و ۱۸۰ درجه یکسان باشد [۲۳]. در شکل ۲ بررسی این موضوع

<sup>۱</sup> Time-Dependent Close-Coupling Approach

جهت اندازه حرکت انتقال یافته یا قلّه دوتایی به ۹۰ درجه مشاهده می‌شود که در واقع می‌توان به اثرات پس از برخورد یا برهم‌کنش هسته با الکترون یونیزه شده نسبت داد. به عبارتی در این حالت برهم‌کنش هسته با الکترون یونیزه شده به اندازه‌ای است که تنها موجب انحراف اندک الکترون‌ها نسبت به زاویه ۹۰ درجه خواهد شد. در حالی که برای الکترون‌های با انرژی کمتر موجب انحراف تعداد بیشتری از الکترون‌ها در جهت مخالف اندازه‌حرکت انتقال یافته با ایجاد قلّه‌های پس‌زنی خواهد شد. لازم به یادآوری است که در محاسبات حاضر با حضور جمله عملگری جفت‌شده در پتانسیل اختلالی، اثرات پس از برخورد به خوبی در نظر گرفته شده است.

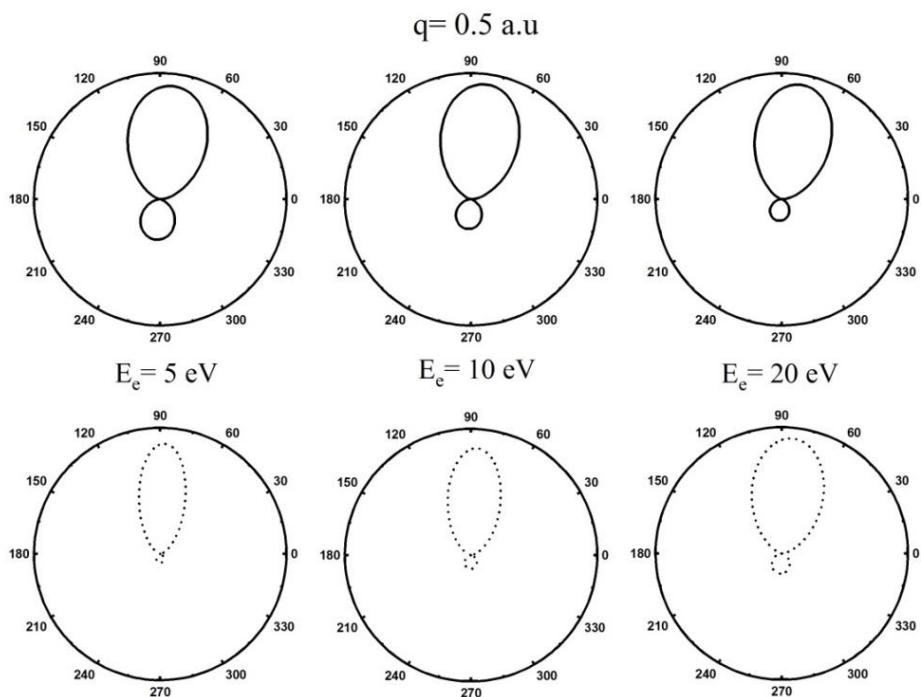
توزیع الکترون‌ها برای یونش از حالت برانگیخته در شکل ۵ با اندازه حرکت انتقال یافته  $q=1 a.u.$ ، با حالت پایه همخوانی دارد. با افزایش انرژی الکترون یونیزه شده سهم برهم‌کنش هسته با الکترون یونیزه شده بسیار کاهش می‌یابد که این کاهش با از بین رفتن قلّه پس‌زنی و کم شدن پهنای قلّه دوتایی خود را نشان می‌دهد. با در نظر گرفتن اندازه حرکت انتقال یافته  $0.5$ ، رفتار یونش از حالت برانگیخته مخالف حالت پایه و حالت برانگیخته برای اندازه حرکت انتقال یافته  $q=1 a.u.$  است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش انرژی الکترون یونیزه شده، قلّه پس‌زنی افزایش یافته و پهنای قلّه دوتایی نیز افزایش می‌یابد و با نتایج مربوط به پرتابه پروتون همخوانی دارد. تفاوت یونش از حالت برانگیخته و پایه به دلیل نحوه هم‌بستگی استاتیکی الکترون‌ها در تابع موج و انرژی قیدی اولیه الکترون یونیزه شده است. با توجه به نتایج مشاهده شده برای حالت برانگیخته به ازای اندازه حرکت‌های انتقال یافته، ثابت به نظر می‌رسد. این دو عامل باعث پیچیده شدن دینامیک برخورد و برهم‌کنش‌های چند مرحله‌ای شده است که برهم‌کنش با هسته هدف پس از برخورد نقش اساسی در آنها دارد.

در برخورد یون کربن  $10^6$  مگا الکترون ولت با اتم هلیوم با اندازه حرکت انتقال یافته  $q$  برابر  $0.88$  در واحد اتمی و انرژی الکترون یونیزه شده  $E_e = 6/5 eV$  با نتایج تجربی متناظر [۳۰] انجام شده است و نتایج کار حاضر نیز این موضوع را به خوبی پیش بینی می‌کند.

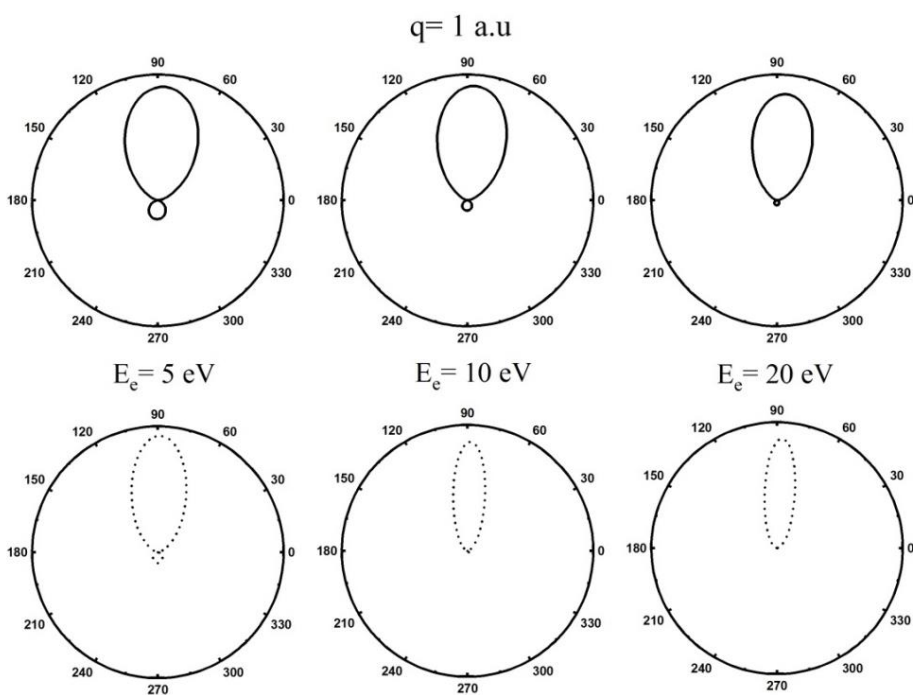
در شکل ۳ نتایج کار حاضر در صفحه پراکندگی با نتایج تجربی و نظریه سه‌جسمی  $3C-HF^1$  به ازای اندازه حرکت‌های انتقال یافته  $q = 0.88, 1/43, 2/65 a.u.$  و انرژی‌های الکترون یونیزه شده  $E_e = 6/5, 17/5, 37/5 eV$  مقایسه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش انرژی و اندازه حرکت انتقال یافته، ارتفاع قلّه پس‌زنی کاهش می‌یابد. در حقیقت با افزایش انرژی الکترون یونیزه شده نقش برهم‌کنش الکترون با یون باقی‌مانده کاهش می‌یابد. همچنین مشاهده می‌شود که در انرژی‌ها و اندازه‌حرکت‌های انتقال یافته بالاتر، نظریه حاضر با در نظر گرفتن اثرات چهارجسمی قلّه دوتایی را با دقت بهتری پیش‌بینی می‌کند.

در ادامه، محاسبات حاضر برای یونش اولین حالت برانگیخته اتم هلیوم ( $2^1S$ ) مورد بررسی قرار گرفته است. شکل‌های ۴ و ۵ مقایسه یونش از حالت‌های پایه و برانگیخته را به ازای یک اندازه حرکت ثابت و انرژی‌های الکترون یونیزه شده متفاوت نشان می‌دهند. با مقایسه این نتایج با شکل‌های ۶ و ۷ مرجع [۲۶] مشاهده می‌شود، که دینامیک یونش در این انرژی‌ها و اندازه حرکت‌های انتقال یافته برای پرتابه پروتون با انرژی ۱ مگا الکترون ولت و پرتابه کربن با انرژی  $10^6$  مگا الکترون ولت یکسان است. در مورد حالت پایه برای هر دو اندازه حرکت انتقال یافته  $q = 0.5, 1 a.u.$  مشاهده می‌شود با افزایش انرژی الکترون یونیزه شده قلّه پس‌زنی کاهش می‌یابد. به عبارتی در این حالت سهم برهم‌کنش پرتابه با الکترون یونیزه شده بسیار بیشتر از سهم برهم‌کنش پرتابه با هسته و هسته با الکترون یونیزه شده پس از برخورد است. البته در مورد انرژی  $20$  الکترون ولت، انحراف کوچکی برای

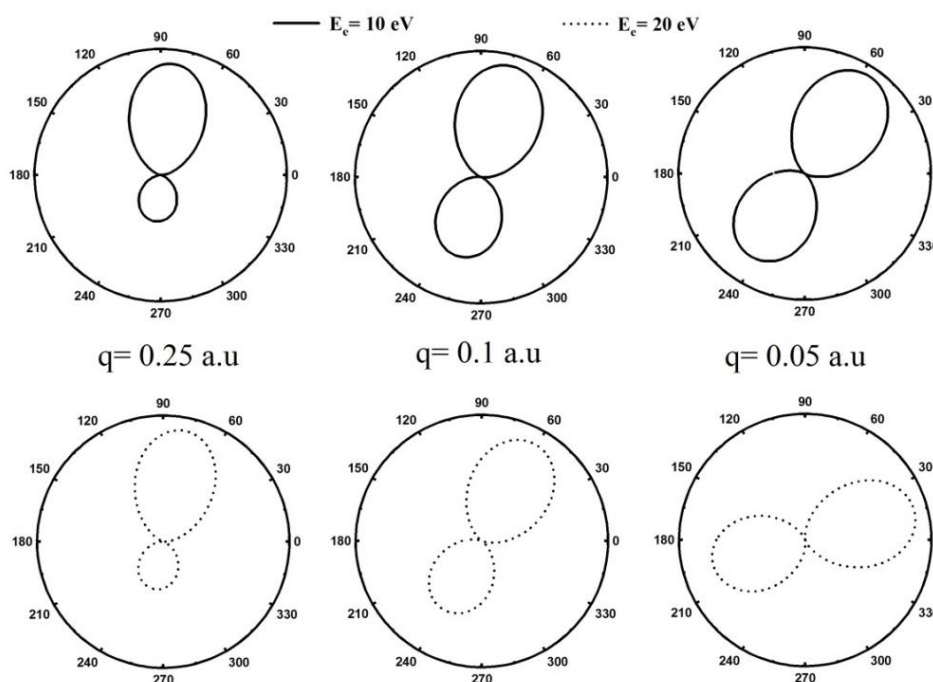
<sup>1</sup> Three- Coulomb Wave-Hartree-Fock



شکل ۴. نمودار قطبی نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل یونش از حالت پایه (خطوط پر) و حالت برانگیخته  $2^1S$  (نقطه چین) به ازای اندازه حرکت  $q = 0.5 \text{ a.u.}$  و انرژی‌های  $E_e = 5, 10, 20 \text{ eV}$ .



شکل ۵. مشابه شکل ۴ برای اندازه حرکت انتقال یافته  $q = 1 \text{ a.u.}$



شکل ۶. نمودار قطبی نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل یونش از حالت برانگیخته  $2^1S$  برای انرژی الکترون یونیزه شده  $E_e = 10 eV$  (خطوط پر) و  $E_e = 20 eV$  (نقطه چین) به ازای اندازه حرکت‌های انتقال یافته  $q = 0.05, 0.1, 0.25 a.u.$

عملگری جفت‌شده به خوبی قادر به توصیف این موضوع خواهد بود.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این کار، یونش یگانه اتم هلیوم از حالت پایه و اولین حالت برانگیخته در برخورد با یون برهنه کربن با انرژی فرودی  $100$  مگا الکترون ولت مورد بررسی قرار گرفت. شکل پسین روش CDW-4B در محاسبات استفاده شد و نتایج سطح مقطع جزئی کامل برای انرژی‌های مختلف الکترون پرتاب‌شده و اندازه حرکت انتقال یافته بر حسب توزیع زاویه‌ای الکترون پرتاب‌شده در سطوح مختلف سمتی با نتایج نظری و تجربی در دسترس مقایسه شد. نتایج نشان داد که نظریه حاضر به عنوان یک روش اختلاقی مرتبه اول، دینامیک فرایند را به خوبی پیش‌بینی می‌کند. مقایسه نتایج حاضر با نتایج تجربی و نظری برای اندازه حرکت‌های انتقال یافته و انرژی‌های الکترون پرتاب‌شده مختلف نشان داد که ارتفاع قله پس‌زنی با افزایش انرژی الکترون‌های پرتاب‌شده و اندازه حرکت انتقال یافته کاهش می‌یابد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش

در شکل ۶ نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی کامل یونش از حالت برانگیخته  $2^1S$  ارائه شده است. انرژی الکترون یونیزه شده  $E_e = 10, 20 eV$  در نظر گرفته شده و به ازای هر کدام از انرژی‌ها، مقادیر  $q = 0.05, 0.1, 0.25 a.u.$  برای اندازه حرکت انتقال یافته فرض شده است. برای هر دو انرژی مشاهده می‌شود با کاهش اندازه حرکت انتقال یافته اثرات برهم‌کنش هسته با الکترون یونیزه شده که اثرات پس از برخورد نامیده می‌شوند افزایش می‌یابد و نقش خود را با افزایش ارتفاع قله پس‌زنی و چرخش (انحراف) جهت اندازه حرکت انتقال یافته (یا محل قله دوتایی) از زاویه  $90$  درجه نشان می‌دهد. در مورد انرژی  $20$  الکترون ولت، میزان چرخش قله‌ها نسبت به حالت  $10$  الکترون ولت بیشتر است. زمانی که اندازه حرکت انتقال یافته کاهش پیدا می‌کند انرژی منتقل شده به سامانه هدف نیز کاهش پیدا می‌کند و بنابراین قابل توجیه است که با توجه به پتانسیل‌های بلند برد الکترون یونیزه شده هنوز تحت تأثیر هسته از مسیر خود منحرف شود. در نظریه حاضر این برهم‌کنش با در نظر گرفتن توابع موج کولنی و پتانسیل



انرژی الکترون پرتاب شده، برهم‌کنش ضعیفی بین الکترون پرتاب شده و یون باقی‌مانده وجود دارد. همچنین نتایج همخوانی خوبی را با نتایج تجربی در تعیین محل و ارتفاع قله دوتایی در انرژی‌ها و اندازه‌حرکت‌های انتقال یافته در نظر گرفته شده نشان می‌دهد که دلیل این همخوانی را می‌توان به در نظر گرفتن اثرات چهار جسمی در محاسبات نسبت داد. نتایج یونیزاسیون از حالت برانگیخته  $2^1S$  نشان داد که در اندازه‌حرکت‌های انتقال یافته بالاتر، رفتار قله پس‌زنی هم در حالت پایه و هم در حالت برانگیخته یکسان است و با افزایش انرژی پرتابه، قله پس‌زنی کوچک‌تر شده و جهت اندازه حرکت انتقال یافته در هر دو حالت برای  $q=1 a.u.$  به سمت صفر جابه‌جا شد. با افزایش انرژی‌های الکترون پرتاب شده، هم ارتفاع و هم عرض قله‌های دوتایی و پس‌زنی افزایش یافت که

## مراجع

دلیل آن شکل‌های مختلف همبستگی الکترونی استاتیکی و انرژی قیدی در حالت برانگیخته و وارد شدن برهم‌کنش‌های متفاوت از حالت پایه است که باعث پیچیده شدن دینامیک برخورد خواهد شد. همچنین مشاهده شد که با کاهش اندازه‌حرکت انتقال یافته، برهم‌کنش الکترون پرتاب شده با یون هدف افزایش می‌یابد و نقش خود را با افزایش ارتفاع قله دوتایی و انحراف از  $90^\circ$  درجه (از جهت اندازه حرکت انتقال یافته) نشان می‌دهد. جایی که اندازه حرکت انتقال یافته کاهش می‌یابد، الکترون پرتاب شده از راستای اندازه حرکت انتقال یافته منحرف می‌شود. در نظریه حاضر، در نظر گرفتن پتانسیل‌های کولنی که منجر به توابع موج کولنی در کانال اولیه و نهایی می‌شوند (شرایط مرزی صحیح) و ظاهر شدن جمله پتانسیلی به صورت عملگری در محاسبه ماتریس گذار، دلیل عمده همخوانی نتایج با دستاوردهای تجربی است.

1. H Ehrhardt, K Jung, G Knoth, and P Schlemmer, *Z. Phys. D* **1** (1986) 3.
2. R Dorner, V Mergel, O Jagutzki, L Spielberger, J Ullrich, R Moshhammer, and H Schmidt-Backing, *Phys. Rep* **330** (2000) 95.
3. J Ullrich, R Moshhammer, A Dorn, R Dorner, L P H. Schmidt, and H Schmidt-Bocking. *Rep. Prog. Phys.* **66** (2003) 1463.
4. D Misra, et al., *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 1.
5. L P H. Schmidt, T Jahnke, A Czasch, M Schoffler, H Schmidt-Bocking, and R Dorner, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 073202 .
6. O Chuluunbaatar, K A Kouzakov, S A Zaytsev, A S Zaytsev, V L Shablov, Yu.V Popov, H Gassert, M Waitz, H K Kim, T Bauer et al., *Phys. Rev. A* **99** (2019) 1.
7. T W Shyn, *Phys. Rev. A* **45** (1992) 2951.
8. C Dal Cappello, A Haddadou, F Menas, and A C Roy, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44** (2011) 015204.
9. M Brauner, J S Briggs, H Klar, J T Broad, T Rosel, K Jung, and H Ehrhardt, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** (1991) 657.
10. S AmiriBidvari and R Fathi, *Eur. Phys. J. D* **74** (2020) 55.
11. H R J Walters and C Whelant, *Phys. Rev. A* **92** (2015) 1.
12. M Schulz, A C Laforge, K N Egodapitiya, J S Alexander, A Hasan, M F Ciappina, A C Roy, R Dey, A Samolov, and A L Godunov, *Phys. Rev. A* **81** (2010) 052705.
13. A B Voitkiv, *Phys. Rev. A* **95** (2017) 032708.
14. N V Maydanyuk, A Hasan, M Foster, B Tooke, E Nanni, D H Madison, and M Schulz, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 243201.
15. M. Schulz, R Moshhammer, D Fischer, H Kollmus, D H Madison, S Jones, and J Ullrich, *Nature* **422** (2003) 48.
16. D Fischer, R Moshhammer, M Schulz, A Voitkiv, and J Ullrich, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **36** (2003) 3555.
17. L Sarkadi, *Phys. Rev. A* **97** (2018) 042703.

18. M F Ciappina, W R Cravero, and M Schulz, *J. Phys. B At. Mol. Opt. phys.* **40** (2007) 2577.
19. H Gassert, O Chuluunbaatar, M Waitz, F Trinter, H K Kim, T Bauer, A Laucke, Ch Muller, J Voigtsberger, M Weller et al., *Phys. Rev. Lett.* **116** (2016) 062711.
20. A B Voitkiv, B Najjari, and J Ullrich, *J. Phys. B: At. Mot. Opt. Phys.* **38** (2005) L107.
21. L Gulyás, S Egri, and T Kirchner, *Phys. Rev. A* **90** (2014) 062710.
22. N V Maydanyuk, A Hasan, M Foster, B Tooke, E Nanni, D H Madison, and M Schulz, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 243201.
23. M Schulz and D H Madison, *International Journal of Modern Physics A* **21**, 18 (2006) 3649.
24. R T Pedlow, S F C O Rourke, and D S F Crothers, *Phys. Rev. A* **72** (2005) 062719.
25. S AmiriBidvari and R Fathi, *Eur. Phys. J. Plus* **136** (2021) 190.
26. S AmiriBidvari and R Fathi, *Eur. Phys. J. Plus* **136** (2021) 453.
27. I Mancev, N Milojevic, and D Belkic, *Phys. Rev. A* **91** (2015) 062705.
28. J Colgan, M S Pindzola, F Robicheaux, and M F Ciappina, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **44** (2011) 175205.
29. M Foster, D H Madison, J L Peacher, M Schulz, S Jones, D Fischer, R Moshhammer, and J Ullrich, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** (2004) 1565.
30. D H Madison, M Schulz, S Jones, M Foster, R Moshhammer, and J Ullrich, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** (2002) 3297