

تشکیل پوزیترونیوم در ربایش الکترون از مولکول متان

محاسبه سطح مقطع پراکندگی جزیی و کل ازدامنه‌های پراکندگی مرتبه اول الکترونی و بین هسته‌ای

فریده شجاعی*

دانشگاه شهید باهنر کرمان، دانشکده فیزیک

چکیده

در این مقاله با اعمال فرمولبندی سه جسمی با شرایط مرزی تصحیح شده در تقریب مرتبه اول بورن و استفاده از روش مدل الکترون فعال، دامنه الکترونی مرتبه اول و دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول محاسبه شده است. با استفاده از دامنه‌های جزیی، سطح مقطع پراکندگی جزیی و کل، برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با مولکول متان در انرژی‌های میانه، بالا و غیرنسبیتی محاسبه شده، سطح مقطع کل با نتایج تجربی موجود مقایسه شده است. محدوده انرژی برخورد 40 eV تا 2 keV و زاویه پراکندگی پوزیترون 0° تا 180° درجه انتخاب گردیده است. سطح مقطع در چارچوب مرکز جرم محاسبه و به چارچوب آزمایشگاه تبدیل شده است.

کلیدواژگان: پوزیترونیوم، مولکول متان، شرایط مرزی تصحیح شده، ربایش الکترون

مقدمه

تعیین می‌نماید. خاطر نشان می‌شود که منظور از انرژی‌های بالا حتماً سرعت‌های نسبیتی نیستند. در مبحث پراکندگی، انتقال بار از فرآیندهای مهم و در عین حال پیچیده می‌باشد. فرآیند انتقال بار در اختترفیزیک، یونسفر، توسعه لیزرهای اشعه X و پلاسما نقش مهمی دارد [۱، ۲، ۳، ۴]. بررسی نسبتاً دقیق فرآیند ربایش الکترون (از دیدگاه مکانیک کوانتومی) با کار دریسکو^۱ آغاز گردید [۵]. وی استدلال کرد که پراکندگی دوگانه کلاسیکی فرآیندی دو مرحله‌ای بوده و بنابراین متناظر با جمله دوم بورن، در تفسیر مکانیک کوانتومی است، درحالی‌که اولین تقریب بورن متناظر با پراکندگی یگانه است. دریسکو جملات مرتبه اول و دوم بورن در فرآیند ربایش الکترون را محاسبه نمود. سپس ایگراشی^۲ و

پراکندگی یکی از مباحث شناخته شده در فیزیک است که در بسیاری از شاخه‌های آن نیز دارای کاربرد می‌باشد. مهمترین کاربرد پراکندگی در شناخت ماهیت نیروهای موجود در ماده چگال، هسته اتم و اتم است. در آزمایش‌های پراکندگی، محدوده انرژی برخورد را به دو ناحیه برخورد با انرژی کم و برخورد با انرژی بالا تقسیم‌بندی می‌نمایند. اما محدوده این تقسیم‌بندی در فیزیک اتمی و هسته‌ای یکسان نیست. ناحیه انرژی کم در فیزیک هسته‌ای حداقل چند ده مگا الکترون ولت است، در صورتی‌که این ناحیه در فیزیک اتمی در حد الکترون ولت است. محدوده این تقسیم‌بندی را نسبت سرعت پرتابه به سرعت الکترون مقید و فعال در هدف

*نویسنده مسئول: fshojaei@uk.ac.ir

¹ Drisko

² Igarashi

مورخجی [۱۳] تشکیل پوزیترونیم را از مولکول هیدروژن در حالت پایه در تقریب اول بورن مطالعه نموده‌اند. علاوه بر این تحقیقات دیگری نیز در این زمینه صورت گرفته است که به تعدادی از آنها اشاره می‌شود. بیسینگر [۱۵،۱۴] برخورد پروتون با انواع مولکول‌های هیدروکربنی را در محدوده انرژی ۸۰۰ تا ۳۰۰۰ کیلو الکترون‌ولت مطالعه کرده‌است. وارچز [۱۶] برخورد پروتون با اتم و مولکول را مورد بحث قرار داده است. روتمان [۱۷] سطح مقطع، ربایش را برای ۱۰۰ تا ۱۵۰۰ کیلو الکترون‌ولت جهت برخورد C^+ با تعدادی گازاتی و مولکولی اندازه گرفت و مشاهده نمود که سطح مقطع تابعی از طول پیوند برای هدف دو اتمی بوده و به تعداد اتم سازنده هدف مولکولی وابسته می‌باشد. سطح مقطع کل پراکندگی ربایش الکترون در اکسیدکربن و هیدروکربن‌ها در ناحیه انرژی ۰/۶ تا ۲ مگا الکترون‌ولت توسط باهالا [۱۸] گزارش شده‌است. لیبنسکی و همکاران^۴ [۱۹] ترکیبی از پرتو یونی (با بار چندتایی) در محدوده فرکانس رادیویی و روش طیف‌نگاری گسیل فوتون را معرفی کردند، که این اندازه‌گیری انتخاب حالت انتقال بار را برای انرژی‌هایی که به‌طور مستقیم به فیزیک نجوم، پلازما و مدل‌های آنها مرتبط هستند، آسان می‌سازد. ترجی و همکاران^۵ [۲۰] با در نظر گرفتن دینامیک الکترون‌ها و هسته در طی برخورد با اتم‌های هیدروژن-هلیوم و نئون روی مبادله بار در برخورد پروتون (کند) با این اتم‌ها تحقیقاتی انجام داده‌اند. آنها برای افت انرژی الکترونی به سبب کوآنتش حالت‌های تحریک شده، آستانه کمترین انرژی را پیدا کردند و از طرف دیگر دریافتند که سطح مقطع توقف الکترون برای سرعت‌های خیلی کم (انرژی‌های خیلی کم) متناسب با سرعت پرتابه نیست که این ناشی از نظریه گاز الکترونی است. قنبری [۲۱] الگوهای

توشیما^۱ [۶] نشان دادند که سهم جمله دوم بورن در سطح مقطع ربایش الکترون در پراکندگی مستقیم نسبت به سهم سایر جملات بورن در حد مجانبی سرعت‌های بالا، بیشتر است. برای به‌دست آوردن جواب دقیق سطح مقطع اتمی برخورد و حل بسیاری از مسائل در نظریه برخورد از روش تقریب استفاده می‌گردد که هرکدام از این روش‌های تقریبی، در ناحیه خاصی قابل کاربرد هستند. یکی از این تقریب‌ها، تقریب ضربه‌ای^۲ است. در تقریب ضربه‌ای، زمان دور زدن الکترون در مدار اولیه‌اش نسبت به زمان برهم‌کنش بین هسته فرودی و هدف، بزرگ فرض می‌شود. این تقریب توسط بریگز^۳ [۷] برای انتقال بار به‌کار رفته است. شمار کارهای نظری انجام گرفته بر روی ربایش الکترون از هدف‌های مولکولی به‌دلیل فرآیند چهارجسمی بودن انتقال بار در برخورد یون-مولکول در ساده‌ترین شکل خود، پیچیدگی‌های کار با توابع موج مولکول‌های هدف، وابستگی سطح مقطع برخورد به جهت‌گیری مولکول، تعداد ذرات درگیر برهم‌کننده بیشتر، در مقایسه با موارد مربوط به هدف‌های اتمی کمتر است. علیرغم پیچیدگی‌های ذکر شده مطالعاتی به‌صورت تئوری برای بررسی برخورد پروتون، پوزیترون و الکترون با مولکول صورت گرفته است. این بررسی‌ها بر اساس تقریب اوپنهایمر-بریکمن-کرامرز [۸]، پارامتر برخورد [۹]، فرمولبندی موج واپیچیده بورن [۱۰]، روش مسیر کلاسیکی مونت کارلو [۱۱]، و روش اولین تقریب بورن با شرایط مرزی تصحیح شده [۱۲] می‌باشد. در تمام تقریب‌های ذکر شده پتانسیل‌های برهم‌کنش بین الکترون-پرتابه، الکترون-هدف و هدف-پرتابه نقش اساسی را ایفا می‌کنند و هر کدام نتایج حاصل از اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی را تا حدودی توجیه می‌کنند. سورال و

⁴ Lubinski and et al

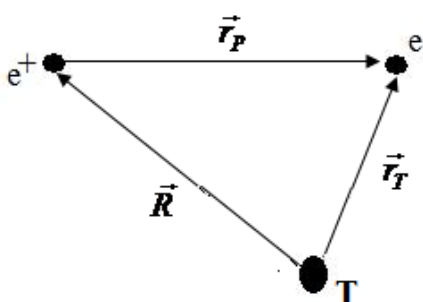
⁵ Truji and et al

¹ Toshima

² Impulse-Approximation

³ Briggs

سرعتی برابر با سرعت پرتابه در حال انتشار است ایجاد خواهد شد. هندسه این برخورد در شکل ۱ نشان داده شده است. بردار موقعیت الکترون فعال و پوزیترون نسبت به مرکز جرم هدف، به ترتیب با \vec{r}_p و \vec{R} و بردار موقعیت الکترون فعال نسبت به پوزیترون با \vec{r}_T نشان داده شده است.



شکل ۱. هندسه برخورد پوزیترونیم با متان.

با اعمال فرمول‌بندی تقریب بورن با شرایط مرزی تصحیح شده، به مسئله ربایش الکترون، و شکافتن مسئله به برخوردهای دو جسمی، می‌توان معادله ماتریسی:

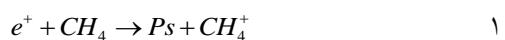
$$\begin{bmatrix} \hat{V}_{Te} \\ \hat{V}_{Pe} \\ \hat{V}_{PT} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \hat{V}_{Pe} \\ \hat{V}_{PT} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \hat{V}_{Te} & \hat{V}_{Te} \\ \hat{V}_{Pe} & 0 & \hat{V}_{Pe} \\ \hat{V}_{PT} & \hat{V}_{PT} & 0 \end{bmatrix} \times G_0^+ \begin{bmatrix} \hat{V}_{Te} \\ \hat{V}_{Pe} \\ \hat{V}_{PT} \end{bmatrix} \quad (2)$$

را برای عملگر گذار \hat{V}_a ($a = Pe, Te, PT$) کانال مورد نظر حل کرد. \hat{V}_a عملگر برهم‌کنش برای پراکندگی دو ذره می‌باشد، در حالی که ذره سوم آزادانه منتشر می‌شود و $G_0^+(E)$ عملگر تابع گرین برای انرژی کل E می‌باشد. اهمیت اساسی این معادلات در بودن صفرها در امتداد قطر اصلی ماتریس مربعی می‌باشد که گویای این واقعیت است که پراکندگی چندگانه دو ذره یکسان، بدون انتشار آزاد ذره سوم رخ نمی‌دهد، یا به عبارت دیگر جفت‌شدگی هر \hat{V}_a با

تداخلی نوسانی را در برخورد پروتون با مولکول هیدروژن مورد مطالعه قرار داده‌است. در این مقاله نویسنده سعی دارد که با استفاده از مدل الکترون مستقل و اعمال آن به روش اولین تقریب بورن با شرایط مرزی تصحیح شده، سطح مقطع دیفرانسیلی برخورد پوزیترون با مولکول متان را محاسبه نماید. از آنجا که فرآیند وارد نمودن تقریب‌های بالاتر و تجزیه و تحلیل تأثیر جهت‌گیری مولکول بر روی آن، طولانی و پیچیده است، لذا نتایج کار در چند مرحله و طی چند مقاله ارائه خواهد شد.

تئوری

فرآیند تشکیل پوزیترونیم از مولکول متان را می‌توان به صورت:



نشان داد. اتم پوزیترونیم (Ps) می‌تواند در حالت یکتایی (پارا-پوزیترونیم^۱) یا در حالت سه‌تایی (اورتو-پوزیترونیم^۲) باشد. در غیاب نیروهای وابسته به اسپین، سطح مقطع برای تشکیل اورتو-پوزیترونیم سه برابر پارا-پوزیترونیم می‌باشد. در فرآیند ۱ در مدل الکترون فعال فرض می‌شوند که یک الکترون از الکترون‌های هدف (متان) فعال بوده و دیگر الکترون‌ها همراه با هسته ساکن فرض می‌شوند. لذا فرآیند با یک مسئله سه جسمی تخمین زده می‌شود. در این برخورد سه ذره هدف (با جرم M_T)، پرتابه (با جرم M_P) و الکترون (با جرم m) سهیم هستند. در کانال فرآیند ربایش الکترون، ابتدا الکترون به هدف مقید است و در برخوردی که بین هدف و پرتابه صورت می‌گیرد هدف یونیزه می‌شود. حالت یونیزه الکترون شامل بسته‌ای از امواج کروی کولنی و همچنین بسته دیگری از امواج تخت است که در جهت پرتابه و با همان سرعت پیش می‌روند. اندکی دورتر از هدف سیستمی مقید که با

² Orto-Positronium

¹ Para-Positronium

$\langle \vec{R}_T, \vec{r}_T | \varphi_i \rangle = e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_T} \varphi_i(\vec{r}_T)$
 $\langle \vec{R}_P, \vec{r}_P | \varphi_f \rangle = e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_P} \varphi_f(\vec{r}_P)$

داده می‌شوند. در معادله ۷ φ_f و φ_i به ترتیب حالات قیدی اولیه و نهائی، \vec{K}_f و \vec{K}_i بردارهای موج ذرات سنگین اولیه و نهائی می‌باشند. مختصات پرتابه نسبت به هدف در کانال اولیه با \vec{R}_T و در کانال نهایی با \vec{R}_P نشان داده شده‌است. در فرآیند برخورد ذکر شده حالت اولیه سیستم به صورت [۲۲]:

$$\varphi_i(\vec{r}) = a_{1s} \left\{ (4\delta^3)^{1/2} \sum_{\alpha=1}^4 e^{-\delta|\vec{r}-\vec{R}_\alpha|} + a_{2s} (4\beta^3)^{1/2} e^{-\beta r} + a_{3s} \left(\frac{4\gamma^5}{3} \right)^{1/2} r e^{-\gamma r} \right\} Y_{00}(\hat{r})$$

انتخاب می‌شود. که در فضای اندازه حرکت به شکل:

$$\varphi_{nlm}(\vec{P}) = Y_{00}^*(\hat{P}) (a_{1s} (4\delta^3)^{1/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\alpha=1}^4 e^{i\vec{P} \cdot \vec{R}_\alpha} \times \int e^{-\delta|\vec{x}_\alpha|} j_0(PX_\alpha) X_\alpha^2 dX_\alpha + a_{2s} (4\beta^3)^{1/2} 4\pi \times \int e^{-\beta r} j_0(Pr) r^2 dr + a_{3s} \left(\frac{4\gamma^5}{3} \right)^{1/2} \times 4\pi \int r e^{-\gamma r} j_0(Pr) r^2 dr)$$

نوشته می‌شود، که ضرایب در آن عبارتند از:

$$\begin{aligned} a_{1s} &= -0.005, & \delta &= 1.17, \\ a_{2s} &= 1, & \beta &= 5.68, \\ a_{3s} &= 0.025, & \gamma &= 1.76, \end{aligned}$$

$j_0(r)$ تابع بسل کروی و $Y_{lm}(\hat{P})$ تابع هماهنگ کروی است. \vec{R}_α فاصله بین هر پیوند اتم کربن با اتم‌های هیدروژن در مولکول متان است. عبارت $\sum_{\alpha=1}^4 e^{i\vec{P} \cdot \vec{R}_\alpha}$ در رابطه ۹ به ساختار متان و دستگاه مختصاتی که اختیار می‌گردد بستگی دارد. با توجه به انتخاب سرعت فرودی پرتابه در امتداد محور Z ، محل اتم‌های هیدروژن بستگی به جهت گیری مولکول نسبت به این محور دارد. لذا حالت‌های مختلفی را می‌توان برای این مسئله در نظر گرفت. \vec{J} و \vec{K} به ترتیب

خودش از معادلات حذف شده است. معادله به روش تکرار نیومن حل شده و جواب اولین مرتبه آن $\widehat{V}_a^{(1)} = \widehat{V}_a (a = Pe, PT)$ و $\widehat{V}_{Te}^{(1)} = 0$ و جملات مرتبه بالاتر $\widehat{V}_a^{(n)} (n > 1)$ با جانشین کردن $\widehat{V}_a^{(n-1)}$ به سمت راست معادله و انجام ضرب ماتریسی به دست می‌آید. برحسب \widehat{V}_a ، عملگر برهم‌کنش $\widehat{V}_c^{(2)}$ برای فرآیند ربایش الکترون به صورت:

$$\begin{aligned} \widehat{V}_c^{(2)} &\approx [V_{Pe} + \widehat{V}_{Te} G_0^+(E) \widehat{V}_{Pe}] + \\ &[\widehat{V}_{PT} + \widehat{V}_{Te} G_0^+(E) \widehat{V}_{PT} + \widehat{V}_{PT} G_0^+(E) \widehat{V}_{Pe}] \\ \widehat{V}_c^{(2)} &\equiv \widehat{V}_e + \widehat{V}_n \end{aligned}$$

داده می‌شود. در معادله ۳، عملگر گذار به دو جمله کاهش داده می‌شود، که به ترتیب نمایانگر انتقال مستقیم الکترون \widehat{V}_e و پراکندگی بین هسته‌ای \widehat{V}_n می‌باشد. پتانسیل دوجسمی در این کانال، پتانسیل بلند برد می‌باشند. با تشکیل عناصر ماتریس $\widehat{V}_e + \widehat{V}_n$ ، بین حالات پراکندگی مجانبی اولیه و نهائی، دامنه ربایش الکترون، در انرژی E به شکل:

$$\begin{aligned} F_{CBC}(E) &= \langle \varphi_f | \widehat{V}_e + \widehat{V}_n | \varphi_i \rangle \\ &\equiv F_e + F_n \end{aligned}$$

نوشته می‌شود. F_e موجود در رابطه ۴ شامل دو جمله، یکی جمله اولین مرتبه الکترونی و دومی مربوط به دومین مرتبه الکترونی می‌باشد.

$$\begin{aligned} F_e &= \langle \varphi_i | V_{Pe} | \varphi_i \rangle \\ &+ \langle \varphi_f | \widehat{V}_{Te} G_0^+(E) \widehat{V}_{Pe} | \varphi_i \rangle \end{aligned}$$

F_n موجود در رابطه ۴ شامل سه جمله، یکی جمله اولین مرتبه بین هسته‌ای و دو تا جمله مربوط به اولین و دومین، مرتبه دوم بین هسته‌ای می‌باشند.

$$\begin{aligned} F_n &= \langle \varphi_f | \widehat{V}_{PT} | \varphi_i \rangle + \\ &\langle \varphi_f | \widehat{V}_{Te} G_0^+(E) \widehat{V}_{PT} | \varphi_i \rangle \\ &+ \langle \varphi_f | \widehat{V}_{PT} G_0^+(E) \widehat{V}_{Pe} | \varphi_i \rangle \end{aligned}$$

در روابط ۴ و ۵ حالات مجانبی با روابط:

$$N_{n\ell} = \frac{(2\pi)^{3/2} [2^{4\ell+5} n(n-\ell-1)!]}{([\pi(n+\ell)!]^{1/2} \ell! (\alpha_n^2)^{(2\ell+5)/2}} \quad ۱۵$$

$$\alpha_n = \mu Z / n$$

همچنین $C_{n1}^\ell(x)$ تابع چجن پاور می‌باشد. برای محاسبه سطح مقطع دیفرانسیلی نیاز به دامنه‌های جزئی پراکندگی بوده که در این مقاله به محاسبه دامنه‌های پراکندگی مرتبه اول پرداخته خواهد شد.

دامنه الکترونی مرتبه اول بورن

معادله قسمت الکترونی دامنه پراکندگی را نشان می‌دهد.

$$F_e = F_e^{(1)} + F_e^{(2)} \quad ۱۶$$

دامنه الکترونی مرتبه اول $F_e^{(1)} = \langle \varphi_f | V_{pe} | \varphi_i \rangle$ بورن بوده که شامل برهم‌کنش بین الکترون و پرتابه می‌باشد، در این دامنه هسته نقشی ندارد. این جمله متناظر با پراکندگی یگانه است و همان مکانیزم برهم‌کنش الکترونی در فرآیند رایش الکترون توسط پرتابه نامیده شده است. جمله دوم الکترونی، جمله مرتبه دوم می‌باشد. شکل انتگرالی دامنه الکترونی مرتبه اول $(F_e^{(1)})$ عبارت است از:

$$F_e^{(1)} = (2\pi)^{3/2} \tilde{\varphi}_i(-\vec{J}) \int dk_f \tilde{\varphi}_f^*(k_f) \tilde{V}_{pe}(k_f - \vec{K}) \quad ۱۷$$

که با استفاده از تبدیل فوریه پتانسیل و بسط هماهنگ‌های کروی و در نظر گرفتن شکل پتانسیل برای دامنه مرتبه اول رابطه:

$$F_e^{(1)} = -(2^3)^{1/2} \varphi_i(-\vec{J}) \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{(2\ell+1)!} \left[\frac{1}{K^{2\ell+2}} \times \int_0^K dk_f R_{10}(k_f) k_f^{2\ell+2} + K^{2\ell} \int_K^{\infty} dk_f R_{10}(k_f) \frac{1}{k_f^{2\ell}} \right] \quad ۱۸$$

حاصل شده است. با جانشین کردن تابع موج فضای اندازه حرکت حالت نهایی (اتم پوزیترونیم) در رابطه ۱۸، رابطه نهایی به صورت زیر نوشته می‌شود:

به عنوان تکانه انتقال یافته به یون‌های هدف و پرتابه در طول برخورد به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\vec{J} = \alpha \vec{K}_i - \vec{K}_f \quad ۱۱$$

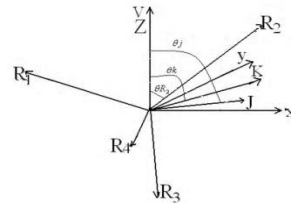
$$\vec{K} = \beta \vec{K}_f - \vec{K}_i \quad ۱۲$$

که در آن با نسبت‌های جرمی α و β عبارتند از:

$$\alpha = \frac{M_T}{(m + M_T)} \quad ۱۳$$

$$\beta = \frac{M_P}{(m + M_P)}$$

دو بردار اندازه حرکت \vec{J} و \vec{K} و نیز جهت‌گیری مولکول در یک حالت خاص در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲. جهت‌گیری نسبی مولکول و بردارهای \vec{K} و \vec{J} و سرعت پرتابه \vec{V} در چارچوب آزمایشگاه.

در انجام محاسبات از بین جهاتی را که مولکول می‌تواند در فضا نسبت به جهت پرتابه اختیار کند سه جهت متمایز انتخاب شده است. این سه جهت، با توجه به اینکه مولکول دارای تقارن کروی است به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که امکان قرار گرفتن هر یک از اتم‌های هیدروژن در مسیر حرکت پرتابه باشد. در نهایت روی کل جهات متوسط گیری صورت گرفته است. قسمت شعاعی تابع موج نهایی در فضای اندازه حرکت به صورت زیر است:

$$R_{n\ell}(k) = N_{n\ell} \frac{k^\ell}{(k^2 + \alpha_n^2)^{\ell+2}} \times C_{n-\ell-1}^{\ell+1} \left(1 - \frac{2\alpha_n^2}{k^2 + \alpha_n^2} \right) \quad ۱۴$$

که در آن:

شکل انتگرالی دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول ($F_n^{(1)}$) عبارت است از:

$$F_n^{(1)} = (2\pi)^{3/2} \int d\vec{k} \varphi_f^*(\vec{k} + \vec{K}) \varphi_i(\vec{k} - \vec{J}) V_{PT}(\vec{k}) \quad 21$$

در سیستم مرکز جرم اندازه حرکت کل صفر می‌باشد. بنابراین سهم الکترون از اندازه حرکت برابر با

$$-\frac{m}{m+M_T} \vec{K}_i \quad \text{و سهم هدف از اندازه حرکت برابر با}$$

$$-\frac{M_T}{m+M_T} \vec{K}_i \quad \text{می‌باشد و نهایت در کانال خروجی}$$

الکترون به پوزیترون مقید شده و پوزیترونیم (Ps) را تشکیل می‌دهد. سهم الکترون از اندازه حرکت نهایی

$$\text{برابر با } \frac{m}{m+M_p} \vec{K}_r \quad \text{و سهم پوزیترون از اندازه حرکت}$$

نهایی برابر با $\frac{M_p}{m+M_p} \vec{K}_r$ خواهد بود، در سیستم

مرکز جرم اندازه حرکت هسته هدف برابر با $-\vec{K}_r$ می‌باشد. براساس قوانین مکانیک کلاسیک به سادگی می‌توان نشان داد که بین تغییر اندازه حرکت انتقالی هر کدام از سه ذره پوزیترون، هدف و الکترون که به ترتیب با \vec{K} ، \vec{J} و \vec{T} نشان داده می‌شوند، رابطه:

$$\vec{J} + \vec{K} + \vec{T} = \vec{0} \quad 22$$

برقرار است. با استفاده از رابطه ۲۲ و یک تغییر متغیر، دامنه مرتبه اول هسته‌ای به شکل:

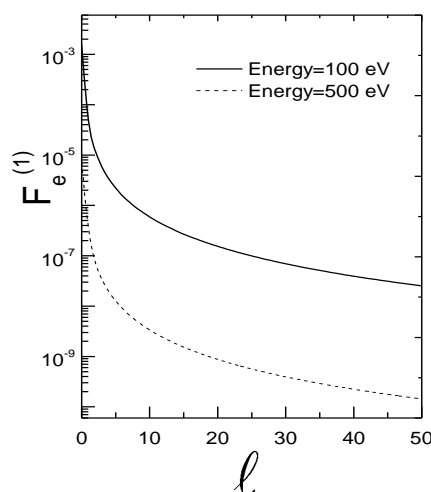
$$F_n^{(1)} = (2\pi)^{3/2} \int d\vec{U} \varphi_f^*(\vec{U} - \vec{V}_f) \varphi_i(\vec{U}) V_{PT}(\vec{U} + \vec{J}) \quad 23$$

در می‌آید که در آن V_{PT} به صورت پتانسیل برهم‌کنش دوجسمی تعریف می‌شود. در مقاله [۲۳] پتانسیل مؤثری که توسط الکترون در برهم‌کنش با متان مشاهده می‌شود، با حل معادله شرودینگر در مدل پتانسیل مؤثر و الکترون فعال به دست آمده است. به دلیل اینکه در طول برخورد، فرض بر این است که ساختار مولکول متان در طول برخورد تغییر نمی‌کند، این پتانسیل مؤثر با پتانسیل V_{PT} برابر، ولی علامت آن مثبت می‌باشد.

معادله ۲۳ را به شکل زیر می‌توان باز نویسی نمود:

$$F_e^{(1)} = - \left[\frac{3.19_2 F_1[2, 3/2 + \ell, 5/2 + \ell, -1/k^2]}{k^3 (2\ell + 1)(3 + 2\ell)} + \frac{3.19_2 F_1[2, 3/2 + \ell, 5/2 + \ell, -k^2]}{(2\ell + 1)(3 + 2\ell)} \right] (2)^{3/2} \varphi_i(-\vec{J}) \quad 19$$

رابطه ۱۹ به ℓ و k بستگی دارد. برای دو انرژی مختلف، در شکل ۳ این دامنه پراکندگی برای ℓ های مختلف رسم شده است، چنان‌که از شکل ۳ مشخص است، برای زوایای پراکندگی مختلف، تنها جمله اول غالب است و دامنه به ازاء $\ell = 0$ بیشترین مقدار را دارد. در محاسبات برای ℓ های متفاوت، دامنه محاسبه شده و بعد میانگین‌گیری شده است.



شکل ۳. دامنه پراکندگی برای دو انرژی مختلف.

دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول

معادله ۶ قسمت بین هسته‌ای دامنه پراکندگی بوده

$$F_n = F_n^{(1)} + F_n^{(2)} + F_n^{(3)} \quad 20$$

که در آن $F_n^{(1)} = \langle \varphi_f | \widehat{V}_{PT} | \varphi_i \rangle$ دامنه بین هسته‌ای در برگیرنده پراکندگی هسته‌ای مرتبه اول و شامل برهم‌کنش بین هدف و پرتابه می‌باشد، در این دامنه الکترون نقشی ندارد. این جمله متناظر با فرآیند رودرو است. بقیه جملات دامنه‌های مرتبه بالاتر می‌باشند. در این مقاله این جمله‌ها محاسبه نمی‌گردند.

که در آن:

$$F_n^{(1)} = I_1 + I_2 \quad 24$$

که در آن I_1 و I_2 عبارتند از:

$$\zeta = \frac{(1 + \tau^2 + 2\tau \cos(\theta))^{3/2}}{(1 + \tau \cos(\theta))} \quad 30$$

$$I_1 = (2\pi)^{3/2} \int d\vec{U} \phi_f^*(-\vec{V}_f) \phi_i(\vec{U}) V_{PT}(\vec{J}) \quad 25$$

$$I_2 = (2\pi)^{3/2} \int d\vec{W} \phi_f^*(\vec{W}_f) \phi_i(\vec{V}_f) V_{PT}(\vec{K}) \quad 26$$

و $\tau = M_p / M_T$ است، θ زاویه پراکندگی می‌باشد.

با جایگزینی توابع موج اولیه و نهایی و برهم‌کنش پرتابه و هدف در رابطه ۲۵ و ۲۶، انتگرال‌ها به روش عددی محاسبه می‌شوند.

نتایج

در این بخش نتایج محاسبه دامنه‌های پراکندگی مرتبه اول الکترونی و بین هسته‌ای در برخورد پوزیترون با مولکول متان، برای سه انرژی مختلف آورده شده است. دامنه‌های جزئی پراکندگی در چارچوب مرکز جرم سیستم سه‌ذره‌ای محاسبه شده‌اند و گستره زاویه‌ای بین صفر تا ۱۸۰ درجه منظور شده است. شکل ۴الف، Δ و Δ پ به ترتیب مقدار مطلق دامنه الکترونی مرتبه اول برخورد پوزیترون با انرژی‌های فرودی ۵۰۰ الکترون ولت (متناظر با سرعت ۶٫۴۰ a.u.)، ۱۰۰۰ الکترون ولت (متناظر با سرعت ۸٫۵۷ a.u.) و ۲۰۰۰ الکترون ولت (متناظر با سرعت ۱۲٫۱۲ a.u.) در حالت زمینه و گذار به حالت نهایی را نشان می‌دهند. اندازه دامنه با بالا رفتن انرژی کاهش می‌یابد، فاز این دامنه صفر است.

سطح مقطع پراکندگی

اکنون با معلوم بودن دامنه‌های پراکندگی جزئی مرتبه اول، دامنه پراکندگی کلی در مرتبه اول به صورت:

$$F_{CBC}(E) = F_e^{(1)} + F_n^{(1)} \quad 27$$

نوشته می‌شود. با استفاده از رابطه فوق می‌توان سطح مقطع جزئی برخورد را در سیستم آزمایشگاه و مرکز جرم تعیین نمود.

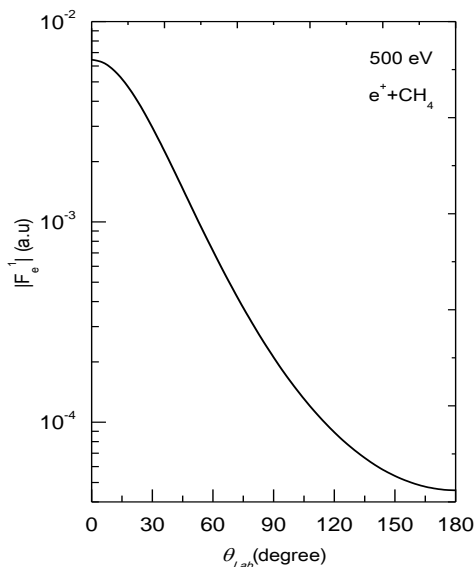
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{cm} = \frac{v_i v_f K_f}{4\pi^2 K_i} |F_{CBC}(E)|^2 \quad 28$$

پارامترهای موجود در رابطه ۲۸ جرم‌های کاهش یافته در کانال اولیه و نهایی می‌باشند.

$$v_i = \frac{M_p(m + M_T)}{m + M_T + M_p}$$

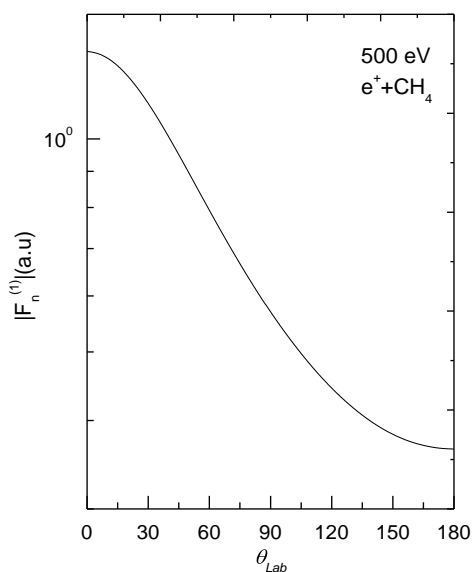
$$v_f = \frac{M_T(m + M_p)}{m + M_T + M_p}$$

سطح مقطع جزئی برخورد در چارچوب آزمایشگاه بر طبق رابطه زیر به دست می‌آید:

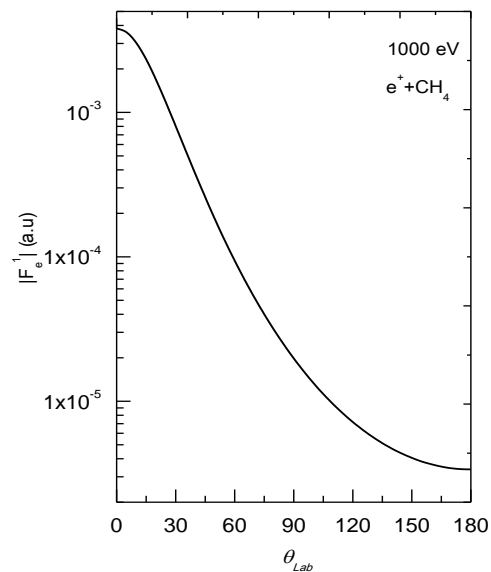


شکل ۴الف. مقدار مطلق دامنه الکترونی مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با متان در انرژی فرودی ۵۰۰ الکترون ولت.

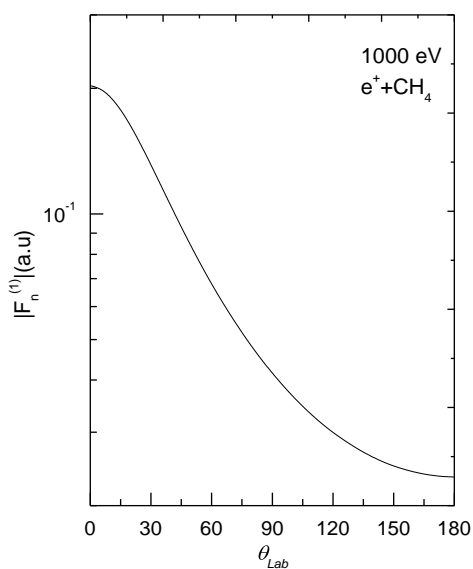
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{lab} = \zeta \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{cm} \quad 29$$



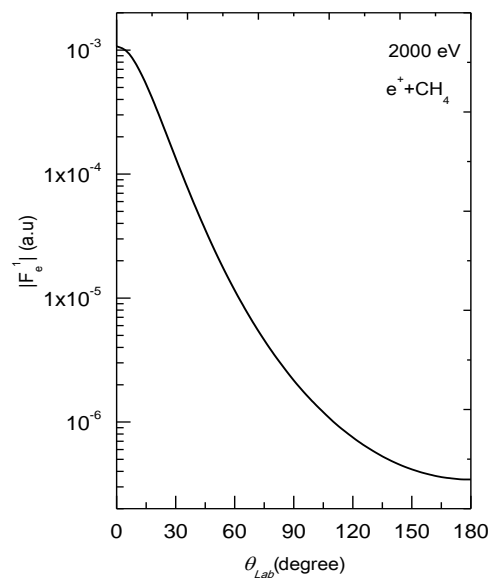
شکل ۵الف. مقدار مطلق دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با انرژی فرودی ۵۰۰ الکترون‌ولت.



شکل ۵ب. مقدار مطلق دامنه الکترونی مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با متان در انرژی فرودی ۱۰۰۰ الکترون‌ولت.



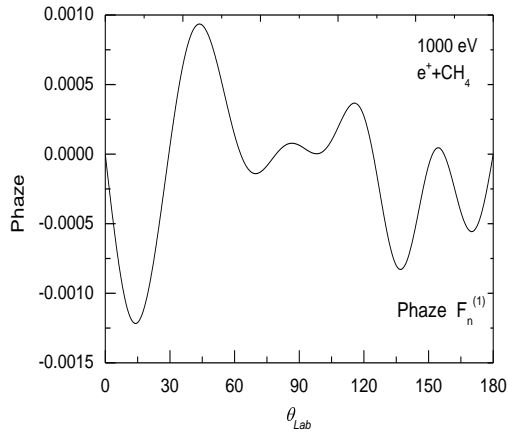
شکل ۵ب. مقدار مطلق دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با انرژی فرودی ۱۰۰۰ الکترون‌ولت.



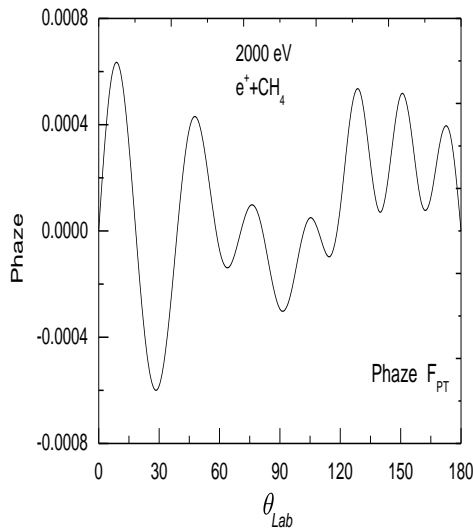
شکل ۵ب. مقدار مطلق دامنه الکترونی مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با متان در انرژی فرودی ۲۰۰۰ الکترون‌ولت.

شکل‌های ۵الف، ۵ب و ۵پ به ترتیب مقدار مطلق دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول، برای برخورد پوزیترون با انرژی‌های فرودی ۵۰۰ الکترون‌ولت، ۱۰۰۰ الکترون‌ولت و ۲۰۰۰ الکترون‌ولت در حالت زمینه و گذار به حالت نهایی را نشان می‌دهند.

با افزایش انرژی تعداد زوایا بیشتر می‌گردد، چون این دامنه در اثر برهم‌کنش بین پرتابه و هدف ایجاد می‌شود.

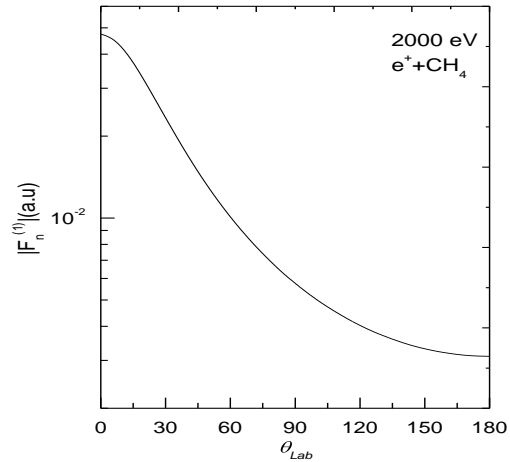


شکل ۷. فاز دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با انرژی فرودی ۱۰۰۰ الکترون‌ولت.



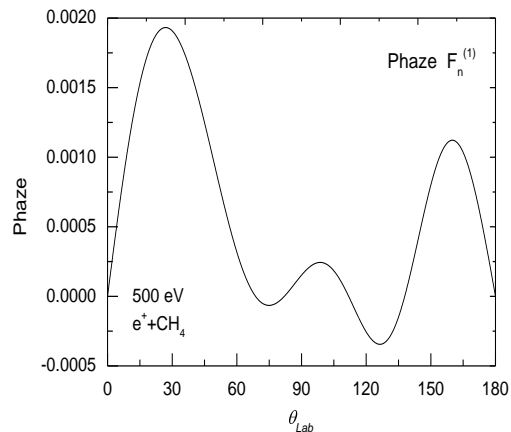
شکل ۸. فاز دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با انرژی فرودی ۲۰۰۰ الکترون‌ولت.

در شکل ۹ دامنه پراکندگی و در شکل ۱۰ سطح مقطع پراکندگی جزئی در انرژی‌های مختلف رسم شده است. همان‌گونه که از نمودار واضح است با بالارفتن انرژی دامنه و سطح مقطع کاهش می‌یابد. برای واضح بودن تغییر رفتار دامنه، در گوشه شکل ۹ نمودار دامنه در انرژی ۲۰۰۰ الکترون‌ولت رسم شده است. در شکل ۱۱



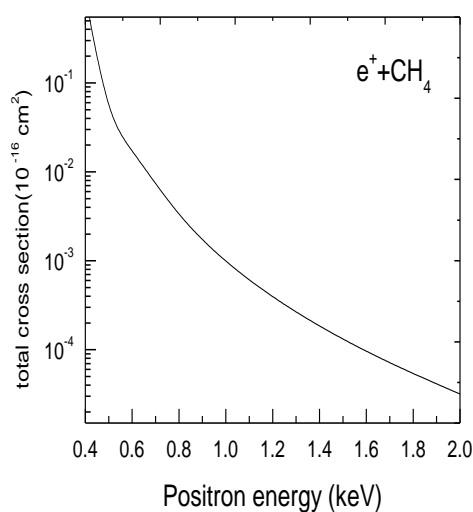
شکل ۵. مقدار مطلق دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با انرژی فرودی ۲۰۰۰ الکترون‌ولت.

در شکل‌های ۶ تا ۸ فاز دامنه پراکندگی مرتبه اول بین هسته‌ای رسم شده است. در تمام انرژی‌ها تغییر فاز بخوبی مشهود است، با بالا رفتن انرژی تغییر فازها بیشتر می‌شود.



شکل ۶. فاز دامنه بین هسته‌ای مرتبه اول برای برخورد پوزیترون با انرژی فرودی ۵۰۰ الکترون‌ولت.

با بررسی در نتایج مشاهده می‌شود که در قسمت موهومی این دامنه تداخل‌هایی در اثر وجود مراکز پراکندگی کربن و هیدروژن‌ها دیده می‌شود که به دلیل بزرگی قسمت حقیقی نسبت به موهومی این تداخل‌ها در دامنه گم می‌شوند. در انرژی ۵۰۰ الکترون‌ولت تغییر فازها در زوایای ۳۰، ۹۰ و ۱۲۰ درجه دیده می‌شود که



شکل ۱۱. سطح مقطع پراکندگی کل برای برخورد پوزیترون با متان در انرژی‌های متفاوت.

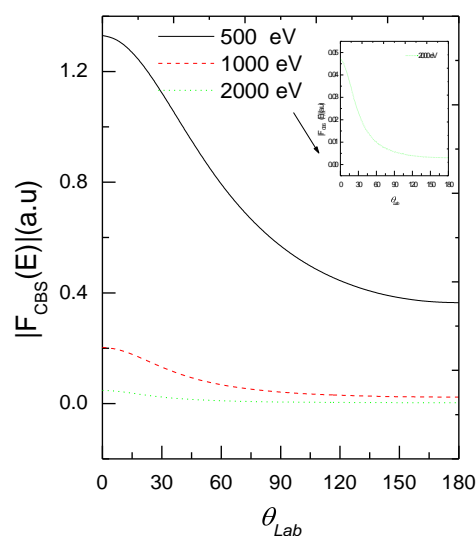
جدول ۱. سطح مقطع کل پراکندگی برای الف) کار جاری، ب) مرجع ۲۴، پ) مرجع ۲۵.

انرژی (eV)	سطح مقطع کل (a.u)		
	الف	ب	پ
۴۰۰	۳٫۴	۱٫۷۰	۱٫۱۴
۵۰۰	۰٫۳۱	۰٫۷۱	۱

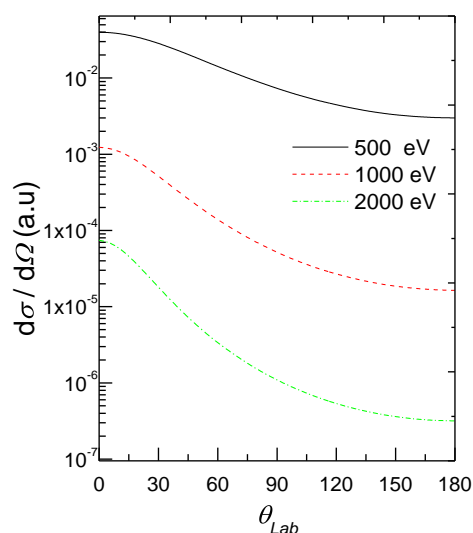
نتیجه‌گیری

در این کار سطح مقطع جزئی و کل ربایش الکترون از مولکول متان توسط پوزیترون مورد مطالعه قرار گرفته است. به‌ازای انرژی‌های مختلف سطح مقطع جزئی متفاوت بوده و با بالاتر رفتن انرژی این پارامتر کاهش می‌یابد. به‌دلیل اعتبار تقریب اول برای انرژی‌های بالا، سطح مقطع کل پراکندگی در انرژی‌های پایین، با داده‌های تجربی تفاوت دارد، در انرژی‌های بالاتر از ۵۰۰ الکترون ولت داده‌ای برای مقایسه وجود نداشت.

سطح مقطع کل پراکندگی برحسب انرژی رسم شده است، البته مشاهده می‌شود که با بالا رفتن انرژی سطح مقطع کل کاهش می‌یابد. در جدول ۱ سطح مقطع کل پراکندگی با نتایج تجربی قابل دسترس مقایسه شده است. تفاوت در نتایج می‌تواند به‌دلیل در نظر نگرفتن جملات بالاتر باشد.



شکل ۹. دامنه پراکندگی برای برخورد پوزیترون با انرژی‌های متفاوت.



شکل ۱۰. سطح مقطع پراکندگی جزئی با انرژی‌های متفاوت.

مرجع‌ها

- [11] L. Meng, C.O. Reinhold, R.E. Olson, Subshell electron capture in collisions of fully stripped ions with He and H₂ at intermediate energies, *Physical Review A* 42 (1990) 5286-5291.
- [12] E. Ghanbari-Adivi, Two-center interference effects on the electron capture process by alpha particles from molecular hydrogens, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 267 (2009) 3319-3322.
- [13] D.P. Sural, S.C. Mukherjee, Electron capture by positrons from molecular hydrogen, *Physica* 49 (1970) 249-260.
- [14] G. Bissinger, J.M. Joyce, G. Lapicki, R. Laubert, S.L. Varghese, Failure of cross-section additivity for electron capture from hydrocarbon gases to bound states of hydrogen ions, *Physical Review Letters* 49 (1982) 318-322.
- [15] S.L. Varghese, G. Bissinger, J.M. Joyce, R. Laubert, Atomic total electron-capture cross section and S-bearing molecular gases, *Physical Review A* 31 (1985) 2202-2209.
- [16] S.L. Varghese, Electron capture phenomena in proton-atom and proton-molecule collisions, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 24 (1987) 115-118.
- [17] L.M. Rottmann, R. Bruch, P. Neill, R. D. Dubois, L.H. Toburen, Single-electron capture by 100-1500-keV C⁺ ions in several atomic and molecular targets, *Physical Review A* 46 (1992) 3883-3888.
- [18] R.P. Bahala, F.D. McDaniel, Carbon K-shell X-ray and Auger-electron production in hydrocarbons and carbon oxides by 0.6-2 MeV D⁺ ions, *Physical Review A* 35 (1987) 3655-3662.
- [19] G. Lubinski, Z. Juhasz, R. Morgenstern, R. Hoekstra, Low-energy state-selective
- [1] R. Shakeshaft, L. Spruch, Mechanisms for charge transfer (or for the capture of any light particle) at asymptotically high impact velocities, *Reviews of Modern Physics* 51 (1979) 369-406.
- [2] A. Dalgarno, Atom-atom collision processes in astrophysics: theoretical studies, *Reviews of Modern Physics* 39 (1967) 850-857.
- [3] A. Dalgarno, Atomic physics from atmospheric and astrophysical studies, *Advances in Atomic and Molecular Physics* 15 (1979) 37-76.
- [4] L. Liu, J.G. Wang, R.K. Janev, Dynamics of He²⁺+H (1s) excitation and electron-capture processes in Debye plasmas, *Physical Review A* 77 (2008) 032709.
- [5] R.M. Drisko, Ph.D. Thesis, *Cornegie Institute of Technology* (1955).
- [6] A. Igarashi, N. Toshima, Second-order Born cross sections for positronium formation in positron-hydrogen collisions, *Physical Review A* 47 (1993) 2386-2388.
- [7] J.S. Briggs, Impact-parameter formulation of the impulse approximation for charge exchange, *Journal of Physics. B* 10 (1977) 3075-3089.
- [8] T.F. Tuan, E. Gerjuoy, Charge Transfer in Molecular Hydrogen, *Physical Review* 117 (1960) 756-762.
- [9] S.E. Corchs, R.D. Rivarola, J.H. McGuire, Impact-parameter formulation for electron capture from molecular targets, *Physical Review A* 47 (1993) 3937-3944.
- [10] S.E. Corchs, R.D. Rivarola, J.H. McGuire, Y.D. Wang, Distorted-wave models for single-electron capture from molecular targets by the impact of bare ions, *Physical Review A* 47 (1993) 201-207.

charge transfer by multiply charged ions, *Physical Review Letters* 86 (2001) 616-619.

[20] R. Cabrera-Truji, J.R. Sabin, Y. Ohrn, E. Deumens, Impact parameter dependence of electronic and nuclear energy loss, *Physical Review B* 168 (2000) 484-492.

[21] E. Ghanbari Adivi, Oscillations of the p-H₂ single-electron capture cross sections due to two-centre interference, *Journal of*

Physics B: Atomic and Molecular Physics 42 (2009) 095207.

[22] J.N. Levine, *Quantum Chemistry*, 5th Ed. Prentice Hall, London (2000).

[23] F. Shojaei, M.A. Bolorizadeh, R. Fathi, A Self-consistent central potential to simulate methane in scattering calculations, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 45 (2012) 045202.