دینامیک بر خورد سه جسمی در تقریب مرتبه اول بر هم کنش توسط تابع موج کولنی در کانال تهییج

احسان درانی، رضا فتحی\*

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

## چکیدہ

یکی از مشکلاتی که در تقریب مرتبهٔ اول مربوط به برهمکنشهای الکترونی و هستهای در کانال تهییج و انرژیهای میانی و بالای برخورد وجود دارد این است که با در نظر گرفتن موج تخت بهعنوان تابع موج پرتابه، سهم جملهٔ مرتبه اول هستهای در محاسبهٔ سطح مقطع جزئی و کل بهدلیل تعامد توابع موج حالتهای اولیه و نهایی زیر سیستم مقید ظاهر نمیگردد. بدین منظور و برای حل این مشکل بنا داریم از تابع موج کولنی بهعنوان موج واپیچیده در محاسبات استفاده نماییم. لذا برآن شدیم که دینامیک برخورد سه جسمی را با این تابع موج بررسی کنیم. مطالعهٔ انجام شده نشان میدهد که نحوهٔ انتقال اندازه حرکت از پرتابه به هدف به سادگی محاسبات انجام شده توسط موج تخت نبوده و تابع وزنی (κ', k, K<sub>i</sub>, K<sub>f</sub>) نحوهٔ توزیع و انتقال اندازه حرکت را بیان کرده و سطح مقطع جزئی و کل را تحت تاثیر قرار خواهد داد. به دلیل نبودن نتایج تجربی در محدودهٔ انتقال اندازه مورد بحث، نتایج کارمان با نتایج تئوری در دسترس مقایسه شده است.

كليدواژ گان: برخورد سه جسمي، سطح مقطع جزئي برخورد، تابع موج كولني، كانال تهييج

## مقدمه

برخورد یونهای پرانرژی با اتم به مدت چندین دهه است که نظر فیزیکدانان را به خود جلب کرده است. در این میان برخوردهای سه و چهار جسمی از اهمیت ویژهای برخوردار میباشند [۲،۲]. چون به نظر میرسد که تاکنون تمام جنبههای مربوط به مسئلهٔ برخوردهای سه و چهار جسمی مورد بررسی قرار نگرفته، بنابراین می تواند بهعنوان یک مسئله تئوری که با جزئیات کامل حل نشده جای بحث را دارا باشد. از طرفی نتایج مربوط به سطح مقطع برخورد یونهای پرانرژی با اتم و مولکولهای متفاوت دارای کاربردهای فراوانی در شاخههای مختلف فیزیک میباشد. جستجو برای منابع

جدید انرژی، طراحی شتابدهندههای نسل جدید، کنترل فرآیندهای گداخت، طراحی لیزرهای پرقدرت، شبیهسازی محیط پلاسمایی و محیطهای بین ستارهای و از بین بردن سلولهای سرطانی توسط برخورد با یونهای پرانرژی نیاز به دانستن اطلاعات دقیق مربوط به سطح مقطع برخورد این فرآیندها را روشن می سازد [٥-٣].

بررسی و مقایسهٔ نتایج بهدست آمده از جدیدترین نتایج آزمایشگاهی با کارهای تئوری نشان میدهد که حتی در بهترین وضعیت ممکن، تفاوت قابل ملاحظه-ای بین این نتایج وجود دارد و این امر نشان میدهد

<sup>\*</sup>نويسنده مسئول: rfathi@uk.ac.ir

در برخورد یون با اتم و در انرژیهای بالا می توان از تقریبهای بورن ([7] برای محاسبه سطح مقطع بهره گرفت. در این انرژیها تقریب مرتبه اول بورن جوابهای نسبتاً دقیقی را در اختیار ما قرار میدهد. نشان داده شده است که در نظرگرفتن یتانسیل برهمکنش پرتابه-هسته که بهصورت کولنی در نظر گرفته میشود در کانال تهییج برای بهدست آوردن سطح مقطع و با در نظر گرفتن موج تخت بهعنوان تابع موج پرتابه بهدلیل تعامد توابع موج هیدروژن در حالت اولیه و نهایی با شکست روبرو شده و بنابراین اطلاعات مربوط به دینامیک زوایای بزرگ پراکندگی که مربوط به این برهمکنش می باشد از دست خواهد رفت. برای برطرف نمودن این مشکل از روشهای اختلالي تعميم يافته که به روش سه جسمي فاديف معروف است استفاده می شود [۷]. در این روش عملگر گذار به جای پتانسیل برهمکنش وارد مسئله مى گردد هرچند بەدلىل ماھىت بلندبرد بودن يتانسىل برهمكنش كولني محاسبة عملكر گذار با مشكل مواجه شده و بنابراین بهکارگیری این روش نیز خالی از اشکال نخواهد بود. در این ناحیه همچنین می توان از روشهای کلاسیکی مانند مسیرهای کلاسیکی مونت-كارلو [٨] استفاده كرد. اضافه كردن جملهٔ برهمكنشي یرتابه-هسته در این روش مسیر حرکت پرتابه را مختل خواهد نمود.

از جمله کارهای اولیهٔ انجام شده در خصوص برخورد یون با اتم هیدروژن، بهکارگیری تقریب مرتبهٔ اول بورن است که در سال ۱۹۵۳ توسط بیت و گریفینگ [۹] انجام پذیرفت. جکسون و شیف [۱۰] پیشنهاد دادند که سهم برهمکنش هستهای نیز در تقریب مرتبهٔ اول بورن گنجانده شود. این پیشنهاد در برخورد

<sup>3</sup>Classical trajectory Monte Carlo method

پرداخته نشده است. بنابراین بررسی دقیق این مسئله با در نظر گرفتن جنبههای مختلف برخورد برای ارائه مدل دقيق براي توصيف كانالهاي مختلف برخورد ضرورى بەنظر مىرسد. چون قرار است در مورد يک مسئله سه جسمي بحث شود لذا جنبه های مختلف این برخورد را مورد بررسی قرار خواهیم داد. در یک برخورد سه جسمی می توان سیستم را تحت عنوان یک پرتابه که اغلب یون برهنه به صورت  $P^{Z_{B^+}}$  و یک هدف با یک الکترون فعال به شکل  $(T^{Z_{A^{+}}} + e^{-})$  است معرفی نمود. فر آیندهای برخورد مربوط به این سیستم سه ذرهای بهصورت:  $P^{Z_{B^+}} + (T^{Z_{A^+}} + e^-) \rightarrow P^{Z_{B^+}} + (T^{Z_{A^+}} + e^-)$  $P^{Z_{B^+}} + (T^{Z_{A^+}} + e^-) \rightarrow P^{Z_{B^+}} + (T^{Z_{A^+}} + e^-)^*$ ۲  $P^{Z_{B^+}} + (T^{Z_{A^+}} + e^-) \rightarrow (P^{Z_{B^+}} + e^-) + T^{Z_{A^+}}$ ٣  $P^{Z_B^+} + (T^{Z_A^+} + e^-) \rightarrow P^{Z_B^+} + T^{Z_A^+} + e^-$ ۴ نشان داده می شود. فرآیند شمارهٔ ۱ برخورد الاستیک و فرآیندهای شماره ۲، ۳ و ۶ برخوردهای غیر الاستیک و بهترتیب تهییج مستقیم، انتقال بار الکتریکی و یونش نامیده میشوند. از بین برخوردهای سه جسمی برخورد يون با اتم هيدروژن از اهميت ويژهاي برخوردار است. دلیل این امر این است که ما با یک سیستم سه ذرهای واقعی روبرو هستیم که توابع موج و انرژی ترازهای مختلف آن مشخص است و بنابراین اطلاعات مناسبی از دقت مدل استفاده شده در بررسی دینامیک برخورد سه جسمی را در اختیار ما قرار میدهد. اگر قرار باشد که همین بحث در مورد اتم هلیوم مطرح گردد باید از دینامیک برخورد چهار جسمی و یا فرمولبندی سه جسمی با در نظر گرفتن مدل الکترون فعال استفاده شود که در کار حاضر

که هنوز جزئیاتی در تئوری وجود دارد که به آن

موضوعيت ندارد.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Born approximation <sup>2</sup>Faddeev

 $(H^+ + e)$  یون پرتابه به جرم  $M_P$  و  $(H^+ + e)$  که در آن  $A^{q+}$  یون پرتابه به جرم  $M_P$  و  $M_P$  یوت و یک الکترون به ترتیب با جرم های  $M_T$  و m = 1) میباشد. در دستگاه مختصات مرکز جرم دستگاه سه ذرهای [۱۳]، سطح مقطع دیفرانسیلی در گذار از حالت اولیه i به حالت نهایی f با رابطه:

$$\begin{split} \left\{ \frac{d\sigma_{i \to f}}{d\Omega} \right\}_{C.M} &= \frac{V_i V_f}{4\pi^2} \frac{K_f}{K_i} |A_{i \to f}|^2 \qquad \mathbb{I} \\ \left\{ \frac{d\sigma_{i \to f}}{d\Omega} \right\}_{C.M} &= \frac{V_i V_f}{4\pi^2} \frac{K_f}{K_i} |A_{i \to f}|^2 \qquad \mathbb{I} \\ \\ \mathcal{N}_i \text{ kolonometry of the state o$$

$$E = \frac{1}{2\nu_{i}} K_{i}^{2} + \varepsilon_{i} = \frac{1}{2\nu_{f}} K_{f}^{2} + \varepsilon_{f} \qquad \qquad \forall$$

نوشت که در آن  $\mathbf{K}_{i} = v_{i} \mathbf{v}_{i} = v_{f} \mathbf{v}_{f}$  و  $f \mathbf{v}_{f} = v_{f} \mathbf{v}_{i}$  بوده و  $\mathbf{v}_{i}$  و  $f \mathbf{v}_{f}$  بهترتیب سرعت اولیه و نهایی پرتابه نسبت به مرکز جرم زیر سیستم مقید میباشند. اگر  $T_{xy}$  عملگر گذار دو جسمی مربوط به اندرکنش دو جسم x و y بوده و پتانسیل برهمکنش این دو ذره با  $v_{xy}$  نمایش داده شود، عملگر گذار دو جسمی بهصورت:

<sup>5</sup>Continuum distorted wave

يروتون با اتم هيدروژن و در كانال انتقال بار منجر به نتایج قابل قبولی گردید و بهدلیل 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 بهدست میآمد. روش دیگری که در محاسبات سطح مقطع و در کانال تهییج از آن بهره گرفته میشود استفاده از تابع موج واپیچیده بهعنوان تابع موج پرتابه و یا استفاده از تابع موج کولنی<sup>؟</sup> [۱۱] است. بەدلىل جنبەھاى مخرب بلندبرد بودن پتانسىل کولنی در فیزیک اتمی و در مسائل برخورد از شرایط مرزی تصحیح شده روی تابع موج استفاده شده و آن را تحت عنوان نظريهٔ موج واپيچيدهٔ پيوسته [١٢] مي-شناسیم. در کار حاضر یک مسئلهٔ برخورد سه جسمی را در تقریب مرتبه اول و با در نظر گرفتن تابع موج کولنی بهعنوان تابع موج پرتابه در فضای اندازه حرکت مورد بررسی قرار داده و در این خصوص که انتقال اندازه حرکت از پرتابه به هدف با این تابع موج چگونه تغییر کرده و این امر سطح مقطع برخورد را به چه شكلي تحت تأثير قرار خواهد داد بحث خواهيم نمود. این یکی از آن جنبههایی است که در مسائل برخورد به آن کمتر پرداخته شده ولی از طرفی بهنظر میرسد که در بررسی دینامیک برخورد سه جسمی بسیار ضروری میباشد. لازم بهذکر است یادآور شویم در فرمولبندیهای حاضر از یکای اتمی استفاده شده و تمامي برهمكنشها بهصورت كولني خواهد بود.

**بخش نظری** در یک برخورد سه جسمی مانند برخورد یک یون برهنه با اتم هیدروژن و در کانال تهییج داریم: A<sup>q+</sup> +(H<sup>+</sup> + e) → A<sup>q+</sup> +(H<sup>+</sup> + e)\*

<sup>4</sup>Coulomb waves



شکل ۱. بردارهای توصیف کنندهٔ دستگاه سه جسمی. با توجه به شکل ۱ مجموعه مختصات (**r**<sub>P</sub>,**r**<sub>Te</sub>) توصیف کنندهٔ سیستم بوده و هامیلتونی کل سیستم سه ذرهای در دستگاه مختصات مرکز جرم را می توان به شکل:

نوشت بەطورى كە:

 $V = V_{Pe} + V_{Te} + V_{PT} = -\frac{1}{r_{Pe}} - \frac{1}{r_{Te}} + \frac{1}{r_{PT}}$  ۱٥ میباشد. در هامیلتونی ذکر شده *، v*<sub>e</sub> *µ* جرمهای کاهش یافته بوده ( $(\mu = mM_P/(m+M_P))$  و با تقریب خوبی  $\mathbf{r}_P \approx \mathbf{r}_P$  میباشد. اگر هامیلتونی کل به دو قسمت *H* و *iV* شکسته شود به روش جداسازی متغیرها میتوان به راحتی توابع موج مربوط به هامیلتونی *H* را بهدست آورده و از انجام این کار این است که حل دقیق توابع موج مربوط به هامیلتونی کل امکانپذیر نیست. برای بازچینی هامیلتونی ابتدا بهصورت زیر عمل میکنیم:  $H_i = -\frac{1}{2v_i} \nabla_{r_P}^2 - \frac{1}{2\mu_i} \nabla_{r_{Te}}^2 + V_{Te}$ 

و

$$V_{i} = V_{Pe} + V_{PT} = -\frac{1}{r_{Pe}} + \frac{1}{r_{PT}}$$

جوابهای هامیلتونی  $H_i$  بهصورت حاصل ضرب توابع موج اتم هیدروژن برای زیر سیستم مقید و تابع موج تخت بهعنوان تابع موج پرتابه ظاهر خواهند شد.

 $G_0^+ = (E - H_0)^{-1}$  مىشود [١٣]. در رابطة ٨ عملگر گرین انتشار آزاد کل سیستم سه ذرمای است. برای محاسبهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی و کل در کانال تهییج باید دامنه های پراکندگی متناظر با این کانال را که با A نمایش داده شد با قرار دادن عناصر عملگر گذار این کانال، بین حالتهای اولیه و نهایی سیستم بەدست آورد. در فرمولبندی حاضر دامنههای پراکندگی را از جملهٔ اول عملگر گذار يعنى پتانسيل برهمكنش بهدست خواهیم آورد و از دو جملهای که شامل برهمکنش مستقيم پرتابه-الكترون و همچنين برهمكنش پرتابه-هسته میباشد استفاده خواهیم کرد، بهطوری که مي توان نوشت:  $\tau_{E} = V_{Pe} + V_{PT}$ همان طور که گفته شد دامنهٔ پراکندگی ( $A_{i 
ightarrow f}$ ) با محاسبهٔ عناصر عملگر گذار  $au_{E}$  بین حالتهای اولیه و نهایی بهدست میآیند و میتوان دامنهٔ تهییج تا تقريب مرتبهٔ اول را بهصورت:  $A_{i \to f} = \left\langle f \mid \tau_E \mid i \right\rangle = \left\langle f \mid V_{Pe} \mid i \right\rangle + \left\langle f \mid V_{PT} \mid i \right\rangle \quad \land \bullet$  $A_{i \to f} = A_e^1 + A_n^1$ ۱۱ نمایش داد.  $A_e^1$  جملهٔ مرتبهٔ اول دامنهٔ پراکندگی برهم كنش مستقيم الكترون است و بهصورت:  $A_{e}^{1} = \langle f | V_{Pe} | i \rangle$ ١٢ تعريف می گردد و جملهٔ  $A_n^1$  که به دامنهٔ پراکندگی برهمكنش مرتبة اول مستقيم بين هستهاى معروف است به شکل:  $A_n^1 = \left\langle f \left| V_{PT} \right| i \right\rangle$ ۱٣

مشخص میشود. برای نوشتن روابط فوق میبایست

نکاتی در خصوص هامیلتونی مطرح شود.

٣٦

می توان بازچینی هامیلتونی را به شکل دیگری نیز مطرح نمود که مد نظر مقالهٔ حاضر است. اگر هامیلتونی کل به صورت زیر به  $H_i$  و  $V_i$  تقسیم شود مجدداً معادلهٔ دیفرانسیلی را به شکل جداسازی متغیرها می توان حل کرد. در این حالت پتانسیل  $\frac{1}{r_p} = 'V$  را به رابطهٔ ۱۲ اضافه و از رابطهٔ ۱۷ کم خواهیم کرد، به عبارتی خواهیم داشت:  $V_i = V_{Pe} + V_{PT} - V' = -\frac{1}{r_{Pe}} + \frac{1}{r_p} - \frac{1}{r_p}$ 

تابع موج این هامیلتونی بهصورت حاصل ضرب تابع موج اتم هیدروژن بهعنوان تابع موج زیر سیستم مقید در تابع موج کولنی بهعنوان موج واپیچیدۀ پرتابه ظاهر خواهد شد. باید دقت نمود که عبارت  $\left(\frac{1}{r_{pT}} - \frac{1}{r_p}\right)$  از مرتبۀ نسبت جرم الکترون به جرم هسته است و می-توان از آنها صرفنظر کرد بنابراین تنها پتانسیل باقیمانده در محاسبۀ سطح مقطع پتانسیل  $V_{pe}$  خواهد بود با این بازچینی تأثیر برهمکنش بین پرتابه و هسته در تابع موج ظاهر خواهد شد. توابع موج کولنی در کانالهای اولیه و نهایی را میتوان به شکل زیر نمایش داد [۱۵]:

٢٥

$$\psi_{\mathbf{K}_{i}}^{(+)}(\mathbf{r}_{p}) = N_{\mathbf{K}_{i}}e^{i\mathbf{K}_{i}\cdot\mathbf{r}_{p}} {}_{1}F_{1}(-i\eta_{i},1;-i(K_{i}r_{p}-\mathbf{K}_{i}\cdot\mathbf{r}_{p})$$

 اگر تابع موج ذرهٔ آزاد به صورت  $\mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  به نجار شده باشد این رابطه منجر به روابط بهنجارش  $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  و  $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  کواهد شد. ( $\mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  خواهد شد. مطابق رابطهٔ برای محاسبهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی میایست پتانسیل های اختلالی را بین حالتهای اولیه می بایست پتانسیل های اختلالی را بین حالتهای اولیه بین پرتابه-هسته مگر در حالت برخورد الاستیک که مورد نظر ما نمی باشد صفر شده و جملهٔ برهم کنش پرتابه-الکترون که به شکل  $\langle \mathbf{K}_{i} n_{i} | V_{Pe} | \mathbf{K}_{i} n_{i} \rangle$  ظاهر پرتابه-الکترون که به شکل ( $\mathbf{K}_{i} n_{i} | \mathbf{K}_{i} n_{j} | V_{Pe} | \mathbf{K}_{i} n_{i} \rangle$  دا ا

$$V_{Pe} = -\frac{1}{\left|\mathbf{r}_{P} - \mathbf{r}_{Te}\right|} = \frac{1}{2\pi} \int \frac{\exp(-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_{P} - \mathbf{r}_{Te}))}{q^{2}} d^{3}q$$

$$\left\langle \mathbf{K}_{f} n_{f} \left| V_{P_{e}} \right| \mathbf{K}_{i} n_{i} \right\rangle =$$

$$\frac{1}{2\pi^{2}} \left( \int d^{3}q \frac{1}{q^{2}} \left\langle \mathbf{K}_{f} \left| e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{p}} \right| \mathbf{K}_{i} \right\rangle \left\langle n_{f} \left| e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{re}} \right| n_{i} \right\rangle \right)$$

$$\text{ In the second s$$

$$\left\langle \mathbf{K}_{f} \left| e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{p}} \left| \mathbf{K}_{i} \right\rangle = (2\pi)^{3} \delta(\mathbf{K}_{i} - \mathbf{K}_{f} - \mathbf{q}) \right\rangle$$

و
$$\langle n_f \left| e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}_{fc}} \left| n_i \right\rangle = f_{if} \left( \mathbf{q} \right)$$
۲۱ کمیت  $f_{if} \left( \mathbf{q} \right)$  به عامل شکل معروف است و به شکل  
تحلیلی در مرجع [۱٤] محاسبه شده است. بنابراین  
داریم:

$$\left\langle \mathbf{K}_{f} n_{f} \left| V_{Pe} \right| \mathbf{K}_{i} n_{i} \right\rangle = 4\pi K^{-2} f_{if} (\mathbf{K})$$
  $\Upsilon \Upsilon$ 

بهطوریکه  $\mathbf{K} = \mathbf{K}_i - \mathbf{K}_f$  تغییر اندازه حرکت پرتابه در طول فرآیند پراکندگی است. تخت وجود نداشته و این پیچیدگی از تأثیر برهمکنش هستهای ناشی می شود. مقایسهٔ روابط ۲۲ و ۳۱ نشاندهندهٔ این مطلب است که اگر تابع وزنی به صورت حاصل ضرب دو توزیع دلتای دیراک به شکل

 $\Omega(\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{K}_i,\mathbf{K}_f) = \delta(\mathbf{K}_i - \mathbf{k})\delta(\mathbf{K}_f - \mathbf{k}')$ در نظر گرفته شود به روابط موج تخت منجر خواهد شد ولی نکته این است که این تابع وزنی مانند دلتای دیراک عمل نکرده و اعتقاد داریم که در نظر گرفتن موج كولني در محاسبات، شكل تابع توزيع اندازه حرکت را تغییر داده و تابع توزیع جدیدی را وارد مسئله خواهد نمود. اگر به تبدیل فوریهٔ تابع موج کولنی در فضای اندازه حرکت دقت شود به یکی از شکلهای تابع دلتای دیراک بسیار نزدیک بوده و حدس ما این است که بیشترین سهم سطح مقطع دیفرانسیلی و کل مربوط به این شکل از تابع وزنی باشد. بررسی دقیقتر مسئله نیاز به کار محاسباتی پیچیدهای دارد که عملکرد این تابع وزنی را مشخص نماید. همچنین داشتن نتایج تجربی با دقت بالا می-تواند برای مقایسهٔ نتایج و روشن نمودن جنبههای مختلف این تابع وزنی کارساز باشد که در محدودهٔ انرژی مورد بحث وجود ندارد. سعی ما براین است که در مقالهٔ دیگری رابطهٔ۳۱ را با جزئیات در فضای موقعیت مورد بررسی قرار دهیم. در کار حاضر دو قسمت از رابطهٔ ۳۱ در فضای موقعیت که فرم تابع دلتای دیراک دارند مورد بررسی قرار گرفته و نتایج با این دو قسمت ارائه شده است. این امر تأیید کنندهٔ همان صحبت قبلي است كه در تابع وزني بهدست آمدهٔ رابطهٔ ۳۱ شکل تابع دلتای دیراک نیز وجود خواهد داشت. محاسبات عددی دقیقتری در خصوص محاسبهٔ سطح مقطع جزئی و کل در مقالهٔ دیگری با جزئیات ارائه خواهد شد. در محاسبات عددی سعی نمودیم که ب.هطوری کـه ( $\phi_{\mathbf{K}_{f}}^{(+)}(\mathbf{k}') \in \phi_{\mathbf{K}_{i}}^{(+)}(\mathbf{k})$  ب.هترتیب تبدیل فوریـه توابع موج کولنی در کـانـال اولیـه و نهـایی میباشند. در این صورت خواهیم داشت: میباشند. در این صورت خواهیم داشت:  $\langle \mathbf{K}_{f} | e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}} | \mathbf{K}_{i} \rangle = \int d^{3}r \psi_{\mathbf{K}_{f}}^{(-)*}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{K}_{i}}^{(+)}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}}$  $= \int d^{3}r \int d^{3}k \phi_{\mathbf{K}_{i}}^{(+)}(\mathbf{k}) \int d^{3}k' \phi_{\mathbf{K}_{f}}^{(-)*}(\mathbf{k}') e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}).\mathbf{r}}$ اگر ابتدا نسبت به متغیر r انتگرال گرفته شود داریم: ۳.

 $\left\langle \mathbf{K}_{f} \left| e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left| \mathbf{K}_{i} \right\rangle = \\ (2\pi)^{3} \int d^{3}k \int d^{3}k' \varphi_{\mathbf{K}_{f}}^{(-)*}(\mathbf{k}') \varphi_{\mathbf{K}_{i}}^{(+)}(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{q}) \right.$ 11 ministration of the set of the set

 $\left\langle \mathbf{K}_{f} n_{f} \left| V_{Pe} \right| \mathbf{K}_{i} n_{i} \right\rangle =$   $4\pi K^{-2} \int d^{3}k \int d^{3}k' \Omega(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{K}_{i}, \mathbf{K}_{f}) f_{if} (\mathbf{k} - \mathbf{k}')$   $\text{cer mee be constructed on the set of the se$ 

## بحث و نتیجه گیری

همان طورکه نشان داده شد محاسبهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی و کل به دو عامل بستگی دارد. عامل اول وابسته به ذرهٔ فرودی و پراکنده شده و تغییر اندازه حرکت آن است و عامل دوم عامل شکل نام دارد که از مشخصات هدف می باشد. تابع وزنی به دست آمده در روابط ذکر شده یک نوع پیچیدگی در تغییر اندازه حرکت پرتابه را نشان می دهد که در محاسبات با موج



شکل ۲. مقایسهٔ سطح مقطعهای دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر (دو قسمت از موج کولنی) در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژیهای ۱۰۰٬۳۰۰٬۵۰۰ و ۱۰۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

با توجه به نتایج کاری که در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و با تقریب موج تخت انجام شده در انرژی-های میانی ۷۰۰*ev* و ۲۰۰*ev* سطح مقطع کل محاسبه شده بزرگتر از دو نتیجهٔ نظری مراجع [۱7] و [۱۷] است که دلیل آن را به راحتی میتوان در شکل-های ۳ و ٤ مشاهده کرد. در زوایایی که بیشترین تأثیر را روی سطح مقطع کل دارند نتایج سطح مقطع دیفرانسیلی نتایج موج تخت بالاتر از دو نتیجهٔ تئوری دیگر قرار گرفته است.



شکل ۳. مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر با در نظر گرفتن موج تخت در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۱۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه

برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن را به چند دلیل در نظر بگیریم. اول این که چون پوزیترون جرمی برابر با جرم الكترون ولى بارى با علامت مخالف أن دارد لذا این ذره را دارای خواص یکتایی نموده و اینکه برخورد این یون با اتم، مفاهیم برهمکنش ماده و ضدماده را در بر میگیرد میتواند بهعنوان آزمونی از دقت تئوری بهکار گرفته شده در مقایسه با سایر تئوریها باشد. از طرفی در برخورد این یون با اتم هیدروژن ممکن است پوزیترونیم در کانال انتقال بار تشکیل گردد یا نابودی دو ذره (الکترون و پوزیترون) را بههمراه داشته باشد که در برخورد الکترون با اتم هيدروژن قابل مشاهده نيست. همچنين اثر تبادلي<sup>٢</sup> الكترون-الكترون در اين برخورد وجود نداشته و به نظر میرسد که این امر بررسی مسئله را آسان تر خواهد نمود. شکل۲ نتایج مربوط به سطح مقطع دیفرانسیلی در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن است که در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته محاسبه شده است. همانطوریکه در شکل مشاهده می شود با افزایش انرژی سطح مقطع دیفرانسیلی با افزایش زاویهٔ پراکندگی سریعاً کاهش مییابد. لازم بهذکر است گفته شود که نتایج کار حاصل تا زاویهٔ ٦٠ درجه که بیشترین تأثیر را در سطح مقطع کل دارند ارائه شده است. در زوایای بزرگتر پراکندگی مشاهده میشود که سطح مقطع دیفرانسیلی خیلی کوچک میشود و ما این مسئله را ناشی از این امر میدانیم که جملات دیگر تابع وزنی که در محاسبات وارد نشده در زوایای بزرگتر پراکندگی غالب هستند ولی تأثیر چندانی بر داشت. نخواهند سطح مقطع کل

<sup>6</sup> Exchange effect



شکل٦. مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر با در نظر گرفتن موج تخت و دو قسمت از موج کولنی در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۲۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

نظر ما این است که محاسبات انجام شده با موج کولنی در کانال تهییج مانند افزودن پتانسیل پرتابه – هسته در کانال انتقال بار است. بهطوریکه نشان داده شده با اضافه کردن این جمله به برهمکنش الکترونی به دلیل فاز مخربی که بین این دو جمله بهوجود می آید شاهد کاهش سطح مقطع کل خواهیم بود. این امر برای هر دو انرژی ۷۲۰۰ و ۲۰۰ و ۲۰۰ قابل مشاهده است.

در قسمت دیگری از کار، نتایج بهدست آمده با نتایج تئوری موج واپیچیده [۱۸] که یکی از معتبرترین کارهای تئوری انجام شده در کانال تهییج میباشد مقایسه شده است. در شکل ۷ این مقایسه برای دو انرژی ۷۵ ۷۷ و ۷۶ ۱۰۰ از تئوری موج واپیچیده و انرژیهای ۷۹ ۱۰۰ و ۲۰۰۷ از کار حاضر قابل مشاهده است. اگر در مورد انرژی ۲۰۰۷ به هر دو روش دقت نماییم خواهیم دید که در آن ناحیهای که منحنی روی هم افتادهاند. در زوایای کوچکتر و بزرگتر از این ناحیه نتایج کار حاصل زیر منحنی تئوری موج واپیچیده قرار دارد و این امر نشان میدهد که افزودن به اولین حالت برانگیخته با نتایج مسیرهای کلاسیکی مونت کارلو [۱۲] و روش جفت شدگی نزدیک [۱۷].



شکل ٤. مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر با در نظر گرفتن موج تخت در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۲۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته با نتایج مسیرهای کلاسیکی مونت کارلو [17] و روش جفتشدگی نزدیک [17].

همان طورکه در شکلهای ۵ و ۲ مشخص است محاسباتی که توسط امواج کولنی انجام می شود در زوایایی که بیشترین تأثیر را بر سطح مقطع کل دارند در زیر نتایج موج تخت قرار می گیرند و این امر سبب می گردد که نتایج سطح مقطع کل بهبود یافته و به دو نتیجهٔ تئوری های یاد شده نزدیک تر گردد.



شکل۵. مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر با در نظر گرفتن موج تخت و دو قسمت از موج کولنی در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی ۱۰۰ الکترون ولت و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته.

ندارند و در این مقاله آورده نشدهاند میتواند در زوایای کوچک و بزرگ پراکندگی ظاهر شود.



شکل۷. مقایسهٔ سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده در کار حاضر با در نظر گرفتن دو قسمت از موج کولنی در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژیهای ذکر شده و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته با نتایج کار تئوری موج واپیچیده [۱۸].



شکل ۸ مقایسهٔ سطح مقطع کل محاسبه شده در کار حاضر با در نظر گرفتن دو قسمت از موج کولنی در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و در گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته با سایر تئوریهای در دسترس. نتایج روش موج واپیچیده [۱۸] (خط توپر)، نتایج والتر [۱۷] (نقطه چین)، نتایج مسیرهای کلاسیکی مونت کارلو [۱۲] (خط-نقطه چین)، نتایج جفت-شدگی نزدیک [۱۹] (خط-نقطه حین)، کار حاضر (خط چین).

در شکل۸ سطح مقطع کل محاسبه شده در کار حاضر با نتایج سایر تئوریهای موجود در دسترس مقایسه

شده است. نتایج در توافق خوبی با تئوریهای دیگر خصوصاً با نتایج والتر و جفت شدگی نزدیک در انرژیهای میانی است. ولی به نظر می رسد که جای نتایج تجربی برای بالا بردن دقت مقایسه در این محدودهٔ انرژی خالی است. نکتهٔ قابل توجه این است که محاسبات کار حاضر بسیار سادهتر از تئوریهای که از تئوریهای معتبر در انرژیهای میانی هستند می-باشد و بهنظر نویسندگان یک موفقیت در ساده سازی محاسبات عددی مربوط به سطح مقطع کل در مبحث پراکندگی یون-اتم در انرژیهای میانی محسوب می گردد.

## پیوست \_ تابع موج کولنی در فضای تکانه

۱۳پ

$$\varphi_{k_f}^{-}(\mathbf{k}) = \mathrm{e}^{-\pi\eta_f/2} \Gamma(1-i\eta_f) \left( \frac{\mathrm{k}^2 - k_f^2}{|\mathbf{k}_f - \mathbf{k}|^2} \right)^{-i\eta_f} \times \left( (1-i\eta_f) \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}) - \frac{\eta_f k_f}{\pi^2 (k^2 - k_f^2) |\mathbf{k}_f - \mathbf{k}|^2} \right)$$

با استفاده از تعریف فرم فاکتور و استفاده از رابطهٔ ۱۹ متن رابطهٔ زیر را خواهیم داشت:

$$\left\langle \mathbf{K}_{f} n_{f} \left| V_{P_{e}} \right| \mathbf{K}_{i} n_{i} \right\rangle = \frac{1}{2\pi^{2}} \int \frac{F_{ij}(\mathbf{q})}{q^{2}} d\mathbf{q}$$
$$\times \iint \varphi_{k_{f}}^{-*}(\mathbf{k}') \varphi_{k_{i}}^{+}(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{q}) d\mathbf{k} d\mathbf{k}'$$

$$\left\langle \mathbf{K}_{f} n_{f} \left| V_{P_{e}} \right| \mathbf{K}_{i} n_{i} \right\rangle = \frac{1}{2\pi^{2}} \iint \varphi_{k_{f}}^{-*}(\mathbf{k}') \varphi_{k_{i}}^{+}(\mathbf{k}) \frac{F_{ij}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\left| \mathbf{k} - \mathbf{k}' \right|^{2}} d\mathbf{k} d\mathbf{k}'$$

$$\left\langle \mathbf{K}_{f} n_{f} \left| V_{P_{e}} \right| \mathbf{K}_{i} n_{i} \right\rangle = \frac{2^{3/2}}{\pi^{2}} e^{-\pi (\eta_{i} + \eta_{f})/2} \\ \times \Gamma(1 + i\eta_{i}) \Gamma(1 + i\eta_{f}) (\mathbf{T}_{1} + \mathbf{T}_{2})$$

$$\geq \mathbf{K}_{f} \mathbf{K}$$

$$\boldsymbol{\xi}$$
  $g = -\frac{\eta_i k_i}{\pi^2 (k^2 - k_i^2) |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}|^2}$   $\boldsymbol{\chi}$ 

میباشند. با توجه به تعریف تابع دلتای دیراک رابطهٔ ۷پ بهصورت:

$$f = (1 + i\eta_i)\delta(\mathbf{k_i} - \mathbf{k})$$
پ

بازنویسی میشود. با استفاده از روابط ۸ و ۹ داریم:

$$\varphi_{k_i}^{+}(\mathbf{k}) = \mathbf{e}^{-\pi\eta_i/2} \Gamma(1+i\eta_i) \left(\frac{\mathbf{k}^2 - k_i^2}{|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}|^2}\right)^{i\eta_i} \times \left((1+i\eta_i)\delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}) - \frac{\eta_i k_i}{\pi^2(k^2 - k_i^2)|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}|^2}\right)$$

تابع موج ذره خروجی در فضای تکانه هم از رابطه:

$$\varphi_{k_{f}}^{-}(\mathbf{k}) = \varphi_{k_{i}}^{+}(\mathbf{k})^{*}$$
 باب

بەدست مىآيد. بنابراين مىتوان نوشت:

مراجع

[1] P.F. Bedaque, E. Braaten, H.W. Hammer, Three-body Recombination in Bose Gases with Large Scattering Length, *Physical Review Letters* 85 (2000) 908-912.

[2] F. Melchert, S. Krüdener, K. Huber, E. Salzborn, Electron detachment in H<sup>+</sup>-H collisions, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 32 (1999) L139-L144.

[3] D. Belkić, Review of Theories on Ionization in Fast Ion/Atom Collisions with Prospects for Applications to Hadron Therapy, *Journal of Mathematical Chemistry* 47 (2010) 1366-1419.

[4] R.K. Smith, N.S. Brickhouse, D.A. Liedahl, J. Raymond, Collisional Plasma Models with APEC/APED: Emission-Line Diagnostics of Hydrogen-like and Helium-like Ions, *The Astrophysical Journal Letters* 556 (2001) L91-L95.

[5] T. Kirchner, Laser-field-induced modifications of electron-transfer processes in ion-atom collisions, *Physical Review A* 69 (2004) 063412-418

[6] M.R.C. McDowell, J.P Coleman, Introduction to the theory of Ion-Atom scattering, North-Holland, Amsterdam, (1970).

[7] R. Fathi, E. Ghanbari-Adivi, M.A. Bolorizadeh, F. Shojaei , M. J. Brunger, Excitation of hydrogen atoms at intermediate and high energies by proton impact under a three-body Born-Faddeev-type formalism, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 42 (2009) 125203-211.

[8] R.C. Davidson, M.A. Dorf, I.D. Kaganovich, H. Qin, A. Sefkow, E.A. Startsev, D.R. Welch, D.V. Rose, S.M. Lund, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 606 (2009) 11-21.

$$\mathbf{T}_{1} = (1+i\eta_{f})(1+i\eta_{i})\int \delta(\mathbf{k}_{f}-\mathbf{k}') \left(\frac{\mathbf{k}'^{2}-k_{f}^{2}}{|\mathbf{k}_{f}-\mathbf{k}'|^{2}}\right)^{i\eta_{f}} d\mathbf{k}'$$
$$\times \int \left(\frac{\mathbf{k}^{2}-k_{i}^{2}}{|\mathbf{k}_{i}-\mathbf{k}|^{2}}\right)^{i\eta_{i}} \frac{\delta(\mathbf{k}_{i}-\mathbf{k})}{(2.25+|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^{2})^{3}} d\mathbf{k}$$

$$\begin{split} \mathbf{T}_{2} &= \frac{1}{\pi^{4}} \int \frac{\left(k'^{2} - k_{f}^{2}\right)^{i\eta_{f}-1}}{\left|\mathbf{k}_{f} - \mathbf{k}'\right|^{2(i\eta_{f}+1)}} d\mathbf{k}' \\ &\times \int \frac{\left(k^{2} - k_{i}^{2}\right)^{i\eta_{i}-1}}{\left(2.25 + \left|\mathbf{k} - \mathbf{k}'\right|^{2}\right)^{3} \left|\mathbf{k}_{i} - \mathbf{k}\right|^{2(i\eta_{i}+1)}} d\mathbf{k} \\ &a_{0}, \text{Immit it. acclust it is a constrained of a strained of the s$$

$$T_{1} = \frac{(1+i\eta_{f})(1+i\eta_{i})(0)^{(4-i)f}}{(2.25+|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^{2})^{3}}$$

خواهـد بود. بـا جـایگذاری رابطهٔ ۱۹پ در رابطهٔ ۱۹پ داریم:

 $\left< \mathbf{K}_{f} n_{f} \left| V_{Pe} \right| \mathbf{K}_{i} n_{i} \right> = \frac{2^{3/2}}{\pi^{2}} \frac{\Gamma(2 + i\eta_{i})\Gamma(2 + i\eta_{f})(0)^{i(\eta_{i} + \eta_{f})}}{(2.25 + \left| \mathbf{k}_{i} - \mathbf{k}_{f} \right|^{2})^{3}}$ andi dec 2s amakes as an eccled to the state of the s

دینامیک برخورد سه جسمی در تقریب مرتبه اول ...

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

[19] K. Ratnavelu, J. Mitory and A. T. Stelbovics, The positron-hydrogen system at high energies in a six-state model, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 29 (1996) 2775-2796.

[20] A.C.T. Chan, Distorted wave born approximation for inelastic atomic collision, Msc thesis, University of Waterloo (2007). [9] D.R. Bates, G. Griffing, Inelastic Collisions between Heavy Particles I: Excitation and Ionization of Hydrogen Atoms in Fast Encounters with Protons and with other Hydrogen Atoms, *Proceeding of the Physical Society A* 66 (1953) 961-971.

[10] J.D. Jackson, H Schiff, Electron Capture by Protons Passing through Hydrogen, *Physical Review* 89 (1953) 359-364.

[11] J. Macek, S. Alston, Theory of electron capture from a hydrogenlike ion by a bare ion, *Physical Review A* 26 (1982) 250-270.

[12] N.C. Deb, D.S.F. Crothers, Electron capture into excited s states in the target continuum distorted-wave approximation, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 22 (1989) 3725-3732.

[13] C.J. Joachain, Quantum collision theory, North Holland, Amsterdam (1975).

[۱۵] ر. فتحی، ف. شجاعی اکبرآبادی، م.آ. بلوریزاده، محاسبه سطح مقطع کل تهییج در برخورد یون برهنه <sup>+4</sup>A با اتم هیدروژن در گذار از حالت پایه به حالتهای ۲۶ و ۳۵ در تقریب بورن-فادیف ، مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران ۳ (۱۳۹۱)، ۵۷–۲۳.

[15] B.H. Bransden, M.R.C. McDowell, Charge Exchange and Theory of Ion-Atom Collision, Clarendon press, Oxford (1992).

[16] L. Lugosi, B. Paripas. I. K. Gyemant, K. Tokesi, Differential cross sections for positron impact excitation of hydrogen, *Radiation Physics and Chemistry Journal* 68 (2003) 199-203.

[17] H.R. 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.