

محاسبه سطح مقطع جزئی و کل در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالت‌های برانگیخته 2s و 3s با استفاده از موج کولنی در کانال تهییج

شیما عزیزان، منصوره رحمانیان، رضا فتحی*، فریده شجاعی

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در کار حاضر سطح مقطع جزئی و کل در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در کانال تهییج، با استفاده از موج کولنی محاسبه شده است. این روش برای مطالعه گذار $1s \rightarrow 2s$ و $1s \rightarrow 3s$ اتم هیدروژن در برخورد با پوزیترون در انرژی‌های میانی ($20 - 300 eV$) به کار گرفته شده است. محاسبه دامنه پراکندگی توسط یک روش تحلیلی جدید انجام شده است. به دلیل نبودن داده‌های تجربی در محدوده انرژی مورد نظر، نتایج به دست آمده با نتایج تئوری‌های در دسترس مقایسه گردیده است. نتایج نشان می‌دهند که در نظر گرفتن موج کولنی به عنوان تابع موج پرتابه در مقایسه با موج تخت منجر به نتایج بهتری در محدوده انرژی‌های میانی خواهد شد.

کلیدواژگان: پوزیترون، هیدروژن، سطح مقطع جزئی، تابع موج کولنی، کانال تهییج

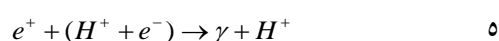
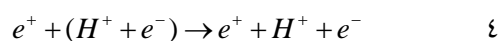
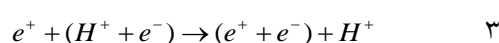
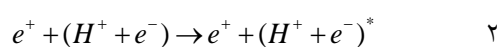
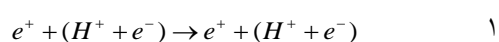
معرفی

مختلف برخورد برای ارائه مدلی دقیق جهت توصیف کانال‌های مختلف، ضروری به نظر می‌رسد. از جمله برخوردهای یون-اتم برخورد پروتون، پوزیترون و الکترون با اتم هیدروژن می‌باشد. خطوط طیفی اتم هیدروژن حاوی اطلاعات زیادی جهت مطالعه کیهان‌شناسی و شبیه‌سازی محیط‌های پلاسمایی است [۴]. جابه‌جایی، پهن‌شدگی و پلاریزاسیون این خطوط از مهم‌ترین اطلاعات در خصوص مطالعه دینامیک و سینماتیک فرآیندهای رخ داده شده در این محیط‌ها می‌باشند. از جمله این

بررسی برخورد یون-اتم از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و نتایج مربوط به سطح مقطع برخورد یون‌های پراانرژی با اتم‌ها و مولکول‌های متفاوت دارای کاربردهای فراوانی در شاخه‌های مختلف فیزیک می‌باشد [۱]. دانستن اطلاعات دقیق مربوط به سطح مقطع برخورد این فرآیندها می‌تواند در شبیه‌سازی محیط پلاسمایی و محیط‌های بین ستاره‌ای نقش کلیدی بازی کند [۲ و ۳]. بنابراین بررسی دقیق این مسئله با در نظر گرفتن جنبه‌های

*نویسنده مسئول: rfathi@uk.ac.ir

می‌سازد و این امر تئوری مسئله را پیچیده می‌کند. در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن هنگامی که انرژی پوزیترون فرودی افزایش می‌یابد کانال‌های زیادی باز می‌شوند که این کانال‌ها به شکل‌های ذیل قابل نمایش هستند.



کانال‌های یاد شده به ترتیب نشان دهنده برخورد الاستیک، تهییج، تشکیل پوزیترونیم، یونیزاسیون و کانال نابودی زوج ذره می‌باشند. برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن از جنبه دیگری نیز حائز اهمیت است. به دلیل این که ما با یک سیستم سه ذره‌ای واقعی روبرو هستیم که توابع موج و انرژی ترازهای مختلف آن مشخص است، بنابراین اطلاعات مناسبی از دقت مدل استفاده شده در بررسی دینامیک برخورد سه جسمی در اختیار محققین این مسئله قرار خواهد داد.

کارهای تئوری و تجربی بسیاری در برخورد یون با اتم هیدروژن انجام گردیده که از جمله این کارها به کارگیری تقریب مرتبه اول بورن است که در سال ۱۹۵۳ توسط بیت و گریفینگ [۵] انجام پذیرفت. جکسون و شیف [۶] پیشنهاد دادند که سهم برهم‌کنش هسته‌ای در تقریب مرتبه اول بورن

اطلاعات توزیع سرعت یون‌های فرود آمده از ذرات کیهانی در انرژی‌های بالا است که به طور مستقیم به سطح مقطع دیفرانسیلی در کانال تهییج وابسته است. چون قرار است محاسبات در مورد برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن که یک مسئله سه جسمی است انجام شود لذا به جنبه‌هایی از این برخورد اشاره شده است.

به دلیل خواص منحصربه‌فرد پوزیترون مطالعه برخورد این یون با اتم‌ها و مولکول‌های مختلف از این جهت اهمیت دارد که نه تنها اصول اساسی برهم‌کنش ماده و ضد ماده را دربر دارد بلکه به دلیل وجود کانال‌های باز بیشتری در مقایسه با پرتابه‌های دیگری مانند الکترون و پروتون از اهمیت زیادی برخوردار است. انتخاب پرتابه‌ای مانند پوزیترون می‌تواند اثر جرم و بار پرتابه را بر روی مراحل مختلف پراکندگی مورد بررسی قرار داده و دقت تئوری‌ها و تقریب‌های مختلف به کار گرفته شده در مسئله پراکندگی را مورد ارزیابی قرار دهد. به عنوان مثال علامت مخالف پوزیترون و الکترون باعث ایجاد پدیده‌های فیزیکی قابل توجهی می‌شود که یکی از آن‌ها تشکیل اتم پوزیترونیم است. هر چند حذف شدن برهم‌کنش تبادلی که در برخورد الکترون-اتم وجود دارد فرمول‌بندی برخورد پوزیترون-اتم را ساده‌تر می‌کند ولی از طرفی برهم‌کنش جاذبه‌ای قوی بین پوزیترون و الکترون اتم، چالش جدیدی را ایجاد می‌نماید که از جمله آن به وجود آمدن کانال جدیدی به نام نابودی زوج ذره و کانال تشکیل اتم پوزیترونیم است که مسئله پراکندگی را به صورت یک مسئله دو مرکزی ظاهر

این انرژی به نتایج این سری منجر می‌شود. موج واپیچیده که جایگزین موج تخت در محاسبات می‌گردد، در انرژی‌های میانی نتایج قابل قبول‌تری نسبت به موج تخت ارائه می‌دهد. اولین محاسبات با تقریب موج واپیچیده در برخورد الکترون با اتم هیدروژن و در گذار $1s \rightarrow 2s$ انجام شد [۱۳]. به کار تئوری دیگری که اخیراً در این تقریب و در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن برای هر دو کانال تهییج و انتقال بار انجام شده می‌توان در مرجع [۱۴] اشاره کرد.

در کار حاضر ابتدا یک دستگاه مختصات مناسب برای توصیف برخورد سه جسمی تعریف نموده و سپس این مسئله با در نظر گرفتن پتانسیل‌های برهم‌کنش و تحت جداسازی خاصی که منجر به تابع موج کولنی خواهد شد، به صورت تحلیلی مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

تئوری

دستگاه مختصاتی که برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن را در مختصات مرکز جرم سیستم سه‌ذره‌ای توصیف می‌کند توسط شکل ۱ در نظر گرفته می‌شود که در آن A به عنوان پرتابه و $(B+e)$ به عنوان زیر سیستم مقید در نظر گرفته شده‌اند.

گنجانده شود. این پیشنهاد در برخورد پروتون با اتم هیدروژن و در کانال انتقال بار منجر به نتایج قابل قبولی گردید و به دلیل فاز مخربی که بین دامنه‌های مرتبه اول الکترونی و هسته‌ای وجود داشت باعث کاهش سطح مقطع کل شد، در حالی که بدون در نظر گرفتن این جمله سطح مقطع کل بزرگ‌تر از نتایج آزمایشگاهی به دست می‌آمد. روش دیگری که در محاسبات سطح مقطع و در کانال تهییج از آن بهره گرفته می‌شود، استفاده از تابع موج واپیچیده به عنوان تابع موج پرتابه و یا تابع موج کولنی^۱ [۷] است. به دلیل جنبه‌های مخرب بلندبرد بودن پتانسیل کولنی در فیزیک اتمی و در مسائل برخورد از شرایط مرزی تصحیح شده روی تابع موج استفاده شده و آن را تحت عنوان نظریه موج واپیچیده پیوسته^۲ [۹و۸] می‌شناسیم. در کانال‌های مختلف برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن از مدل‌های متفاوتی استفاده گردیده که از جمله آن‌ها می‌توان به مدل موج واپیچیده مداری پلاریزه^۳ و محاسبات انجام شده توسط روش مسیرهای کلاسیکی مونت کارلو^۴ در کانال تهییج [۱۰] روش جفت‌شدگی نزدیک^۵ با مدل‌های مختلف و تئوری عملگر گذار و معادلات جفت شده لیپمن-شوینگر [۱۱] در تشکیل پوزیترونیم و مدل موج واپیچیده [۱۲] در کانال یونیزاسیون اشاره نمود.

مشخص است که به کارگیری سری بورن در انرژی‌های بالا مفید است و نتایج تمامی تئوری‌ها در

^۴ Classical trajectory Monte Carlo

^۵ Close-coupling

^۱ Coulomb waves

^۲ Continuum distorted wave

^۳ Distorted wave polarized orbital

H_f و H_i هامیلتونی‌های جدایی پذیر در کانال اولیه و نهایی می‌باشند که با پتانسیل‌های اولیه V_i و نهایی V_f هامیلتونی کل را ایجاد می‌کنند.

برای شکستن هامیلتونی کل به دو قسمت H_i و V_i به دو شکل می‌توان عمل کرد (با این کار حل معادله دیفرانسیل دانسته فرض می‌شود).

در یک حالت می‌توان نوشت

$$H_i = -\frac{1}{2v_i} \nabla_{R_i}^2 - \frac{1}{2\mu_i} \nabla_{r_b}^2 - \frac{1}{r_b} \quad 10$$

$$H_i = -\frac{1}{2v_i} \tilde{\nabla}_{R_i}^2 - \frac{1}{2\mu_i} \tilde{\nabla}_{r_b}^2 - \frac{1}{r_b}$$

$$V_i = \frac{1}{R} - \frac{1}{r_a}$$

و بار دیگر می‌توان هامیلتونی را به شکل

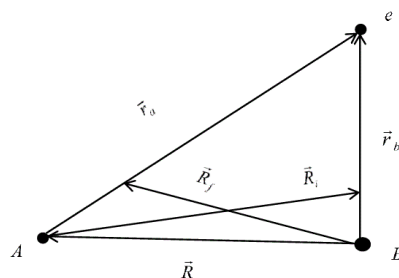
$$H_i = -\frac{1}{2v_i} \nabla_{R_i}^2 - \frac{1}{2\mu_i} \nabla_{r_b}^2 - \frac{1}{r_b} + \frac{1}{R} \quad 11$$

$$V_i = \frac{1}{R} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b}$$

جدا نمود. انرژی کل سیستم مربوط به دو هامیلتونی H_f و H_i در دستگاه مختصات مرکزجرم سه‌ذره به صورت

$$E_i = \frac{K_i^2}{2v_i} + \varepsilon_i \quad E_f = \frac{K_f^2}{2v_f} + \varepsilon_f \quad 12$$

بیان می‌شود. ε_f و ε_i انرژی زیر سیستم مقید در کانال اولیه و نهایی بوده و بردارهای \vec{K}_f و \vec{K}_i اندازه حرکت‌های نسبی اولیه و نهایی پرتابه در مختصات مرکزجرم سیستم سه‌ذره‌ای می‌باشند. در کانال تهییج که موضوع کار حاضر است $H_i = H_f$ و $V_i = V_f$ خواهد بود.



شکل ۱. بردارهای توصیف کننده موقعیت پرتابه، هسته و الکترون مقید در سیستم مرکزجرم سه ذره.

\vec{R}_i بردار توصیف کننده مکان پرتابه نسبت به مرکز جرم زیر سیستم مقید بوده و \vec{r}_b بردار مکان الکترون مقید نسبت به هسته می‌باشد. با معرفی این بردارها می‌توان هامیلتونی سیستم سه‌ذره‌ای را به شکل زیر نوشت.

$$V = \frac{1}{R} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b} \quad 6$$

$$H = -\frac{1}{2v_i} \nabla_{R_i}^2 - \frac{1}{2\mu_i} \nabla_{r_b}^2 + V$$

بردارهای \vec{R} و \vec{r}_a به ترتیب نشان دهنده بردارهای مکان پرتابه-هسته و پرتابه-الکترون می‌باشند. در رابطه ۶، V_i و μ_i جرم‌های کاهش یافته هستند و به صورت

$$\mu_i = \frac{M_T m}{M_T + m} \quad v_i = \frac{M_p (M_T + m)}{M_p + M_T + m} \quad 7$$

تعریف می‌شوند. M_p ، M_T و m به ترتیب جرم‌های پرتابه، هسته و الکترون هستند. هامیلتونی کل سیستم را می‌توان به این شکل نوشت:

$$H = H_i + V_i = H_f + V_f \quad 8$$

به طوری که خواهیم داشت

$$H_i \phi_i = E_i \phi_i \quad H_f \phi_f = E_f \phi_f \quad 9$$

هامیلتونی به شکل رابطه ۱۱ پتانسیل $\frac{1}{R_i}$ موجب واپیچیده شدن موج تخت گردیده و تابع موج به شکل حاصل ضرب موج کولنی در تابع موج زیر سیستم مقید ظاهر شده و تأثیر برهم‌کنش هسته‌ای در تقریب مرتبه اول را می‌توان مشاهده نمود. در ادامه کار و برای محاسبه عناصر ماتریس گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته به شکل تحلیلی و در تقریب مرتبه اول، تابع موج پرتابه به صورت موج تخت در کانال ورودی و به شکل کولنی در کانال خروجی در نظر گرفته شده است. به طوری که

$$T_{fi}^{Post(1)} = \langle \phi_f | V_i | \phi_i \rangle \quad 18$$

بوده و توابع به کار گرفته شده در رابطه ۱۸ به شکل

$$|\phi_i\rangle = \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_i) \varphi_i(\vec{r}_b) \quad 19$$

$$|\varphi_f\rangle = \exp(-\frac{\pi}{2}\alpha) \Gamma(1-i\alpha) \times$$

$${}_1F_1(i\alpha; 1; -i\vec{K}_f R_i - i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \times \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \varphi_f(\vec{r}_b)$$

$$|\phi_f\rangle = {}_1F_1(i\alpha; 1; -i\vec{K}_f R_i - i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \times \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \varphi_f(\vec{r}_b) \quad 20$$

ظاهر خواهند شد.

به ترتیب تابع موج اتم هیدروژن در حالت اولیه و نهایی، ${}_1F_1(a; b; c)$ تابع فوق هندسی و α ضریب زومرفلد (نسبت حاصل ضرب بار ذرات به سرعت نسبی آنها) است.

برای محاسبه ماتریس گذار در کانال تهییج رابطه

اگر توابع موج اولیه و نهایی کل سیستم با $\psi_{i,f}^\pm$ نشان داده شوند این توابع در روابط

$$|\psi_i^+\rangle = |\phi_i\rangle + G_i^+ V_i |\psi_i^+\rangle \quad 13$$

$$\langle \psi_f^- | = \langle \phi_f^- | + \langle \psi_f^- | G_i^- V_i \quad 14$$

صدق می‌کنند که به معادلات لیپمن-شوینگر کانال اولیه و نهایی معروف هستند. بنابراین عملگر گذار را می‌توان به دو شکل

$$T_{fi}^{Post} = \langle \phi_f^- | V_i | \psi_i^+ \rangle \quad 15$$

$$T_{fi}^{Prior} = \langle \psi_f^- | V_i | \phi_i \rangle \quad 16$$

تعریف نمود. عملگرهای گرین که در فرمول‌بندی ظاهر می‌شوند به شکل

$$G_i^\pm = \frac{1}{E - H_i \pm i\epsilon} \quad 17$$

قابل تعریف هستند. جواب‌های تابع موج هامیلتونی رابطه ۱۰ به شکل حاصل ضرب موج تخت در تابع موج زیر سیستم مقید ظاهر می‌شود که هم‌ارز تابع موج ϕ در روابط ۱۳ الی ۱۶ بوده و محاسبه ماتریس گذار توسط آن به تقریب مرتبه اول بورن منجر خواهد شد. لازم به ذکر است که در محاسبه عناصر ماتریس گذار با این چینش هامیلتونی، برای کانال تهییج، جمله مربوط به برهم‌کنش هسته‌ای که در جمله $\frac{1}{R}$ ظاهر می‌شود. به دلیل تعامد توابع موج زیر سیستم مقید به عدد صفر منجر شده و اثر جمله هسته‌ای که مهم‌ترین عامل پراکندگی در زوایای بزرگ پراکندگی است ظاهر نخواهد شد. در چینش

۲۱

$$T_{ex} = \exp(-\frac{\pi}{2}\alpha)\Gamma(1-i\alpha) \times \langle {}_1F_1(i\alpha; 1; -iK_f R_i - i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \phi_f(\vec{r}_b) \left| \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R_i} - \frac{1}{r_a} \right) \right| \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_i) \phi_i(\vec{r}_b) \rangle$$

نوشته می شود که می توان با توجه به شکل ۱ به راحتی نشان داد که عبارت $\frac{1}{R} - \frac{1}{R_i}$ از مرتبه جرم الکترون به جرم هسته بوده و می توان از آن در محاسبات صرف نظر کرد. بنابراین رابطه ۲۱ به شکل

۲۲

$$T_{ex} = \exp(-\frac{\pi}{2}\alpha)\Gamma(1+i\alpha) \times \iint d^3r_b d^3R_i F_1^*(i\alpha; 1; -iK_f R_i - i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \times \phi_f(\vec{r}_b) \left(-\frac{1}{r_a} \right) \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_i) \phi_i(\vec{r}_b)$$

بازنویسی می شود. تبدیل فوریه $\frac{1}{r_a}$ که در روابط از آن استفاده خواهد شد به شکل

۲۳

$$\frac{1}{r_a} = \frac{1}{2\pi^2} \int d^3q \frac{\exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_a)}{q^2}$$

بوده و اگر F_C به صورت

۲۴

$$F_C(\vec{K}_f, \vec{R}_i) = {}_1F_1(i\alpha; 1; -iK_f R_i - i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) \times \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i)$$

تعریف شود با توجه به این که توابع موج اتم هیدروژن در کانال اولیه و نهایی و در گذار

$1s \rightarrow 2s$ به شکل

۲۵

$$\phi_f(\vec{r}_b) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (2-r_b) \exp(-\frac{r_b}{2})$$

$$\phi_i(\vec{r}_b) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-r_b)$$

می باشند. می توان انتگرال رابطه ۲۲ را به صورت

۲۶

$$T_{ex} = \frac{1}{8\pi^2 \sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{\pi}{2}\alpha)\Gamma(1+i\alpha) \times \iint d^3r_b d^3R_i F_C^*(\vec{K}_f, \vec{R}_i) (2-r_b) \exp(-\frac{r_b}{2}) \times \int d^3q \frac{\exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_a)}{q^2} \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_i) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-r_b)$$

نوشت که شامل سه انتگرال روی \vec{r}_b ، \vec{q} و \vec{R}_i می باشد.

برای محاسبه انتگرال روی \vec{r}_b از رابطه

$$\vec{r}_a = \vec{R}_i + \mu \vec{r}_b$$

$$\mu = \frac{M_T}{M_T + m}$$

به صورت

$$I_{r_b} = \int d^3r_b \exp(-\frac{3r_b}{2})(2-r_b) \exp(-i\mu\vec{q} \cdot \vec{r}_b)$$

$$= \frac{32\pi\mu^2 q^2}{(\frac{9}{4} + \mu^2 q^2)^3}$$

۲۷

قابل محاسبه است. با استفاده از حساب مانده ها

می توان انتگرال روی \vec{q} را انجام داد که جواب آن

به شکل

$$I_q = \int d^3q \frac{\exp(-i\vec{q} \cdot \vec{R}_i) q^2 \mu^2}{q^2 (\frac{9}{4} + q^2 \mu^2)^3}$$

$$= 2\pi^2 \exp(-\frac{3}{2\mu} R_i) (\frac{R_i \mu^4}{18} + \frac{\mu^5}{27})$$

۲۸

خواهد بود.

$$I_{1R_i} = \frac{8}{9}\mu^3 \frac{d}{d\mu}(a \times b) + \frac{4}{9}\mu^4 \frac{d^2}{d\mu^2}(a \times b) \quad ۳۴$$

و

$$I_{2R_i} = \frac{2}{3}\mu^2 \frac{d}{d\mu}(a \times b) \quad ۳۵$$

به دست خواهد آمد. که در آن

$$a = 4\pi(\Delta^2 + \frac{9}{4\mu^2})^{-i\alpha-1}$$

$$b = (2\vec{K}_f \cdot \vec{\Delta} - \frac{3}{\mu}iK_f + (\Delta^2 + \frac{9}{4\mu^2}))^{i\alpha}$$

می‌باشد. بنابراین شکل نهایی ماتریس گذار برای گذار از حالت پایه اتم هیدروژن به اولین حالت برانگیخته را می‌توان به صورت

$$T_{ex} = -\frac{8}{\sqrt{2}}\exp(-\frac{\pi}{2}\alpha)\Gamma(1+i\alpha)(\frac{\mu^4}{18}I_{1R_i} + \frac{\mu^5}{27}I_{2R_i}) \quad ۳۶$$

نوشت.

مراحل انجام شده برای گذار $1s \rightarrow 2s$ را می‌توان برای گذار $1s \rightarrow 3s$ تکرار نمود. در این خصوص از آوردن جزئیات محاسبات صرف نظر نموده و نتیجه نهایی در مورد ماتریس گذار برای این گذار به

شکل

$$T_{ex} = -\exp(-\frac{\pi}{2}\alpha)\Gamma(1+i\alpha)\frac{4}{3\sqrt{3}} \times (\frac{3^3}{2^8}\mu^9 \frac{d}{d\mu} + \frac{3^3}{2^8}\mu^{10} \frac{d^2}{d\mu^2} - \frac{3^2}{2^8}\mu^{11} \frac{d^3}{d\mu^3})\zeta(\mu) \quad ۳۷$$

ارائه خواهد شد به طوری که

$$\zeta(\mu) = 4\pi(\Delta^2 + \frac{16}{9\mu^2})^{-i\alpha-1} \times \quad ۳۸$$

$$(2\vec{K}_f \cdot \vec{\Delta} - \frac{8}{3\mu}iK_f + (\Delta^2 + \frac{16}{9\mu^2}))^{i\alpha}$$

برای ادامه انتگرال گیری روی \vec{R}_i در رابطه ۲۶ از انتگرال نوردسیک^۶ [۱۵] استفاده خواهد شد و می‌توان آن را به صورت‌های

$$\int d^3r \frac{1}{r} \exp(-\lambda r + i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}) {}_1F_1(i\alpha; 1; ipr - i\vec{p} \cdot \vec{r}) = \quad ۲۹$$

$$2\pi \exp(-\pi\alpha) (\frac{1}{2}(\Delta^2 + \lambda^2))^{i\alpha-1} (\vec{p} \cdot \vec{\Delta} - i\lambda p - \frac{1}{2}(\Delta^2 + \lambda^2))^{-i\alpha}$$

۳۰

$$\int d^3r \exp(-\lambda r + i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}) {}_1F_1(i\alpha; 1; ipr - i\vec{p} \cdot \vec{r}) =$$

$$-\frac{d}{d\lambda} \int d^3r \frac{1}{r} \exp(-\lambda r + i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}) {}_1F_1(i\alpha; 1; ipr - i\vec{p} \cdot \vec{r})$$

و

$$\int d^3r \exp(-\lambda r + i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}) r {}_1F_1(i\alpha; 1; ipr - i\vec{p} \cdot \vec{r}) =$$

$$\frac{d^2}{d\lambda^2} \int d^3r \frac{1}{r} \exp(-\lambda r + i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}) \times$$

$${}_1F_1(i\alpha; 1; ipr - i\vec{p} \cdot \vec{r})$$

نوشت. بنابراین انتگرال روی \vec{R}_i به دو قسمت

۳۲

$$I_{1R_i} = \int d^3R_i {}_1F_1(-i\alpha; 1; iK_f R_i + i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) =$$

$$\exp(i\vec{\Delta} \cdot \vec{R}_i - \frac{3}{2\mu}R_i)$$

و

$$I_{2R_i} = \int d^3R_i {}_1F_1(-i\alpha; 1; iK_f R_i + i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_i) = \quad ۳۳$$

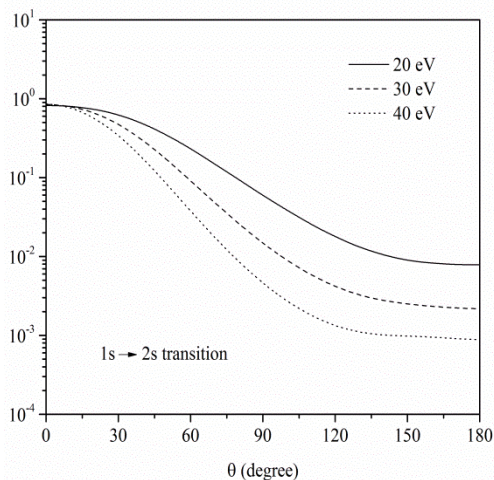
$$\exp(i\vec{\Delta} \cdot \vec{R}_i - \frac{3}{2\mu}R_i) R_i$$

تبدیل خواهد شد. در رابطه ۳۲ و ۳۳ $\vec{\Delta} = \vec{K}_i - \vec{K}_f$

و $\mu = \frac{3}{2\lambda}$ است. در نهایت جواب انتگرال‌های

روابط ۳۲ و ۳۳ به صورت

^۶Nordsieck



شکل ۲. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی‌های ۲۰، ۳۰ و ۴۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

اگر زوایای نزدیک به صفر منحنی‌ها با دقت بیشتری ترسیم شود، مشاهده خواهد شد که با این فرمول‌بندی و با افزایش انرژی برخورد، سطح مقطع جزئی به مقدار بسیار کمی افزایش می‌یابد. لازم به ذکر است که محاسبات کار حاضر در تقریب مرتبه اول برهم‌کنش انجام شده و سعی بر این است که در کارهای بعدی با افزودن جمله‌های مرتبه بالاتر، فاز دامنه‌های تقریب‌های متفاوت را وارد مسئله نموده و تأثیر آن‌ها روی سطح مقطع جزئی و کل بررسی شود. در شکل‌های ۳-۶ سطح مقطع جزئی به دست آمده در روش حاضر برای گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته با نتایج کار تئوری مرجع [۱۴] مقایسه شده است. نتایج در توافق خوبی با یکدیگر هستند و با افزایش انرژی برخورد همخوانی بیشتری به خصوص در زوایای نزدیک به صفر

خواهد بود. (μ) تابعی است که از حل انتگرال‌های نوردسیک حاصل شده است. لازم به ذکر است که در این گذار $\mu = \frac{3}{4\lambda}$ می‌باشد. سطح مقطع دیفرانسیلی از رابطه

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\mu}{2\pi}\right)^2 \frac{K_f}{K_i} |T_{ex}|^2 \quad 39$$

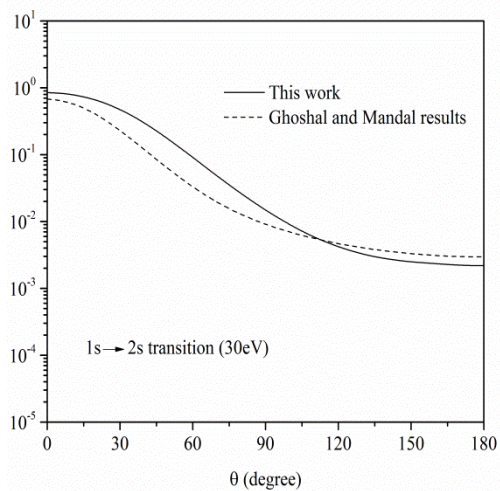
به دست آمده و با انتگرال گیری روی زاویه فضایی می‌توان سطح مقطع کل را محاسبه کرد. در بخش بعدی نتایج عددی فرمول‌بندی حاضر توسط نرم افزارهای محاسباتی به دست آمده و نتایج به شکل منحنی‌های سطح مقطع جزئی و کل رسم شده و با نتایج تئوری‌های دیگر مقایسه شده‌اند.

نتایج

در شکل ۲ نتایج به دست آمده در خصوص سطح مقطع جزئی برای انرژی‌های ۲۰، ۳۰ و ۴۰ الکترون‌ولت رسم شده است. همان‌طور که از منحنی‌ها مشخص می‌شود با افزایش انرژی برخورد در زوایای بزرگ پراکندگی منحنی‌ها با سرعت بیشتری به سمت مقادیر کوچک‌تر حرکت می‌کنند و این امر بیانگر این مطلب است که افزودن جمله‌های با مرتبه بالاتر در انرژی‌های بزرگ‌تر برخورد می‌تواند سطح مقطع جزئی را در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی تحت تأثیر قرار دهد.

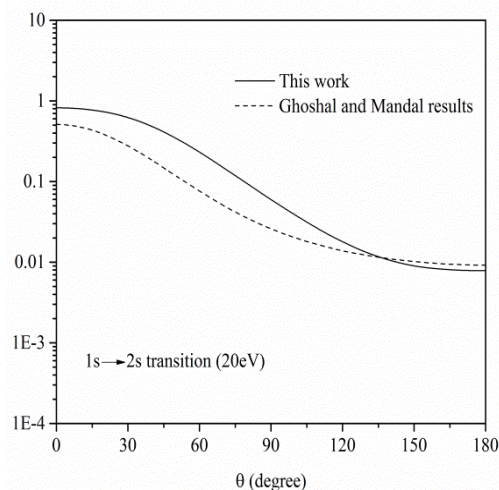
پراکندگی که بیشترین سهم را در سطح مقطع کل

دارند به چشم می‌خورد.



شکل ۴. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر و کار تئوری مرجع [۱۴] در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۳۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

در تئوری مرجع [۱۴] پتانسیلی که موج تخت را واپیچیده می‌کند با جزئیات فیزیکی بیشتری وارد مسئله گردیده و به عبارتی بازچینی هامیلتونی در این تئوری به گونه‌ای انجام شده که شرایط مرزی مطلوب را به خصوص در زوایای بزرگ پراکندگی برآورده می‌سازد و اثرات مخرب بلند برد بودن پتانسیل کولنی از مسئله حذف می‌گردد. همچنین انتخاب پتانسیل واپیچیده کننده که با میانگین‌گیری خاصی از پتانسیل‌های برهم‌کنشی موجود در مسئله حاصل شده به گونه‌ای است که مرتبه‌های بالاتر برهم‌کنش را وارد محاسبات می‌سازد و مدل بهتری را نسبت به روش حاضر در محاسبه سطح مقطع جزئی در انرژی‌ها و زوایای بزرگ‌تر پراکندگی ارائه می‌دهد و به همین دلیل است که منحنی نتایج سطح مقطع جزئی آن در زوایا و انرژی‌های بزرگ‌تر پراکندگی در بالای منحنی‌های کار حاضر قرار می‌گیرد. از

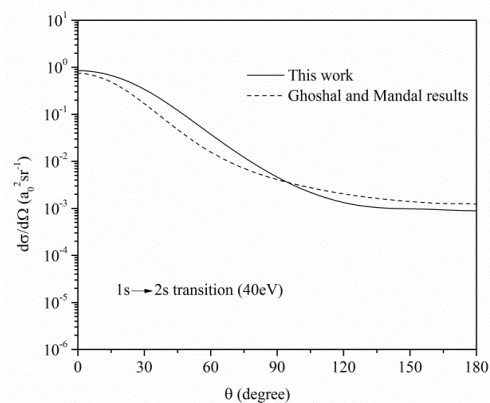


شکل ۳. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر و کار تئوری مرجع [۱۴] در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۲۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

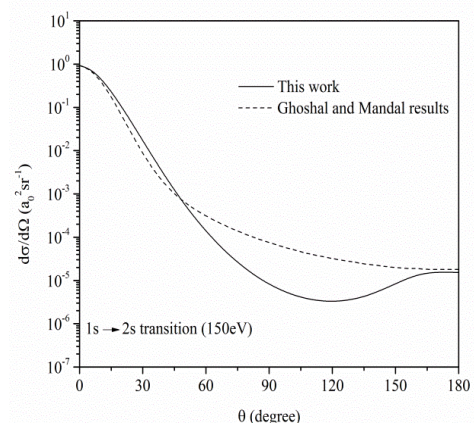
روند نزولی منحنی‌ها بسیار به هم شبیه هستند و همان‌طور که از منحنی‌ها مشخص می‌شود در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی نتایج کار حاصل زیر نتایج کار تئوری مرجع [۱۴] قرار دارد و در زوایای کوچک‌تر پراکندگی نتیجه عکس می‌باشد. با افزایش انرژی برخورد اختلاف نتیجه در زاویه‌های بزرگ‌تر پراکندگی از زوایای کوچک‌تری شروع می‌گردد و با افزایش زاویه پراکندگی نتایج مجدداً به یکدیگر نزدیک می‌شوند که در شکل ۶ و انرژی برخورد ۱۵۰ الکترون‌ولت مشخص است. این امر بیانگر این مطلب است که فرمول‌بندی حاضر شرایط مرزی مطلوب مسئله را در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی به خوبی برآورده نمی‌سازد.

در شکل‌های ۷ و ۸ منحنی‌های سطح مقطع جزئی روش حاضر در انرژی‌های ۱۰۰ و ۲۰۰ الکترون‌ولت با داده‌های چند تئوری دیگر مقایسه شده است (نتایج جفت شدگی نزدیک در عدد ۲ ضرب شده است). همان‌طور که مشخص است در زوایای کوچک پراکندگی نتایج، اختلاف چندانی ندارند و با افزایش انرژی برخورد اختلاف نتایج به خصوص در زوایای کوچک‌تر پراکندگی کمتر می‌گردد و بیشترین اختلاف در زوایای بزرگ پراکندگی مشاهده می‌شود. این مقایسه تأکید بیشتری بر لزوم افزودن جمله‌های مرتبه بالاتر پراکندگی در این کار را دارد. به نظر می‌رسد که افزودن جمله‌های مرتبه‌های بالاتر پراکندگی باعث افزایش سطح مقطع جزئی در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی گردیده و نتایج بهتری در مقایسه با داده‌های سایر تئوری‌های موجود ذکر شده به دنبال خواهد داشت. لازم به ذکر است به دلیل این‌که دامنه مرتبه اول در زوایا و انرژی‌های بزرگ پراکندگی سریع کوچک می‌شوند، نمی‌توانند تأثیر چندانی بر جمله‌های مرتبه بالاتر که سهم عمده را در زوایای بزرگ‌تر پراکندگی دارند، داشته باشند.

طرف دیگر محاسبات عددی مرجع [۱۴] به قدری دشوار است که با کامپیوترهای شخصی که محاسبات کار حاضر با آن انجام شده امکان پذیر نیست. به نظر می‌رسد که فرمول‌بندی اخیر و محاسبات انجام شده در این چارچوب، کار موفقی در مقایسه با تئوری موج واپیچیده در انرژی‌های میانی و بالا محسوب شود.

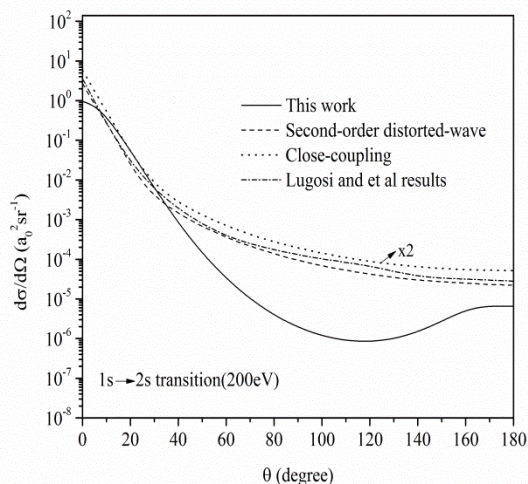


شکل ۵. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر و کار تئوری مرجع [۱۴] در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۴۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

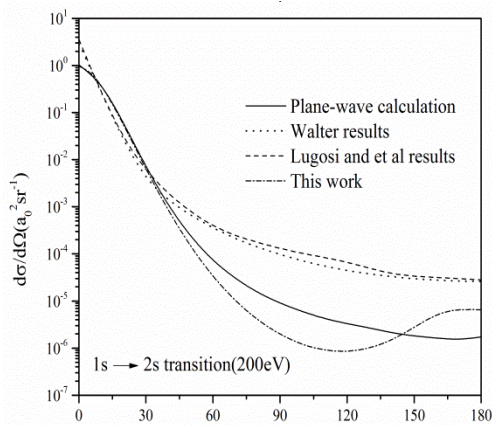


شکل ۶. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر و کار تئوری مرجع [۱۴] در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۱۵۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

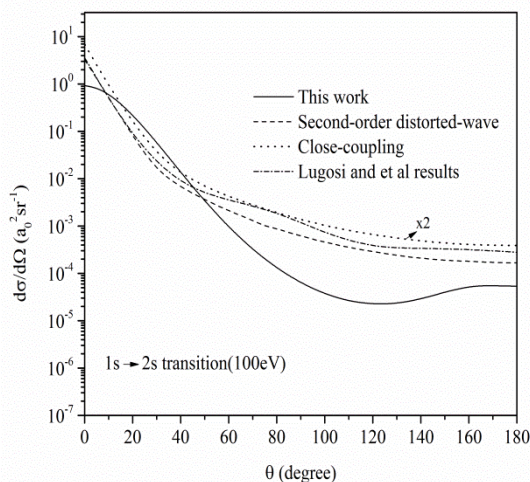
شدن اثر جمله برهم کنش هسته‌ای در محاسبات اخیر می‌باشد.



شکل ۸. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر (خط توپر) با کار تئوری تقریب مرتبه دوم موج واپیچیده مرجع [۱۶] (خط چین)، کار تئوری جفت شدگی نزدیک [۱۷] (نقطه چین) و کار تئوری مرجع [۱۰] (خط-نقطه چین) در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۲۰۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.



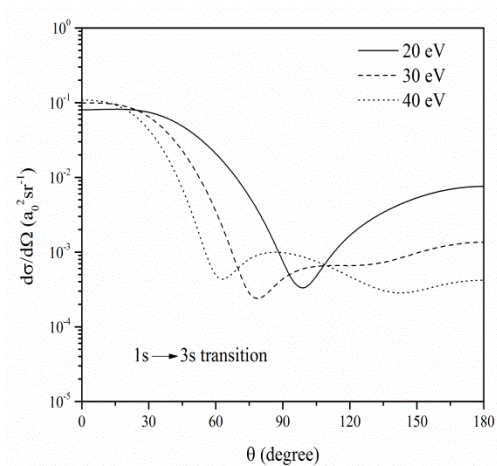
شکل ۹. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر (خط-نقطه چین) با کار تئوری انجام شده توسط موج تخت مرجع [۱۸] (خط توپر)، کار تئوری جفت شدگی نزدیک [۱۷] (خط چین) و کار تئوری مرجع [۱۰] (نقطه چین) در برخورد



شکل ۷. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر (خط توپر) با کار تئوری تقریب مرتبه دوم موج واپیچیده مرجع [۱۶] (خط چین)، کار تئوری جفت شدگی نزدیک [۱۷] (نقطه چین) و کار تئوری مرجع [۱۰] (خط-نقطه چین) در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۱۰۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

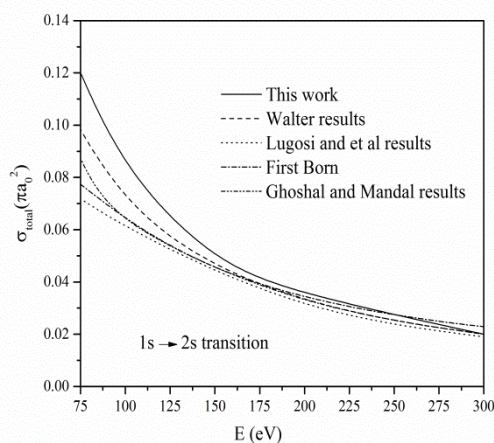
در شکل ۹ سطح مقطع جزئی روش حاضر با محاسبات انجام شده توسط موج تخت در مرجع [۱۸] در انرژی برخورد ۲۰۰ الکترون‌ولت مقایسه شده است. منحنی‌ها نشان می‌دهند که در زوایای کوچک پراکندگی نتایج کار حاضر به تئوری‌های موجود و خصوصاً نتایج موج تخت نزدیک است و این امر منطقی به نظر می‌رسد، چون همان‌طور که انتظار می‌رود نتایج تمامی تئوری‌ها در انرژی‌های بزرگ پراکندگی می‌بایست به تقریب مرتبه اول بورن منجر شود. از طرفی همان‌طور که از منحنی نتایج کار حاضر مشخص است در زوایای بزرگ پراکندگی (بزرگ‌تر از ۱۴۰ درجه) نتایج بالاتر از نتایج به دست آمده توسط موج تخت قرار می‌گیرد و به نتایج سایر تئوری‌های ذکر شده نزدیک می‌شود که دلیل آن وارد

اختلاف بین نتایج کار حاضر و کار مرجع [۱۷] که به روش جفت شدگی نزدیک انجام شده و نتایج مرجع [۱۴] که شامل محاسبات پیچیده موج واپیچیده است در انرژی ۷۵ الکترون ولت مشاهده می شود که در بدترین شرایط این اختلاف حدود ۱۱ تا ۲۵ درصد است. به نظر نویسندگان مقاله این مطلب نشان دهنده موفقیت نسبی مدل حاضر است. در شکل ۱۱ نمودارهای سطح مقطع جزئی برای گذار از حالت پایه به حالت $3s$ برای سه انرژی ۳۰، ۲۰ و ۴۰ الکترون ولت رسم شده است. همان طوری که مشاهده می شود در زوایای کوچک پراکندگی و با افزایش انرژی برخورد سطح مقطع جزئی کمی افزایش می یابد ولی در زوایای بزرگ پراکندگی و با افزایش انرژی برخورد منحنی ها سریع تر به سمت مقادیر کوچک تر میل می کنند.



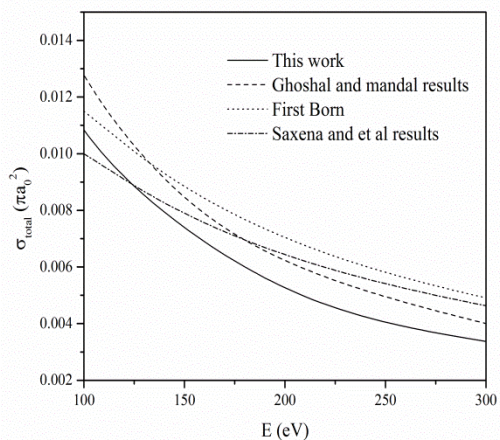
شکل ۱۱. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی های ۳۰، ۲۰ و ۴۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به حالت $3s$.

پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۲۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.



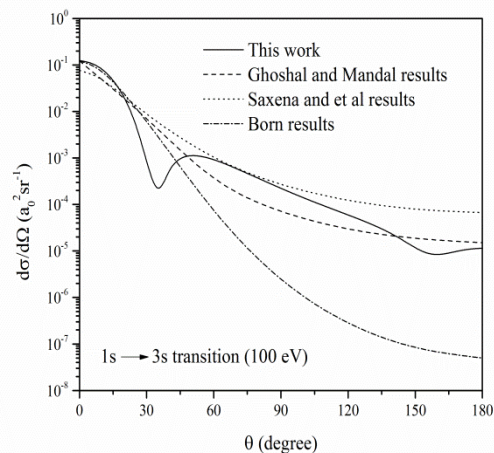
شکل ۱۰. مقایسه سطح مقطع کل محاسبه شده در کار حاضر (خط توپر) با کار تئوری جفت شدگی نزدیک مرجع [۱۷] (خط چین)، کار تئوری مرجع [۱۰] (نقطه چین)، تقریب مرتبه اول بورن مرجع [۱۸] (خط-نقطه چین) و کار تئوری موج واپیچیده مرجع [۱۴] (خط-نقطه-نقطه چین) در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در محدوده انرژی های ۷۵-۳۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

در شکل ۱۰ منحنی های سطح مقطع کل برای چند کار تئوری جهت مقایسه با کار حاضر رسم شده است. محدوده انرژی ۷۵ تا ۳۰۰ الکترون ولت در نظر گرفته شده است. نتایج روش حاضر در توافق بسیار خوبی با نتایج سایر تئوری ها در انرژی های بزرگ برخورد است. ولی همان طور که انتظار می رود در انرژی های کوچک تر برخورد به دلایلی که در خصوص سطح مقطع جزئی مطرح شد نتایج دارای اختلاف بیشتری است. مقایسه نتایج کار ساده محاسباتی حاضر با نتایج حاصل از مدل های پیچیده تر ذکر شده، نشان دهنده عدم وجود اختلاف چشمگیر بین این نتایج است. در واقع بیشترین



شکل ۱۳. مقایسه سطح مقطع کل محاسبه شده در کار حاضر (خط توپر) با کار تئوری موج واپیچیده مرجع [۱۹] (خط چین)، تقریب مرتبه اول بورن (نقطه چین)، کار تئوری مرجع [۷] (خط-نقطه چین) در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در محدوده انرژی‌های ۱۰۰-۳۰۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به حالت $3s$.

در شکل ۱۳ سطح مقطع کل به دست آمده در کار حاضر با نتایج تئوری‌های دیگر در محدوده انرژی ۱۰۰ الی ۳۰۰ الکترون‌ولت مقایسه شده و در تطابق خوبی به خصوص با نتایج تئوری موج واپیچیده است. هر چند نویسندگان مقاله جای نتایج تجربی را در این کار خالی می‌دانند. روش ذکر شده را می‌توان در مورد محاسبه سطح مقطع گذار به ترازهای دیگر نیز به کار گرفت. نکته مهمی را که در پایان قابل ذکر می‌دانیم این است که با توجه به نتایج به دست آمده استفاده از موج کولنی در انرژی‌های کوچک‌تر از ۱۰۰ الکترون‌ولت، جواب‌های قابل قبولی ارائه می‌دهند (در مقایسه با نتایج موج تخت). بنابراین روش حاضر برای این محدوده از انرژی‌های برخورد در مقایسه با کارهای تئوری دیگر قابل استناد است.



شکل ۱۲. مقایسه سطح مقطع جزئی محاسبه شده در کار حاضر (خط توپر) با کار تئوری موج واپیچیده مرجع [۱۹] (خط چین)، کار تئوری مرجع [۷] (نقطه چین) و تقریب مرتبه اول بورن (خط-نقطه چین) در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۱۰۰ الکترون‌ولت و در گذار از حالت پایه به حالت $3s$.

در شکل ۱۲ سطح مقطع جزئی این گذار برای انرژی ۱۰۰ الکترون‌ولت رسم شده و با نتایج تئوری‌های دیگر مقایسه گردیده است. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود منحنی مربوط به تقریب بورن در زوایای بزرگ پراکندگی سریعاً به سمت مقادیر کوچک حرکت می‌کند و این امر ناشی از حذف برهم‌کنش بین پرتابه و هسته است و بیانگر این مطلب می‌باشد که در زوایای بزرگ پراکندگی مکانیسم اصلی پراکندگی مربوط به این برهم‌کنش است. نتایج کار حاضر در مقایسه با دو تئوری دیگر قانع کننده است. هر چند باید متذکر شد که کار محاسباتی مدل حاضر بسیار ساده‌تر از کار محاسباتی تئوری موج واپیچیده بوده و با کامپیوترهای شخصی قابل انجام است.

impact excitation of hydrogen, *Radiation Physics and Chemistry Journal* 68 (2003) 199-203.

[11] J. Mitroy, Close coupling theory of positron-hydrogen scattering, *Australian Journal of Physics* 46 (1993) 751-772.

[12] J. Fiol, R.E. Olson, Three-body dynamics in the ionization of hydrogen by positron impact, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 35 (2002) 1173-1184.

[13] G.A. Erskine, H.S.W. Massey, The application of variational methods to atomic scattering problems, II. Impact excitation of the $2s$ level of atomic hydrogen distorted-wave treatment, *Proceedings of the Royal Society of London Series A* 212 (1952) 521-530.

[14] A. Ghoshal, P. Mandal, Distorted-wave theory for positron-hydrogen collisions, *Physical Review A* 72 (2005) 032714-720.

[15] A. Nordsieck, Reduction of an integral in the theory of Bremsstrahlung, *Physical Review* 93 (1954) 785-787.

[16] V.E. Bubelev, D.H. Madison, Second-order distorted-wave calculation for elastic and inelastic positron-hydrogen scattering, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 25(1992) 3229-3244.

[17] H.R.J. Walters, Positron scattering by atomic hydrogen at intermediate energies: $1s$ to $1s$, $1s$ to $2s$ and $1s$ to $2p$ transitions, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 21(1988) 1893-1906.

[18] R. Fathi, M.A. Bolorizadeh, F. Shojaei Akbarabadi, M.J. Brunger, Polarization of Lyman- α and Balmer- α emissions in proton-hydrogen collisions: A study using first-order Born-Faddeev-type equations, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 45(2012) 205201.

[19] P. Rej, A. Ghoshal, Rydberg, transitions for positron-hydrogen collisions: Asymptotic cross section and scaling law, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 47(2014) 015204.

مراجع

[1] J. Weiner, V.S. Bagnato, S. Zilio, P.S. Julienne, Experiments and theory in cold and ultracold collisions, *Review Modern Physics*, 71 (1999) 1-85.

[2] W.D. Watson, Physical processes for the formation and destruction of inter-stellar molecules, *Atomic and Molecular Physics and the Interstellar Matter*, North-Holland, Amsterdam (1974).

[3] T. Krichner, Laser-field-induced modifications of electron-transfer processes in ion-atom collisions, *Physical Review A* 69 (2004) 063412-419.

[4] R.K. Smith, N.S. Brickhouse, D.A. Liedahl, J.C. Raymond, Collisional plasma models with APEC/APED: Emission-line diagnostics of hydrogen-like and helium-like ions, *Astrophysical Journal Letters* 556 (2001) L91-L95.

[5] D.R. Bates, G.W. Griffing, Inelastic collisions between heavy particles I: Excitation and ionization of hydrogen atoms in fast encounters with protons and with other hydrogen atoms, *Proceedings of the Physical Society. Section A* 66 (1953) 961-971.

[6] J.D. Jackson, H. Schife, Electron capture by protons passing through hydrogen, *Physical Review* 89 (1953) 359-65.

[7] S. Saxena, G.P. Gupta, K.C. Mathur, Excitation of the hydrogen atom from its ground and metastable states by positron and proton impact at intermediate energies, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 17 (1984) 3743-3762.

[8] Dz. Belkic, R. Gayet, A. Salin, Electron capture in high-energy ion-atom collisions, *Physics Reports* 56 (1979) 279-369.

[9] D.S.F. Crothers, K.M. Dunseath, Target continuum distorted-wave theory for collisions of fast protons with atomic hydrogen, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 23 (1990) L365-L371.

[10] L. Lugosi, B. Paripas, I.K. Gyemant, K. Tokesi, Differential cross sections for positron