

تحلیل شدت پرتوهای ایکس اتم کائونی در عناصر و ترکیبات با محاسبات دینامیک آبخاری

مرتضی رئیسی گهرویی و سعیده عابدینی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

پست الکترونیکی: raeksi.morteza@sku.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۸/۲۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۸/۰۳/۰۲)

چکیده

در این تحقیق هدف تفسیر طیف تجربی پرتوهای ایکس اتم‌های کائونی ($Z > 2$) در عناصر و ترکیبات مختلف است. در ابتدا احتمال گیراندازی کائون درون ترکیبات با مدل‌های اتمی مختلف محاسبه و مقایسه شده است. با استفاده از روش مونت کارلو دینامیک آبخاری اتم در هر ترکیب شبیه‌سازی و بهره هر گذار تابشی به ازای یک اتم کائون محاسبه شده است. با روش برازش برای هر اتم، ضرایب آزاد دو توزیع اندازه حرکت زاویه‌ای مداری پیشنهادی استخراج شده است. وابستگی این ضرایب به عدد اتمی، فرضیه کاندو مبنی بر همبستگی بین اندازه اتم و اندازه حرکت زاویه مدار اولیه که منجر به تناوبی بودن بهره‌ها می‌شود را تأیید می‌کند. با مقایسه بهره‌ها و نسبت آنها با مقادیر تجربی در بیشتر موارد توافق خوبی مشاهده شده است.

واژه‌های کلیدی: اتم کائونی، گیراندازی اتمی، بهره ایکس، محاسبات آبخاری اتمی، شبیه‌سازی مونت کارلو

۱. مقدمه

استفاده از اتم‌های میونی یا در مورد ذرات هادرونی برهم‌کنش هادرون هسته باعث جابه‌جایی و پهن‌شدگی طیف پرتوهای ایکس اتم‌های اگزوتیک می‌شود. که با اندازه‌گیری این اثر می‌توان اطلاعات مهمی مرتبط با توزیع ماده هسته‌ای و برهم‌کنش هادرون-نوکلئون به دست آورد [۳].

در حالت کلی شدت گذارهای ایکس در اتم‌های اگزوتیک به احتمال تشکیل اتم اگزوتیک و رقابت بین گذارهای اتمی است. دینامیک گیراندازی ذرات و واکنجستگی آن یکی از بحث‌های مهم در حوزه فیزیک اتمی است که بعضی از

دستگاه اگزوتیک اتمی یا مولکولی، دستگاهی است که از جایگزین شدن یک ذره منفی سنگین‌تر از الکترون ($x^- = \mu^-, \pi^-, K^-, \dots$) با یک الکترون ایجاد می‌شود. مطالعه اتم‌های اگزوتیک در حوزه‌های شیمی، فیزیک اتمی و فیزیک هسته‌ای اهمیت دارند. با آنالیز طیف پرتوهای ایکس اتم‌های اگزوتیک می‌توان در مورد برهم‌کنش‌های الکترومغناطیسی، قوی و ضعیف ذره اگزوتیک با هسته اطلاعات مهمی را به دست آورد [۱ و ۲]. به عنوان نمونه اندازه‌گیری شعاع هسته‌ها با

همکاران اندازه‌گیری شد. این اولین اندازه‌گیری شدت پرتوهای ایکس مربوط به یک هدف متشکل از یک ترکیب آلی پیچیده است [۸].

هدف از این تحقیق در مرحله اول انتخاب مدل گیراندازی اتمی مناسب جهت تعیین احتمال گیراندازی در یک ترکیب است. سپس محاسبه بهره‌های ایکس در هر اتم با در نظر گرفتن مدل آماری و آماری بهبود یافته است. در این راستا از محاسبات آبشار اتمی که با شبیه‌سازی مونت کارلو انجام می‌شود جهت به دست آوردن بهره یا شدت پرتوهای ایکس به کارگرفته می‌شود. در بخش ۲ مدل‌های گیراندازی مختلف بررسی می‌شود. با استفاده از این مدل‌ها نسبت احتمال گیراندازی را در ترکیب کاپتون تعیین می‌کنیم. در ادامه اثرات مشخصه یونی پیوند که سهم قابل ملاحظه‌ای دارند بررسی شده است. در بخش ۳ وابستگی بهره‌ها به عدد اتمی و محاسبات دینامیک آبشار اتمی شرح داده می‌شود. سپس با روش χ^2 کمیت‌های آزاد را در توزیع اولیه تکانه زاویه‌ای را با برازش بهره‌های تجربی ویگند و گادفری برای هر اتم به دست آورده و تغییرات شدت پرتوهای ایکس بر حسب عدد اتمی را توجیه کنیم. سرانجام در بخش نتایج و جمع‌بندی با تلفیق مدل‌های گیراندازی و شدت‌های به دست آمده توسط برنامه شبیه‌سازی، شدت گذارهای خاص مربوط به ترکیب کاپتون و چند ترکیب دو اتمی دیگر را به دست آورده و با نتایج تجربی مقایسه می‌شود.

۲. گیراندازی کائون در عناصر و مولکول‌ها

اولین مدل گیراندازی نیمه کلاسیکی توسط فرمی و تلمر ارائه شد. آنها با در نظر گرفتن مدل گاز فرمی برای الکترون‌های اتم نشان داده‌اند که احتمال گیراندازی در یک اتم در یک ترکیب خاص متناسب با عدد اتمی آن Z می‌باشد [۱]. سپس مدل‌های بهبود یافته مدل فرمی تلمر متناسب با Z^{-3} [۹]، دانیل $Z^{1/3} \ln [1/1 Z^{1/3}]^2$ [۱۰]، ووگل $Z^{1/3} \ln(0.57Z)$ [۱۱]، پتروخین $Z^{1/3} - 1$ [۱۲] ارائه شد که در بعضی ترکیبات با تجربه اختلاف و در بعضی دیگر سازگاری نشان می‌دهند. از

جنبه‌های آن هنوز روشن نیست، چرا که ساختار شیمیایی و فاز ماده بر روی احتمال گیراندازی هادرون با هر یک از اتم‌های محیط به شدت تأثیر زیادی دارد. محاسبات کلاسیکی و نیمه کلاسیکی نشان می‌دهد که احتمال گیراندازی ذره زمانی قابل توجه است که انرژی جنبشی آن تقریباً کمتر از 100 eV برسد. در این انرژی احتمال کننده شدن الکترون از لایه‌های داخلی L و K اتم بیشتر است [۴]. اگر این گیراندازی در یک ساختار مولکولی صورت گیرد مقدار احتمال گیراندازی در هر نوع اتم به نوع پیوند، تعداد الکترون‌های به اشتراک گذاری شده و توزیع فضایی آنها نیز وابسته خواهد شد [۵]. در طول پنج دهه گذشته برای ذرات متفاوت میون، پایون، کائون و پادپروتون با اتم‌های مختلف این طیف استخراج شده است. یکی از کامل‌ترین مجموعه داده‌ها برای کائون در سال ۱۹۷۴ توسط ویگند و گادفری روی محیط‌های تک‌اتمی از عناصر سبک هلیوم تا اورانیوم با عدد اتمی ۹۲، برخی ترکیبات دو اتمی و ایزوتوپ‌های عناصر مختلف اندازه‌گیری شده است [۶]. ویژگی‌های مختلفی در این داده‌ها به دست آمده است. به ازای یک گذار خاص شدت‌ها بر حسب عدد اتمی دارای یک رفتار تناوبی است که مشابه بیشینه و کمینه شعاع اتم‌ها در عناصر نادر و عناصر قلیایی است. برای اتم‌هایی که عدد اتمی آن بیشتر از یک مقدار خاص است، شدت گذارهای پایین آن به دلیل اثر جذب قوی کائون هسته بسیار کم و قابل اندازه‌گیری نیست. همچنین طیف پرتوهای ایکس ایزوتوپ‌های یک عنصر در محدوده خطای تجربی یکسان هستند مگر در ترازهای پایین که برهم‌کنش کائون هسته مهم است. کاندو با مقایسه تغییرات شدت گذار به دست آمده از داده‌های ویگند و گادفری با تغییرات شعاع اتمی بر حسب Z دریافت که بیشینه و کمینه‌های هر دو (شدت و شعاع اتمی) بر یکدیگر منطبق هستند و بیشینه‌ها در نزدیکی اتم‌هایی رخ می‌دهد که پوسته الکترونی بسته و کاملی دارند. در نتیجه این افت و خیزها را با شعاع اتمی مرتبط دانست [۷]. در سال ۲۰۱۳ نیز شدت پرتوی ایکس کائونی ناشی از گذارهای میانی مربوط به ترکیب کاپتون^۱ توسط بازی و جمعی از

۱. Kaptan

این رابطه برای طیف وسیعی از ترکیبات دو اتمی استفاده شده است. در انتهای این بخش شکل دیگری از این کمیت را مورد بررسی قرار خواهیم داد. بنابراین احتمال این که کائون با جایگزینی یک مدار الکترون ظرفیت که به لحاظ فضایی به یک اتم نزدیک تر است گیراندازی شود و تشکیل یک مدار مولکولی دهد به صورت

$$p_2 = (1 + \sigma) / 2 \quad \text{و} \quad p_1 = (1 - \sigma) / 2 \quad (3)$$

بیان می شود. شاخص ۲ مربوط به اتم الکترونگاتیوتر است. q عامل دوم، احتمال یک توزیع مجدد گذار از یک مدار مولکولی به یک مدار اتمی است که متناسب با Z^2 است. بنابراین مقدار ω به صورت

$$\omega = \frac{p_1 Z_1^2}{p_1 Z_1^2 + p_2 Z_2^2} \quad (4)$$

خواهد بود. هر چند این رابطه برای ترکیب دو اتمی به کار گرفته می شود، اما برای ترکیبات چند اتمی باید آن را به صورت

$$A(Z_i / Z_j) = \frac{n_i + \sum_k \omega_{ik} v_{ik}}{n_j + \sum_k \omega_{jk} v_{jk}} \quad (5)$$

تعمیم داد که ω_{ik} و v_{ik} به ترتیب احتمال گذار از مدار مولکولی به مدار اتمی و تعداد الکترون های ظرفیت است که در پیوند بین دو اتم i و k ام به اشتراک گذاشته شده است. ترکیب کاپتون به عنوان یک ماده آلی جهت کالیبره کردن آشکارسازهای پرتوهای ایکس به کار می رود. در مطالعاتی که بر روی طیف پرتوهای ایکس اتم های کائونیک هیدروژن و دوتریوم انجام شده است این ماده به صورت ظرف دربرگیرنده مایع هیدروژن و دوتریوم به کار گرفته شده است [۸]. اما چون شدت فوتون های ایکس این دو اتم نسبت به ترکیب کاپتون بسیار کم است، در ابتدا طیف فوتون های ایکس کاپتون اندازه گیری شده است تا سهم آن مشخص شود. با توجه به داده های تجربی که برای این ترکیب در سال ۲۰۱۳ به دست آمده است می توان نتایج نظری و تجربی را مقایسه کرد و درستی روابط به دست آمده را مورد آزمون قرار داد. بر این اساس بهره پرتوهای ایکس در اتم های کربن، نیتروژن و اکسیژن

این به بعد این مدل ها به ترتیب از شماره ۱ تا شماره ۵ نام گذاری می شوند. اما مدل ششم که به مدل مولکول های بزرگ مزونی معروف است، با بیشتر نتایج تجربی سازگاری بهتری دارد (به ویژه اکسیدهای فلزی) [۱۳]. این مدل با جزئیات بیشتری در بخش بعدی ارائه می شود.

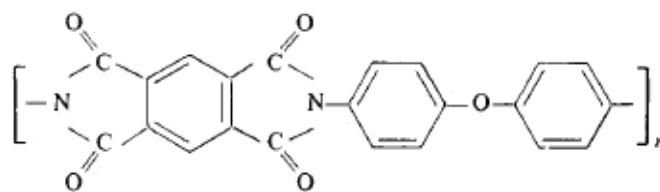
۲.۱. مدل مولکول های بزرگ مزونی

در این مدل ساختار مولکولی به صورت پدیده شناسی در احتمال گیراندازی لحاظ شده است. اگر یک ترکیب دوتایی از دو اتم ۱ و ۲ را به صورت $(Z_1)_k (Z_2)_l$ در نظر بگیریم k, l نسبت شیمیایی، گیراندازی می تواند توسط الکترون های مقید هر اتم یا الکترون های ظرفیت که در پیوند به اشتراک گذاشته شده است صورت گیرد. در مورد اول گیراندازی به صورت مستقیم منجر به تشکیل یک مدار اتمی حول یک اتم خواهد شد، در مورد دوم گیراندازی ابتدا به صورت تشکیل یک مدار مولکولی در ناحیه بین دو اتم انجام می شود و سپس یک گذار از حالت های مولکولی به حالت های اتمی انجام می شود. اگر (n_1, v_1) و (n_2, v_2) تعداد الکترون های مقید و ظرفیت به ترتیب دو اتم ۱ و ۲ باشد با قید $(kv_1 = lv_2)$ ، نسبت احتمال گیراندازی مستقیم (سهم الکترون های مقید) و مولکولی (سهم الکترون های ظرفیت) به صورت

$$A(Z_1 / Z_2) = \frac{n_1 + 2\omega_1 v_1}{n_2 + 2\omega_2 v_2} \quad (1)$$

خواهد بود [۱۳]. ω_1 و ω_2 احتمال کلی است که یک کائون، که در یک مدار مولکولی است به یک مدار اتمی حول اتم ۱ یا اتم ۲ گذار انجام دهد ($\omega_1 + \omega_2 = 1$). این احتمال خود به دو کمیت p و q وابسته است. اول با توجه به این که عدم تقارن در توزیع الکترون های ظرفیت بین دو اتم وجود دارد احتمال این که به لحاظ فضایی مدار مولکولی به یک اتم نزدیک تر باشد، بیشتر است. مقدار مشخصه یونی یک پیوند σ که معیاری از تفاوت الکترونگاتیوی $\Delta\chi$ بین دو اتم است، تبیین کننده این احتمال است و از رابطه پائولی به صورت زیر به دست می آید

$$\sigma = 1 - e^{-(\Delta\chi/2)^2} \quad (2)$$

شکل ۱. ساختار ترکیب پلیمر کاپتون $C_{22}H_{10}O_5N_2$.

جدول ۱. خصوصیات اتم‌های ترکیب کاپتون شامل عدد اتمی، ظرفیت الکترونی، الکترونگاتیویتی و تعداد اتم از هر نوع عنصر.

اتم	Z	n	ν	χ	f_n
H	۱	۰	۱	۲٫۲	۱۰
C	۶	۲	۴	۲٫۵۵	۲۲
N	۷	۴	۳	۳٫۰۴	۲
O	۸	۶	۲	۳٫۴۴	۵

جدول ۲. احتمال گیراندازی در یک پیوند α_m ، کمیت‌های مشخصه یونی σ ، احتمال جایگزینی P احتمال نهایی ω .

پیوند	تعداد پیوند	α_m	σ	P	ω
C-H	۱۰	۰٫۱۰۲	۰٫۰۳۰۱	C	۰٫۵۱۵
				H	۰٫۴۸۵
C-O	۱۰	۰٫۱۰۲	۰٫۱۷۹	C	۰٫۴۱۰
				O	۰٫۵۸۹
C-N	۶	۰٫۶۱۲	۰٫۰۵۸	C	۰٫۴۷۱
				N	۰٫۵۲۹
C-C	۳۱	۰٫۳۱۶	۰	C	۰٫۵

جدول ۳. نسبت احتمال گیراندازی به ازای هر اتم $A(Z_i/Z_r)$ برای هر ۶ مدل.

مدل	۱	۲	۳	۴	۵	۶
(C/N)	۰٫۸۵۷	۰٫۹۴۹	۰٫۸۸۴	۰٫۸۴۴	۰٫۸۹۴	۰٫۸۹۹
(C/O)	۰٫۷۵۰	۰٫۹۰۸	۰٫۷۹۸	۰٫۷۳۶	۰٫۸۱۷	۰٫۷۷۴

قرار می‌گیرد و در جدول ۲ کمیت‌های σ ، p ، ω و احتمال گیراندازی در هر پیوند α_m (صرف نظر از نوع پیوند یگانه یا دوگانه) آورده شده است. با توجه به مقادیر جدول ۱ و ۲ و مدل‌های ارائه شده مقادیر نسبت احتمال گیراندازی به ازای یک اتم برای ترکیب کاپتون به ترتیب مدل‌های معرفی شده در جدول ۳ محاسبه شده است.

از آنجا که در مولکول‌های کاپتون پیوندهای معمولی و دوگانه وجود دارد مشخصه یونی برای این دو نوع پیوند

در گذارهای تابشی که تراز اولیه آنها n بین ۵ تا ۸ است اندازه‌گیری شده است. در شکل ۱ ساختار مولکولی ترکیب کاپتون نشان داده شده است. در این مولکول پیوندهای معمولی و دوگانه وجود دارد. در این بخش از محاسبات تفاوتی بین مشخصه یونی این دو نوع پیوند قائل نشده‌ایم و تأثیر این کمیت در ادامه بخش بررسی خواهد شد.

در جدول ۱ خصوصیات اتم‌های موجود در این ترکیب آورده شده است که در محاسبه احتمال گیراندازی مورد استفاده

با شعاع 5.2 \AA این توزیع به صورت $p(l) = (2l+1)e^{-l/\lambda}$ است. از این رو سعی می‌کنیم توزیع مناسب برای هر اتم را که توافق خوبی با شدت‌های گذار آن اتم داشته باشد بیابیم. در این راستا دو مدل توزیع را به کار می‌بریم:

(الف) فرض می‌کنیم احتمال گیراندازی در یک حالت کوانتومی اولیه برای l های بزرگتر از یک l_{\max} صفر و کمتر از آن متناسب با $(2l+1)$ است. بنابراین شکل توزیع به صورت

$$p(l) = \frac{2l+1}{(l_{\max}+1)^2} \theta(l_{\max}-l), \quad (7)$$

خواهد بود. که θ تابع پله است.

(ب) در این حالت فرض می‌کنیم که احتمال گیراندازی در l های زیاد با یک ضریب نمایی α کاهش یابد. شکل این مدل به صورت زیر است

$$p(l) = (2l+1)e^{\alpha l}, \quad (8)$$

زمانی که یک اتم در یک تراز کوانتومی اولیه تشکیل می‌شود قویاً برانگیخته است. پس از آن با فرایندهای اتمی مختلف به ترازهای پایین‌تر گذار انجام می‌دهد در مورد اتم‌ها با $Z > 2$ مهم‌ترین عبارتند از گذارهای تابشی، اوژه و بازآرایی مجدد لایه الکترونی^۲، جذب قوی و واپاشی ضعیف کائون. به رقابت پیچیده این فرایندها دینامیک آشکار اتمی می‌گویند [۱۷]. برای تعیین بهره یا شدت هر گذار تابشی باید احتمال در واحد زمان آن محاسبه شود [۱۸-۲۲]. سپس با روش مونت کارلو تاریخچه هر اتم کائونی از ترازهای برانگیخته بالا تا ترازهای برانگیخته پایین قبل از جذب کائون توسط هسته یا واپاشی آن دنبال شود. تعداد فوتون‌های گسیل شده یک نوع گذار تابشی خاص به ازای یک اتم کائونی تعیین می‌شود [۱۸-۲۲]. برای آن که خطای آماری کاهش یابد محاسبات با تعداد زیادی اتم کائونی مثلاً 10^6 اتم انجام شود. برنامه شبیه‌سازی از یک تراز برانگیخته اولیه $n_i l_i$ مشخص برای اتم کائونی شروع می‌کند. عدد کوانتومی اصلی n_i برای اتم‌های کائونی برابر 30 در نظر گرفته شده است. برای اندازه حرکت زاویه‌ای اولیه l_i از دو توزیع (الف) و (ب) استفاده شده است. α یک ضریب آزاد

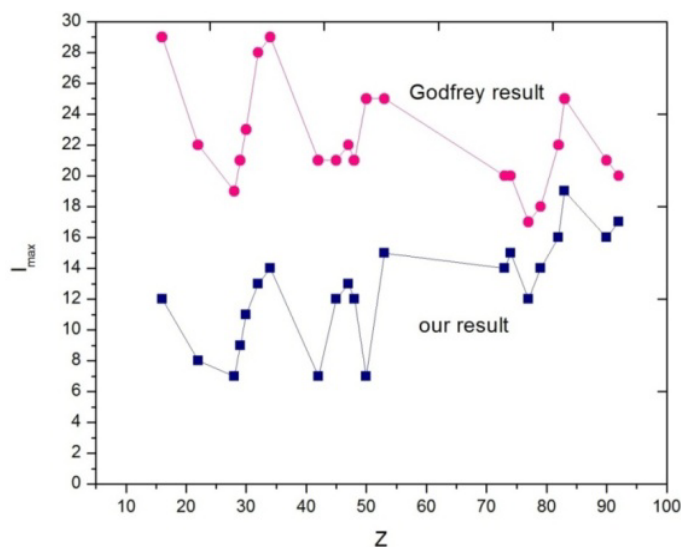
متفاوت است و رابطه ساده‌ای که در بخش قبل برای مشخصه یونی معرفی شد برای مولکول‌های پیچیده‌تر به خاطر تنوع پیوندها معتبر نیست. بنابراین برای ترکیب کاپتون تعریف زیر برای مولکول‌های پیچیده‌تر به کار گرفته می‌شود [۱۴].

$$\sigma = \frac{1}{N_{1\gamma}} (\sum_1 Q_1 - \sum_2 Q_2), \quad (6)$$

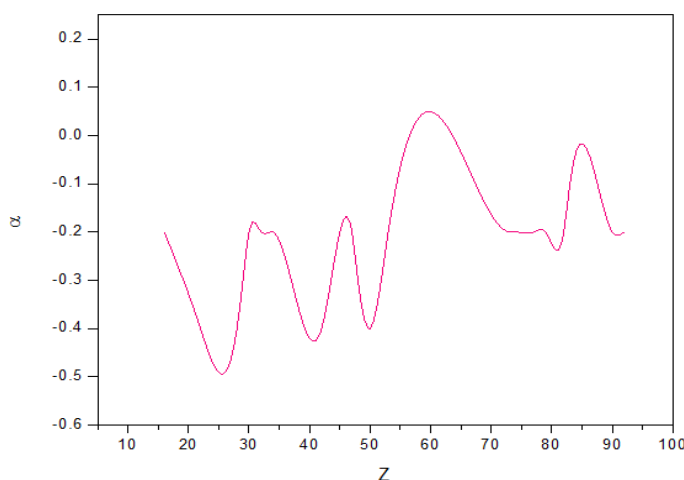
که در آن $N_{1\gamma}$ تعداد پیوند دو مولکول و Q_1 و Q_2 به ترتیب بار ناخالص اضافی بر روی اتم ۱ و ۲ است. این مقادیر با استفاده از نرم‌افزار گاوسین [۱۵] که بر پایه روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به صورت نیمه کلاسیکی انجام شده است به دست آمده است. برای ترکیب کاپتون مشخصه یونی σ حاصل از این بارها برای پیوند C=O، C-N، C-H و C-O به ترتیب 0.170 ، 0.448 ، 0.326 و 0.656 است. در مورد پیوند بین اتم‌های کربن نیازی به محاسبه مشخصه یونی پیوند نداریم، چرا که گیراندازی در مدار مولکولی این پیوندها در هر صورت منجر به گیراندازی در اتم C خواهد شد ($\omega=1$). با توجه به مقادیر σ و معادلات (۳) تا (۵) مقادیر نسبت احتمال A برای C/O و C/N به ترتیب برابر 0.681 و 0.625 است.

۳. وابستگی بهره‌ها به عدد اتمی

توزیع اولیه تکانه زاویه‌ای ذره آگزوتیک بر روی شدت گذارهای اتمی تأثیر زیادی دارد به طوری که کائون‌هایی که در تراز با تکانه زاویه‌ای بالا قرار می‌گیرند نسبت به کائون‌هایی که تکانه زاویه‌ای پایین‌تری دارند در گذار به ترازهای پایین شدت بیشتری دارند [۱۶]. از طرفی تغییرات شدت گذار بر حسب عدد اتمی دارای بیشینه‌هایی است که در نزدیکی اتم‌ها با پوسته الکترونی بسته قرار دارند. بنابراین تکانه زاویه‌ای ذره با شعاع اتمی در ارتباط است، به طوری که در l های بزرگ برای عناصری که شعاع کوچکی دارند توزیع تکانه زاویه‌ای قطع می‌شود [۷]. همچنین کسلر و همکاران در یک تحقیق که اتم‌های تیتانیوم و منگنز را مورد بررسی قرار دادند [۱۶]، متوجه شدند در تراز $n=14$ توزیع تکانه زاویه‌ای برای تیتانیوم با شعاع 93.2 \AA به صورت آماری $p(l) = 2l+1$ است در حالی که برای اتم منگنز



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار I_{\max} بر حسب عدد اتمی.



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقادیر α_{opt} برای اتم‌های مختلف.

اول این که به داده‌های آنها داده‌های ترکیب کامپتون اضافه شده است. دوم احتمال گیراندازی کائون در ترکیبات دو اتمی و فرایند پر شدن مجدد لایه الکترونی K در شبیه‌سازی لحاظ نشده است. هر چند هر دو شبیه‌سازی رفتار تناوبی را نشان می‌دهند اما نتایج کار حاضر مقدار I_{\max} کمتری را نسبت به کار آنها پیش‌بینی می‌کند که این با مقادیر کوچک‌تر کمیت α (مدل (ب)) که منجر به کم شدن جمعیت کائون‌ها در I ‌های زیاد می‌شود سازگاری بیشتری دارد (شکل ۳). بنابراین فرضیه کاهش سریع گیراندازی در I ‌های زیاد برای بعضی از اتم‌هایی که دارای پوسته الکترونی بسته‌ای هستند صحیح است.

است که با برازش شدت‌های شبیه‌سازی به شدت‌های تجربی به دست می‌آید.

در مدل آماری (الف) ابتدا با در نظر گرفتن مقادیر $5 \leq I_{\max} \leq 29$ برای کائونی که در تراز اولیه گیراندازی شده است، شدت‌های گذار برای هر اتم توسط برنامه شبیه‌سازی به دست آمد، سپس توسط آزمون χ^2 ، بهترین I_{\max} که با داده‌های تجربی توافق خوبی نشان می‌داد برای هر اتم انتخاب شد. گادفری و ویگند نیز یک شبیه‌سازی مشابه را انجام داده‌اند که نتایج آن با نتایج کار حاضر در شکل ۲ مقایسه شده است. شرایط شبیه‌سازی آنها نسبت با کار حاضر ساده‌تر است.

جدول ۴. نسبت بهره‌های نهایی به ازای یک کائون در هر یک از اتم‌های ترکیب کاپتون.

تجربی	مدل						بهره
	۶	۵	۴	۳	۲	۱	
$1,23 \pm 0,35$	۰,۶۹۷	۰,۶۹۳	۰,۶۵۵	۰,۶۸۶	۰,۷۳۶	۰,۶۶۵	$y_{5 \rightarrow 4}^{KC} / y_{5 \rightarrow 4}^{KN}$
$0,84 \pm 0,06$	۰,۶۶۶	۰,۶۶۲	۰,۶۲۵	۰,۶۵۵	۰,۷۰۳	۰,۶۳۵	$y_{6 \rightarrow 5}^{KC} / y_{6 \rightarrow 5}^{KN}$
$0,28 \pm 0,09$	۰,۴۳۵	۰,۴۵۹	۰,۴۷۰	۰,۴۴۸	۰,۵۱۰	۰,۴۲۱	$y_{6 \rightarrow 5}^{KC} / y_{6 \rightarrow 5}^{KO}$
$0,238 \pm 0,192$	۰,۴۴۰	۰,۴۶۴	۰,۴۷۵	۰,۴۵۴	۰,۵۱۶	۰,۴۲۶	$y_{8 \rightarrow 6}^{KC} / y_{8 \rightarrow 6}^{KO}$

جدول ۵. بهره‌های نهایی به ازای یک کائون در هر یک از اتم‌های ترکیب کاپتون.

نسبت	$y_{6 \rightarrow 5}^{KC} / y_{6 \rightarrow 5}^{KN}$	$y_{6 \rightarrow 5}^{KC} / y_{6 \rightarrow 5}^{KO}$	$y_{8 \rightarrow 6}^{KC} / y_{8 \rightarrow 6}^{KO}$	$y_{5 \rightarrow 4}^{KC} / y_{5 \rightarrow 4}^{KN}$
بهره نهایی	۰,۳۵۵	۰,۳۵۱	۰,۵۰۴	۰,۵۲۸
مقدار تجربی	$0,24 \pm 0,19$	$0,28 \pm 0,09$	$0,84 \pm 0,06$	$1,23 \pm 0,35$

کافی است احتمال گیراندازی در اتم، مقادیر جدول ۳ را در بهره به دست آمده از شبیه‌سازی ضرب کنیم. حاصل ضرب این مقادیر برای اتم‌های ترکیب کاپتون در جدول ۴ به همراه مقادیر تجربی آورده شده است.

در بخش ۲ احتمال گیراندازی با بررسی تأثیر مشخصه یونی پیوند محاسبه شده است. حال برای محاسبه نسبت بهره‌های نهایی به ازای یک کائون در هر یک از اتم‌های ترکیب کاپتون مانند قسمت قبل کافی است احتمال گیراندازی در اتم را در مقادیر بهره به دست آمده از شبیه‌سازی ضرب کنیم. مقادیر نهایی برای اتم‌های ترکیب کاپتون در جدول ۵ آورده شده است.

بهره‌های پرتوی ایکس اتم‌های کائونی از جنبه‌های مختلفی مورد بررسی قرار گرفته است. گیراندازی کائون در ترکیب کاپتون با استفاده از مدل‌های موجود بررسی شد. در این بررسی نسبت گیراندازی‌ها در طی دو مرحله محاسبه شده است. مرحله اول نسبت احتمال‌های گیراندازی و مرحله دوم نسبت بهره‌ها به دست آمده است. نتایج در جدول ۴ نشان می‌دهد که مدل مولکول‌های بزرگ مزونی توافق بیشتری با مقادیر تجربی نسبت به سایر مدل‌ها دارد. همچنین اثر مشخصه یونی که عامل گیراندازی کائون در اتم‌های مولکول می‌باشد با روش دینامیک مولکولی محاسبه شده است که با توجه به جدول ۴ و ۵ توافق

در مدل آماری (ب) توزیع تکانه زاویه‌ای به کمیت α بستگی زیادی دارد. هر چه α مقادیر منفی‌تری باشد I_{α} های پایین‌تر پرجمعیت‌تر می‌شوند. این مسئله در شکل ۳ به خوبی نشان داده شده است. با توجه به این که توزیع تکانه زاویه‌ای به شعاع اتم وابسته است سعی کردیم با توجه به داده‌های تجربی برای هر اتم توزیع مناسبی بیابیم. برای این کار به α مقادیر $-0,9$ تا $+0,9$ اختصاص داده و با استفاده از برنامه شبیه‌سازی برای مقادیر مختلف α گذارهای هر اتم به دست آمد و مانند قسمت قبل با آزمون χ^2 ، مقدار α_{opt} بهینه که با مقادیر تجربی سازگاری بهتری نشان دهد برای هر اتم مشخص و نتیجه در شکل ۳ آورده شده است.

۴. نتایج و جمع‌بندی

با استفاده از برنامه شبیه‌سازی گذارهای اتمی، مقادیر نسبت بهره کائونی اتم‌های ترکیب کاپتون $y_{5 \rightarrow 4}^{KC} / y_{5 \rightarrow 4}^{KN}$ ، $y_{6 \rightarrow 5}^{KC} / y_{6 \rightarrow 5}^{KN}$ ، $y_{6 \rightarrow 5}^{KC} / y_{6 \rightarrow 5}^{KO}$ و $y_{8 \rightarrow 6}^{KC} / y_{8 \rightarrow 6}^{KO}$ به ترتیب $0,776$ ، $0,741$ ، $0,562$ و $0,569$ به دست آمده است. توزیع تکانه زاویه‌ای به صورت بهبود یافته ($\alpha = -0,2$) و اولین تراز $n = 3$ در نظر گرفته شده است.

حال برای محاسبه نسبت بهره‌های نهایی به ازای یک کائون

آماری بهتر می‌تواند مقادیر تجربی را توجیه کند. هر چند که هر دو رفتار تناوبی شدت هر گذار خاص را بر حسب عدد اتمی به خوبی توصیف می‌کنند.

بهتری را نسبت به مدل پائولی نشان می‌دهد. در مرحله دوم اثر توزیع تکانه زاویه‌ای بر روی بهره گذارهای اتمی بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که توزیع بهبود یافته نسبت به توزیع

مراجع

15. M J Frisch *et al.*, “*Gaussian 09*”, Inc, Wallingford, CT (2016).
16. L Godfrey and E Wiegand, *Phys. Rev A* **56** (1975) 255.
17. D Kessler *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **18** (1967) 1179.
18. F J Hartmann, “*Proceeding of Electromagnetic Cascade and Chemistry of Exotic atoms*”, Plenum, Press (1990) 127.
19. M Raeisi Gahroei and S Z Kalantari, *Phys. Rev. A* **79** (2009) 012510.
20. S Z Kalantari and M Raeisi Gahroei, *Phys. Rev. C* **81** (2010) 014608.
۲۱. م رئیسی گهرویی، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۱، ۴ (۱۳۹۰) ۳۷۹.
21. M Raeisi Gahroei, *Iranian J. Phys. Res.* **11**, 4 (2012) 379.
22. S Z Kalantari, S Sanayehajari, and M Dayyanikelisani, *Phys. Rev. C* **86** (2012) 024603.
1. E Fermi and E Teller, *Phys. Rev.* **72** (1947) 399.
2. M Conversi, E Pancini, and O Piccioni, *Phys. Rev.* **71** (1947) 209.
3. C J Batty *et al.*, *Physics Reports* **5** (1997) 385
4. P Indelicato, *Physica Scripta* **24** (2004) 122.
5. H Schneuwly, “*Solid State in Atomic Capture of Negative Muons*”, *Proceeding of Exotic Atoms in Condensed Matter*, Springer Proceedings **59** (1992) 3.
6. C E Wiegand and G L Godfrey, *Phys. Rev. A* **9** (1974) 2282.
7. G T Condo, *Phys. Rev. Lett.* **33** (1974) 127.
8. M Bazzi *et al.*, *Nucl. Phys. A* **907** (2013) 69.
9. Z V Krumshstein *et al.*, *Sov. Phys. Journal of Experimental and Theoretical Physics* **27** (1968) 906.
10. H Daniel, *Phys. Rev. Lett.* **35** (1975) 1649.
11. P Vogel *et al.*, *Nucl. Phys. A* **25** (1975) 455.
12. V I Petrukhin *et al.*, *Sov. Phys. Journal of Experimental and Theoretical Physics* **28** (1969) 1151.
13. H Schneuwly *et al.*, *Nucl. Phys. A* **312** (1987) 419.
14. D Jackson, *Phys. Rev. A* **105** (1984) 292.