



لَهُ الْحَمْدُ



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش اتمی مولکولی

فرمول‌بندی چهارذره‌ای برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم  
هليوم

استاد راهنما:

دکتر ابراهیم قنبری

پژوهشگر:

عظیمه ولایتی

۱۳۹۱ مهرماه

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتكارات  
و نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه  
متعلق به دانشگاه اصفهان است.



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گراییش اتمی مولکولی خانم عظیمه ولایتی  
تحت عنوان

### فرمول‌بندی چهار ذره‌ای برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم هلیوم

در تاریخ ۹۱/۷/۲۹ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه **.....** به تصویب نهایی رسید.

- ۱- استاد راهنمای پایان نامه دکتر ابراهیم قنبری با مرتبه‌ی علمی استادیار  
امضا
- ۲- استاد داور داخل گروه دکتر رسول رکنیزاده با مرتبه‌ی علمی دانشیار  
امضا
- ۳- استاد داور خارج از گروه دکتر علی مهدی‌فر با مرتبه‌ی علمی استادیار  
امضا

امضای مدیر گروه



وَلَذِكْرُهُ لَازِمٌ...  
رَبِّ الْأَنْوَارِ لِذِكْرِهِ شَدِيدٌ

سوره‌ی ابراهیم، آیه‌ی (۷۶)

پس سیکران پروردگار یکتارا که هستی مان بخشد

وبه طریق علم و دانش رہنمایان شد

وبه هم نشینی رهروان علم و دانش معتبرمان نمود

و خوش‌چینی از علم و دانش را روزیان ساخت...

و با پاس فراوان از استاد ارجمند جناب آقا دکتر قمری که در تامی مراعل کار با همای خالصانه‌ی خویش پتوانه‌ی محکمی برای من بودند و  
خانواده‌ی عزیزم که صبورانه با من همراه بوده و کاستی‌های مرانایده که فقط تباخی آسوده به ادامه‌ی راه مصمم شوم ...

لعدیم به:

م در و م ا د ر ع ز ن ز  
۴

و خواهر مهربانم

## چکیده

تقریب چهارذرای مرتبه‌ی اول موج واپیچیده‌ی کولن-بورن (CBDW-4B) و تقریب چهارذرای مرتبه‌ی اول بورن با شرایط مرزی صحیح (CB1-4B)، برای بررسی فرآیند تشکیل پوزیترونیوم در اثر رباش تک الکترون مقید به هدف اتمی چندالکترونی با بار هسته‌ای  $Z_T$  توسط پرتابه‌ی پوزیترون فرمول‌بندی شده‌است. تأثیر هم‌بستگی دینامیکی بین الکترونی با به‌کار بردن شکل کامل پتانسیل اختلال، در نظر گرفته شده‌است. شکل پسین دامنه‌ی گذار برای مبادله‌ی تک الکترون، بر حسب انتگرال‌های یک و دو بعدی، و شکل پیشین دامنه‌ی گذار بر حسب انتگرال‌های یک، دو و چهار بعدی محاسبه شده‌اند. به طور خاص محاسبات عددی برای محاسبه‌ی سطح مقطع جزئی و سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون‌های پرسرعت با اتم هلیوم در حالت پایه، انجام شده‌است. در این بررسی دوتابع موج متفاوت (تابع موج تک پارامتری هلیراس و تابع موج بدست آمده با در نظر گرفتن هم‌بستگی شعاعی) برای توصیف حالت مقید اولیه‌ی دو الکترون فعال هدف استفاده شده که سطح مقطع کل به‌دست آمده از این دوتابع موج، بسیار به یکدیگر نزدیک است. نتایج حاصل با نتایج روش‌های نظری دیگر و همچنین نتایج تجربی موجود مقایسه شده و در انرژی‌های میانی و بالا مطابقت خوبی را نشان می‌دهد. همچنین سطح مقطع جزئی و سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونیوم در اثر رباش تک الکترون از لایه‌ی  $K$  اتم‌های کربن و نیون در حالت پایه، با در نظر گرفتن دو تقریب فوق محاسبه شده‌است. برای توصیف حالت اولیه‌ی دو الکترون فعال هدف، تابع موج‌های روتان-هارتی-فوک و برای توصیف حالت نهایی الکترون انتقال نیافته، تابع موج هیدروژنی به‌کار رفته است. نتایج بدست آمده از دو روش، با یکدیگر و نیز با نتایج حاصل از روش‌های سه‌ذرای مقایسه شده‌است.

**کلیدواژه‌ها:** فرمول‌بندی چهارذرای، تشکیل پوزیترونیوم، تقریب موج واپیچیده‌ی کولن-بورن، سطح مقطع جزئی و کلی

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	<b>فصل اول : پراکندگی</b>
۱	۱-۱ مفاهیم بنیادی ..... ۱
۱	۱-۱-۱ دسته‌بندی برخوردها ..... ۱
۴	۱-۱-۲ سطح مقطع ..... ۴
۵	۱-۱-۳ چارچوب مرکز جرم و آزمایشگاه ..... ۵
۷	۱-۲ معادله‌ی شرودینگر وتابع موج‌های کوانتومی پراکندگی ..... ۷
۸	۱-۲-۱ رابطه‌ی بین شرایط مرزی و وضعیت آزمایشگاهی ..... ۸
۹	۱-۳ رابطه‌ی بین دامنه و سطح مقطع پراکندگی ..... ۹
۱۱	۱-۴ ماتریس $T$ ..... ۱۱
۱۲	۱-۵ تقریب بورن ..... ۱۲
۱۳	۱-۶ برخوردهای بازچینی ..... ۱۳
۱۴	۱-۶-۱ ماتریس $T$ در برخوردهای بازچینی ..... ۱۴
۱۵	۱-۶-۲ سری بورن در برخوردهای بازچینی ..... ۱۵
۱۶	۱-۷ پراکندگی بهوسیله پتانسیل کولمبی ..... ۱۶
۱۷	۱-۷-۱ پتانسیل کولمبی در مختصات سه‌بعدی ..... ۱۷
۲۰	۱-۸ پراکندگی دوپتانسیلی ..... ۲۰
۲۰	۱-۸-۱ فرمول‌بندی دوپتانسیلی و تقریب موج واپیچیده بورن ..... ۲۰
۲۲	۱-۸-۲ محاسبه‌ی دامنه‌ی گذار برخوردهای بازچینی با کمک فرمول‌بندی دوپتانسیلی ..... ۲۲
۲۴	<b>فصل دوم: تقریب سه ذره‌ای مرتبه‌ی اول موج واپیچیده کولمب-بورن و تقریب سه ذره‌ای مرتبه‌ی اول بورن با شرایط مرزی صحیح</b>
۲۴	۱-۲ مدل سه ذره‌ای ..... ۲۴
۲۸	۱-۲-۱ فرمول‌بندی تقریب سه ذره‌ای موج واپیچیده کولمب-بورن ..... ۲۸
۲۸	۱-۲-۲ شکل استاندارد ماتریس $T$ ..... ۲۸

عنوان		صفحه
۲-۲-۲ کانال‌های ورودی و خروجی .....	۲۷	
۳-۲-۲ اصلاح شرایط مرزی .....	۲۹	
۳-۲ استفاده از تقریب CBDW-3B در بررسی برخورد پوزیترون با اتم‌های چند الکترونی .....	۳۱	
۱-۳-۲ معرفیتابع موج‌های روتان-هارتی-فوک .....	۳۱	
۲-۳-۲ محاسبه شکل انتگرالی دامنه گذار .....	۳۲	
۴-۲ فرمول‌بندی تقریب سه ذره‌ای بورن با شرایط مرزی صحیح (CB1-3B) .....	۳۷	
۱-۴-۲ سری اختلالی با شرایط مرزی صحیح .....	۳۷	
۲-۴-۲ معادله‌ی لیپمن-شوینگر برای برخورد سه‌ذره‌ای .....	۳۷	
۳-۴-۲ سری بورن با شرایط مرزی صحیح برای برخورد سه‌ذره‌ای .....	۳۸	
۴-۴-۲ عناصر ماتریس T و کانال‌های ورودی و خروجی .....	۳۹	
۵-۲ استفاده از تقریب CB1-3B در بررسی برخورد پوزیترون با اتم‌های چند الکترونی .....	۴۱	
۱-۵-۲ محاسبه شکل انتگرالی دامنه گذار .....	۴۱	
۶-۲ محاسبه سطح مقطع جزئی و سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونیوم .....	۴۳	
<b>فصل سوم: تقریب چهار ذره‌ای مرتبه‌ی اول موج واپیچیده کولمب-بورن و تقریب چهار ذره‌ای مرتبه‌ی اول بورن با شرایط مرزی صحیح</b>		
۱-۳ مدل چهار ذره‌ای .....	۴۵	
۲-۳ فرمول‌بندی تقریب چهار ذره‌ای موج واپیچیده کولمب-بورن (CBDW-4B) .....	۴۸	
۱-۲-۳ شکل استاندارد ماتریس T .....	۴۸	
۲-۲-۳ کانال ورودی .....	۴۹	
۳-۲-۳ کانال خروجی .....	۵۱	
۳-۳ استفاده از تقریب CBDW-4B در بررسی برخورد پوزیترون با اتم‌های چندالکترونی .....	۵۴	
۱-۳-۳ شکل انتگرالی دامنه‌ی گذار برای تشکیل پوزیترونیوم از اتم هلیوم .....	۵۴	
۲-۳-۳ شکل انتگرالی دامنه گذار برای تشکیل پوزیترونیوم از اتم‌های کربن و نئون .....	۶۲	
۴-۳ فرمول‌بندی تقریب چهار ذره‌ای بورن با شرایط مرزی صحیح (CB1-4B) .....	۶۴	
۱-۴-۳ عناصر ماتریس T .....	۶۴	

عنوان	صفحه
۳-۵ استفاده از تقریب CB1-4B در بررسی برخورد پوزیترون با اتم‌های چندالکترونی	۶۶
۳-۵-۱ شکل انتگرالی دامنه گذار برای تشکیل پوزیترونیوم از اتم هلیوم	۶۶
۳-۵-۲ شکل انتگرالی دامنه گذار برای تشکیل پوزیترونیوم از اتم‌های کربن و نئون	۶۹
۳-۶ محاسبه سطح مقطع جزئی و سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونیوم در روش‌های چهار ذره‌ای	۷۰

#### فصل چهارم : نتایج

۴-۱ بررسی سطح مقطع تشکیل پوزیترونیوم از اتم هلیوم	۷۱
۴-۱-۱ نتایج روش‌های سه‌ذره‌ای	۷۱
۴-۱-۲ نتایج حاصل از روش‌های چهارذره‌ای	۷۶
۴-۲ بررسی سطح مقطع تشکیل پوزیترونیوم از لایه‌ی K اتم‌های کربن و نئون	۸۳
جمع‌بندی مطالب و نتیجه‌گیری	۸۶
مراجع	۸۸

## فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱: سطح مقطع جزئی	۴
شکل ۱-۲: پراکندگی در چارچوب آزمایشگاه و چارچوب مرکز جرم	۶
شکل ۱-۳: مجموعه مختصات ژاکوبی در یک سیستم برخورد سه جسمی	۲۵
شکل ۲-۱: سیستم سه ذره‌ای در چارچوب آزمایشگاه	۲۶
شکل ۲-۲: مختصات مرکز جرم مورد استفاده برای سیستم چهار ذره‌ای	۴۶
شکل ۲-۳: سیستم چهار ذره‌ای در چارچوب آزمایشگاه	۴۶
شکل ۳-۱: روابط برداری در مختصات مرکز جرم	۵۵
شکل ۳-۲: DCS: محاسبه شده با سه مقدار متفاوت $Z_T$ برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم‌های هلیوم در انرژی $100 \text{ eV}$ با استفاده از تقریب‌های CB1-3B و CBDW-3B	۷۲
شکل ۳-۳: مقایسه DCS محاسبه شده با دو تقریب CB1-3B و CBDW-3B برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم‌های هلیوم در انرژی $100 \text{ eV}$ و $200 \text{ eV}$	۷۳
شکل ۳-۴: مقایسه DCS محاسبه شده با $T^+$ و $T^-$ برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم‌های هلیوم با استفاده از تقریب CB1-3B و CBDW-3B در انرژی $70 \text{ eV}$ و $200 \text{ eV}$	۷۵
شکل ۴-۱: مقایسه TCS محاسبه شده برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم‌های هلیوم با استفاده از دو تقریب CB1-3B و CBDW-3B با داده‌های تجربی	۷۶
شکل ۴-۲: مقایسه DCS محاسبه شده برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم‌های هلیوم با استفاده از تقریب‌های CBDW-3B, CB1-3B, CBW-4B, CB1-4B در انرژی $100 \text{ eV}$ و $200 \text{ eV}$	۷۸
شکل ۴-۳: مقایسه DCS محاسبه شده برای تشکیل پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم‌های هلیوم با استفاده از تقریب‌های CB1-4B و CBDW-4B در انرژی $70 \text{ eV}$ و $200 \text{ eV}$	۷۹

عنوان	
صفحه	
.....CB1-4B و CBDW-4B به دست آمده از تقریب‌های DCS بر تأثیر افزایش انرژی	۷-۴ : شکل
.....۸۰ .....	
.....CB1-4B و CBDW-4B در تقریب‌های TCS محاسبه شده و $T^+$ با تأثیر انتخاب تابع موج $\varphi_i(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ بر	۸-۴ : شکل
.....۸۱ .....	
.....CB1-4B و CBDW-4B با نتایج سه‌ذره‌ای و	۹-۴ : شکل
.....۸۲ .....	داده‌های تجربی
.....CB1-4B و CBDW-4B با نتایج میانگین از تقریب‌های TCS محاسبه شده با $T$	۱۰-۴ : شکل
.....۸۳ .....	سه‌ذره‌ای و داده‌های تجربی
.....CB1-4B.CBDW-4B.CB1-3B.CBDW-3B در انرژی ۶۰۰ eV و ۱۲۰۰ eV با تشكيل پوزيترونیوم در برخورد پوزیترون با اتم‌های کربن با	۱۱-۴ : شکل
.....۸۴ .....	استفاده از تقریب‌های
.....CB1-4B و CBDW-4B با تشكيل پوزيترونیوم از اتم‌های کربن و نئون با	۱۲-۴ : شکل
.....۸۵ .....	استفاده از روش‌های سه‌ذره‌ای و چهارذره‌ای

## پیشگفتار

پوزیترونیوم (Ps) سبک‌ترین اتم شناخته شده و متشکل از یک الکترون و پادزره‌ی آن (پوزیترون) است. در واقع پوزیترونیوم اتمی مشابه اتم هیدروژن است که در آن پوزیترون جایگزین پروتون شده است. انرژی حالت پایه‌ی پوزیترونیوم برابر با  $6/8 \text{ eV}$  یعنی معادل نصف انرژی حالت پایه‌ی اتم هیدروژن است. حالت پایه‌ی پوزیترونیوم مانند اتم هیدروژن بسته به جهت گیری نسبی اسپین الکترون و پوزیترون دارای دو پیکربندی متفاوت است:

حالت یکتاپی با اسپین‌های غیر موازی ( $S=0$ ) و حالت سه تایی با اسپین‌های موازی ( $S=1$ ). حالت یکتاپی به عنوان پاراپوزیترونیوم (P-Ps) شناخته شده و طول عمر متوسط آن  $125$  پیکوثانیه است [۱]. پاراپوزیترونیوم می‌تواند به هر تعداد زوج فوتون واپاشیده شود اما احتمال واپاشی با افزایش تعداد فوتون‌ها به سرعت کاهش می‌یابد. حالت سه تایی به عنوان اورتوبوزیترونیوم (O-Ps) شناخته می‌شود و طول عمر متوسط آن در  $\lambda = 0.05 \pm 0.02$  نانوثانیه است [۲].

مطالعه‌ی تشکیل پوزیترونیوم در بسیاری از شاخه‌های فیزیک اطلاعات مفیدی را فراهم می‌کند [۳-۶]. به عنوان مثال، مطالعه‌ی تشکیل اتم‌های پوزیترونیوم به فهم دینامیک واکنش‌های شیمیایی که در آن ذره‌ی مثبت فعال جرم ناچیزی دارد، کمک می‌نماید [۷، ۸]. همچنین با توجه به این‌که سطح مقطع تشکیل پادهیدروژن، در برخورد آنتی‌پروتون با اتم‌های پوزیترونیوم در انرژی‌های کم قابل توجه است، لذا پوزیترونیوم هدف مناسبی برای تولید اتم‌های پادهیدروژن که در بررسی اصول بنیادی فیزیک کاربرد دارد [۹-۱۴]، خواهد بود. با توجه به این‌که فرآیند تشکیل پوزیترونیوم در اثر ریاشه الکترون توسط پوزیترون، در برخوردهای پوزیترون با هدف‌های اتمی یا مولکولی یکی از مهم‌ترین فرآیندهای برخورد بازچینی به حساب می‌آید، تاکنون تحقیقات زیادی در این زمینه صورت گرفته است. نخستین مطالعه بر روی تشکیل پوزیترونیوم توسط ماسی<sup>۱</sup> و مور<sup>۲</sup> با استفاده از تقریب مرتبه‌ی اول بورن (FBA)، در برخوردهای پوزیترون-هیدروژن انجام شد [۱۵]. چشایر<sup>۳</sup> تشکیل پوزیترونیوم از حالت پایه‌ی اتم هیدروژن را با کمک تقریب ضربه‌ای مطالعه و سطح مقطع دیفرانسیلی و سطح مقطع کل را محاسبه نمود [۱۶]. در بررسی فرآیندهای برخورد پوزیترون-اتم، اتم هلیوم بیشترین توجه گروه‌های آزمایشی را به عنوان هدف به خود معطوف داشته و مطالعات متعددی بر روی فرآیندهای برانگیختگی و بازچینی که در برخوردهای پوزیترون-هلیوم رخ می‌دهد، انجام شده است [۱۷-۱۹]. اولین محاسبه برای سیستم پوزیترون-هلیوم توسط ماسی و موسا<sup>۴</sup> با استفاده از FBA انجام شد [۲۰]. منdal<sup>۵</sup> تشکیل پوزیترونیوم از حالت پایه‌ی اتم‌های هیدروژن و هلیوم را با روش تقریب موج واپیچیده (DWA) بررسی نمود [۱۹]. به طور مشابه تقریب مرتبه‌ی دوم موج واپیچیده‌ی بورن توسط دوانگان<sup>۶</sup> و والرز<sup>۷</sup> در بررسی پراکندگی الکترون و پوزیترون از اتم‌های هلیوم و نئون مورد استفاده قرار گرفت [۲۱]. همچنین سطح مقطع کل تشکیل پوزیترونیوم توسط گروه‌هایی به صورت تجربی مورد بررسی قرار گرفته است [۲۲، ۲۳].

<sup>1</sup> Massey

<sup>2</sup> Mohr

<sup>3</sup> Cheshire

<sup>4</sup> Moussa

<sup>5</sup> Mandal

<sup>6</sup> Dewangan

<sup>7</sup> Walters

با توجه به این که مطالعه‌ی فرآیند رایش تک الکترون از هدف‌های اتمی دو یا چند الکترونی، نیازمند محاسبات پیچیده و دشواری است، اغلب مطالعات نظری که برخوردهای پوزیترون-هليوم و یا به طور کلی برخوردهای از نوع  $-Z_P$  ( $Z_T; e_1, e_2$ ) را مورد بررسی قرار داده‌اند، از مدل ذرهی مستقل<sup>۱</sup> (IPM) استفاده نموده‌اند [۲۴-۳۱]. بر طبق این مدل فرض می‌شود که اتم هدف، تنها شامل یک الکترون فعال<sup>۲</sup> بوده و سایر الکترون‌ها غیر فعال<sup>۳</sup> تلقی می‌شوند. غیر فعال بودن این الکترون‌ها به این معنی است که برهمکنش آن‌ها با الکترون فعال سهمی در فرآیند برخورد ندارد. این الکترون‌ها به همراه هسته‌ی اتم هدف، به صورت یک هسته‌ی مرکزی در نظر گرفته شده و پتانسیل مؤثری را در محل الکترون فعال و پرتابه ایجاد می‌کنند. خصوصیت اصلی همه‌ی این روش‌ها حفظ یک فرمول‌بندی خالص سه ذرهای است، علیرغم این حقیقت که مسئله مورد نظر شامل دو الکترون فعال و در واقع یک مسئله چهار ذرهای است.

اشکال اساسی IPM این است که در آن، از ابتدا تأثیر برهمکنش الکترون-الکترون در فرآیند مورد بررسی نادیده گرفته می‌شود. اگر بخواهیم به طور کامل نقش همبستگی الکترون-الکترون را تعیین نماییم باید از ابتدا با یک مسئله چهار-ذرهای کار کنیم. در واقع می‌توان گفت یکی از دلایل اصلی توسعه‌ی نظریه‌های چهار ذرهای برای بررسی برخوردهای اتم(یون)-اتم، مطالعه‌ی کامل‌تر پیرامون نقش همبستگی الکترون-الکترون در چنین فرآیندهایی است. در برخوردهای یون-اتم دو نوع همبستگی بین الکترونی وجود دارد: همبستگی استاتیکی که از برهمکنش کولنی بین دو الکترون در سامانه‌های اتمی شبه هلیومی پیش از به وقوع پیوستن برخورد به وجود می‌آید و در حقیقت درتابع موج‌های حالت مقید الکترون‌ها ایجاد می‌شود و همبستگی دینامیکی که برهمکنش دو الکترون در کانال خروجی را توصیف کرده و از طریق حضور جمله‌ی مربوط به پتانسیل کولنی بین الکترونی، در پتانسیل نهایی  $V_f$ ، در محاسبه‌ی شکل پسین دامنه‌ی گذار ظاهر می‌شود.

به عنوان مثال‌هایی از روش‌های چهار ذرهای می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

#### ۱- تقریب موج واپیچیده‌ی بیوسته<sup>۴</sup> (CDW-4B) :

این تقریب نخستین بار توسط بلکیک<sup>۵</sup> و منشف<sup>۶</sup> برای بررسی فرآیند رایش دو الکترون استفاده شد [۳۳]. سطح مقطع کل به دست آمده از این روش، برای تشکیل  $H^-$  در برخوردهای  $H^+ + He$ <sup>+</sup> توافق فوق العاده‌ای با نتایج تجربی داشت. در این روش حالت‌های میانی پیوسته‌ی الکترونی در هر دو کانال ورودی و خروجی به وسیله‌ی شکل کامل امواج کولنی توصیف می‌شود. تقریب فوق علاوه بر گذارهای دو الکترونی بر روی فرآیند رایش تک الکترون در برخوردهایی مانند:  $H^+ + He^{2+}$  و  $H^+ + Li^+$  نیز به کار گرفته شد [۳۳-۳۵].

#### ۲- تقریب چهار ذرهای مرتبه‌ی اول بورن با شرایط مرزی صحیح (CB1-4B) :

این روش اولین بار توسط بلکیک برای بررسی فرآیند رایش دو الکترون فرمول‌بندی شد [۳۶] و سپس برای توصیف مبادله‌ی تک الکترون در برخوردهای پر انرژی بین دو اتم یا یون شبه هیدروژنی مورد استفاده قرار

<sup>1</sup> Independent-Particle Model

<sup>2</sup> active electron

<sup>3</sup> passive electrons

<sup>4</sup> Four-body Continuum Distorted Wave approximation

<sup>5</sup> Belkic

<sup>6</sup> Mancev

گرفت [۳۷]. در این روش بردارهای حالت پراکندگی به صورت ضرب حالت‌های کanal مختل نشده در ضرب فاز لگاریتمی واپیچش که ناشی از حضور پتانسیل کولنی بلندبرد در پتانسیل اختلال است، داده می‌شود. به عبارت دیگر در این روش حالت‌های دقیق اولیه و نهایی در کل فضا با شکل مجانبی آن‌ها تقریب زده می‌شود.

- روش چهار ذره‌ای حالت میانی پیوسته با شرایط مرزی صحیح<sup>۱</sup> (BCIS-4B) [۳۸] و روش چهار ذره‌ای موج واپیچیده‌ی بورن<sup>۲</sup> (BDW-4B) [۳۹]:

این دو روش ابتدا برای بررسی فرآیند رباش دو الکترون و سپس رباش تک الکترون ایجاد و استفاده شدند. در هر دو روش تابع موج‌های پراکندگی روش CDW برای توصیف حالت اولیه یا نهایی، بسته به این که شکل پسین یا پیشین دامنه‌ی گذار مورد توجه باشد در یکی از کanal‌های ورودی یا خروجی به کار می‌رود. در کanal دیگر تابع موج متناظر از روش CB1 استفاده می‌شود.

- روش چهار ذره‌ای حالت اولیه‌ی ایکونال موج واپیچیده‌ی پیوسته<sup>۳</sup> (CDW-EIS-4B):  
این روش برای بررسی رباش دو الکترون توسط ذرات آلفا از اتم هلیوم فرمول‌بندی شد اما موفقیت چندانی نداشت.

ویژگی برجسته بیشتر تقریب‌های کوانتم مکانیکی ذکر شده این است که این تقریب‌ها در انرژی‌های برخورد متوسط و بالا توافق بسیار خوبی را با داده‌های آزمایشگاهی متناظر نشان می‌دهند.

در این پژوهش، فرآیند تشکیل پوزیترونیوم در اثر رباش تک الکترون توسط پوزیترون، از اتم هلیوم و نیز لایه‌ی K اتم‌های کربن و نئون را با استفاده از تقریب‌های مرتبه‌ی اول بورن اصلاح مرز شده و موج واپیچیده‌ی بورن بررسی می‌کنیم. این بررسی در محدوده‌ی انرژی‌های برخورد متوسط و بالا که تقریب‌های مرتبه‌ی اول معتبر هستند، انجام خواهد شد. در فصل اول نظریه‌ی کوانتمی پراکندگی را به اختصار توضیح می‌دهیم. در ابتدا مفاهیم بنیادی فرآیندهای برخورد، نظیر: انواع برخوردها، مفهوم سطح مقطع و ... را بیان کرده و در ادامه توضیحاتی پیرامون ماتریس گذار، تقریب بورن، تقریب موج واپیچیده‌ی بورن و پراکندگی از پتانسیل کولنی ارائه می‌کنیم. در فصل‌های دوم و سوم فرآیند تشکیل پوزیترونیوم از هدفهای اتمی چندالکترونی را به ترتیب در قالب مدل‌های سه‌ذره‌ای و چهار‌ذره‌ای بورن بررسی می‌کنیم. در این دو فصل در ابتدا دو تقریب ذکر شده را فرمول‌بندی نموده و سپس محاسبات را به طور خاص برای اتم‌های معرفی شده ادامه می‌دهیم. در نهایت، در فصل چهارم نتایج بدست آمده از محاسبات را با یکدیگر و همچنین با نتایج آزمایشگاهی موجود مقایسه می‌نماییم. به طور خلاصه می‌توان اهداف دنبال شده در پژوهش حاضر را به صورت زیر عنوان کرد:

- ۱- محاسبه‌ی شکل پسین و پیشین دامنه‌ی گذار فرآیند تشکیل پوزیترونیوم از اتم‌های چند الکترونی با استفاده از تقریب‌های چهار ذره‌ای مرتبه‌ی اول بورن اصلاح مرز شده و موج واپیچیده‌ی بورن،
- ۲- محاسبه‌ی سطح مقطع جزئی و سطح مقطع کل فرآیند با استفاده از دامنه‌های گذار پسین و پیشین،
- ۳- مقایسه‌ی نتایج بدست آمده با نتایج حاصل از نظریه‌های سه‌ذره‌ای و داده‌های تجربی.

<sup>1</sup> Boundary-corrected Continuum Intermediate State method

<sup>2</sup> Born Distorted Wave method

<sup>3</sup> Four-body Continuum Distorted Wave Eikonal Initial State method

## فصل اول

### پراکندگی

مطالعه‌ی فرآیندهای برخورد بین ذرات، در تحقیق پیرامون ساختار ماده در مقیاس میکروسکوپی از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است. اطلاع از ویژگی‌های برخوردهای اتمی و مولکولی در بسیاری از زمینه‌ها نظری: بررسی خواص گازها، نظریه‌ی واکنش‌های شیمیایی و فیزیک نجوم نقشی اساسی ایفا می‌کند. اگر بخواهیم نیروهای هسته‌ای و قانون‌های حاکم بر برهم‌کنش‌های ذرات بنیادی را در ک کنیم، تنها روش موجود، استفاده از پراکندگی ذرات گوناگون از هدف‌های مختلف است. در این فصل مروری مختصر بر نظریه‌ی کوانتوسی پراکندگی خواهیم داشت. در ابتدا مفاهیم بنیادی نظریه‌ی پراکندگی را مطرح نموده و سپس به معرفی ماتریس گذار، بررسی پراکندگی در پتانسیل کولنی و معرفی تقریب بورن با شرایط مرزی صحیح و تقریب موج واپیچیده‌ی بورن که ابزار مورد نیاز دو فصل بعد هستند، می‌پردازیم.

#### ۱-۱ مفاهیم بنیادی

##### ۱-۱-۱ دسته‌بندی برخوردها

برخوردها را می‌توان بر اساس بزرگی سرعت تلاقی ( $v_i$ )، تقسیم‌بندی نمود [۴۰]. مثلاً در فیزیک اتمی، اگر  $v_i < v_0$  برخورد را کند و اگر  $v_i > v_0$  برخورد را سریع می‌نامند، که در اینجا  $v_0$  سرعت الکترون در حالت

پایه‌ی اتم هیدروژن است. در دسته‌بندی دیگر می‌توان برخوردها را به دو نوع کشسان و غیرکشسان تقسیم کرد. در برخورد کشسان حالت‌های داخلی ذرات برخوردهای (که ممکن است ذره‌ی مرکب یا بنیادی باشند) بدون تغییر باقی می‌ماند،



برچسب‌های  $i, i'$  معرف اعداد کوانتمی رایج برای توصیف حالت ذرات A و B هستند. در برخورد غیرکشسان حالت داخلی A یا B یا هر دو تغییر می‌کند،



در برخورد کشسان، انرژی جنبشی پرتابه بدون تغییر باقی می‌ماند، در حالی که در برخورد غیرکشسان انرژی جنبشی برخورد تغییر کرده و بخشی از آن صرف تغییر در ساختارهای داخلی A یا (و) B می‌شود. در چنین رویدادی ممکن است بخشی از انرژی جنبشی برخوردهای ذره‌ی A به پس‌زنی هدف B منجر شود. این پس‌زنی در مواردی که جرم‌های  $M_A$  و  $M_B$  تفاوت زیادی با یکدیگر داشته باشند ( $M_A \ll M_B$ )، قابل صرف‌نظر است.

در سومین دسته‌بندی، برخوردها بر اساس ذرات ایجاد شده در کanal خروجی به دو نوع برخورد مستقیم<sup>۱</sup> و برخورد بازچینی<sup>۲</sup> تقسیم می‌شوند. در برخورد مستقیم ممکن است ساختار داخلی پرتابه‌ی A و هدف B تغییر کند یا بدون تغییر باقی بماند، اما به هر حال در کanal خروجی ذره‌ی جدیدی تولید نمی‌شود و فقط ذرات A و B حضور دارند. در مقابل در برخورد بازچینی، A و (یا) B با ایجاد دو یا چند ذره‌ی جدید از بین می‌روند. به عنوان مثال:



ذرات جدید C و D می‌توانند مجموعه‌ای از دو یا چند ذره‌ی بنیادی یا مرکب باشند،  $C_n = C_1 + C_2 + \dots + C_n$  و (یا)  $D = D_1 + D_2 + \dots + D_n$ . واکنش‌های شیمیایی و نیز پراکندگی‌های هسته‌ای، اتمی و مولکولی که در آن A و B یک یا چند جزء از اجزای سازنده‌ی خود را مبادله می‌کنند، در گروه برخوردهای بازچینی قرار می‌گیرند. هم‌چنین ممکن است در کanal‌های ورودی و خروجی ذرات یکسانی داشته باشیم اما هنوز از برخورد بازچینی صحبت کنیم، مثلاً:



<sup>1</sup> direct collision

<sup>2</sup> rearrangement collision

چنین فرآیندی مبادله‌ی بار<sup>۱</sup> نام دارد که در آن یک الکترون از هدف، توسط پروتون فرودی ریوده شده و اتم هیدروژن (H(f)) که متفاوت با هیدروژن هدف، (H(i)) است تشکیل می‌شود. حتی در حالتی که  $i=f$  هنوز با یک برخورد بازچینی سروکار داریم که رباش الکترون تشدید شده<sup>۲</sup> نام دارد. با توجه به این که در این حالت تغییری در انرژی رخ نمی‌دهد، چنین فرآیندی را برخورد بازچینی کشسان می‌نامند.

وقتی در کانال خروجی دو یا سه ذره ظاهر شود، از برخوردهای دوتایی<sup>۳</sup> و سه‌تایی<sup>۴</sup> صحبت می‌کنیم. البته دقیق‌تر است که با در نظر گرفتن هر دو کانال ورودی و خروجی نام متقابنی به کار بریم، مثلاً: برخوردهای دوتایی-دوتایی، دوتایی-سه‌تایی و ... . در مواردی ممکن است در کانال ورودی نیز سه ذره یا بیشتر با یکدیگر برخورد کنند، در این حالت با برخوردهای سه‌تایی-دوتایی یا سه‌تایی-سه‌تایی روبرو هستیم [۴۱-۴۳].

پس از پراکندگی از هدف، پرتابه و سایر ذرات به وجود آمده می‌توانند در همه‌ی زوایای ممکن از  $0^\circ$  تا  $180^\circ$  پراکنده شوند. زاویه‌ی بین مسیر فرود پرتابه و مسیر پراکندگی آن، زاویه‌ی پراکندگی<sup>۵</sup> نام دارد و معمولاً با  $\theta$  نشان داده می‌شود. واضح است که در  $\theta=0^\circ$  پرتابه اصلاً پراکنده نمی‌شود در حالی که  $\theta=180^\circ$  متناظر با وضعیتی است که پرتابه پس از برخورد با هدف در همان مسیر فرودی، به عقب باز می‌گردد. این وضعیت در اصطلاح برخورد رو در رو<sup>۶</sup> (شاخ به شاخ) نامیده می‌شود که نخستین بار در آزمایش رادرفورد کشف شد. به منظور بررسی رویداد پراکندگی پس از ورود پرتو ذرات، یک آشکارساز<sup>۷</sup> در ناحیه مجانبی پشت هدف قرار داده می‌شود. آشکارساز می‌تواند در یک نقطه معین فضا و در زاویه‌ی خاص  $\theta$  ثابت شود و یا متحرک باشد. هم‌چنین برای اندازه‌گیری توزیع زاویه‌ای ذرات پراکنده، می‌توان چند آشکارساز را در زوایای مختلف قرار داد. با اصابت ذرات پراکنده شده‌ی پرتو فرودی به آشکارساز، تغییر ناگهانی در ولتاژ رخ می‌دهد و از این طریق پراکندگی ذرات ثبت می‌شود. واضح است که تضمینی برای وقوع حتمی این رویداد وجود ندارد، بلکه وقوع آن تنها یک پدیده‌ی احتمالی است. برای آمده‌سازی هدف و پرتابه، لازم است پیش از عمل اندازه‌گیری برخی شرایط آزمایشگاهی فراهم شود. در اغلب موارد هدف را در حال سکون فرض می‌کنند به‌طوری که سرعت نسبی ذرات برخورده برابر با سرعت پرتابه باشد. اما آزمایش‌هایی نیز وجود دارند که در آن‌ها پرتابه و هدف، به صورت دو پرتو متحرک هستند. در آزمایش‌های با هدف ساکن، فرض می‌شود که هدف در مبدأ دستگاه

<sup>1</sup> charge exchange

<sup>2</sup> resonant charge exchange

<sup>3</sup> binary

<sup>4</sup> tertiary

<sup>5</sup> scattering angle

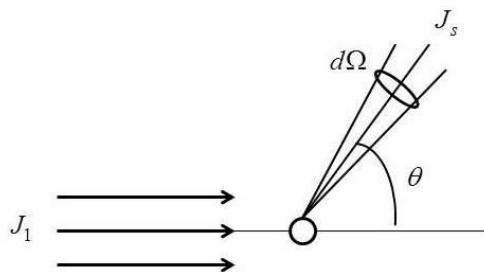
<sup>6</sup> head-on collision

<sup>7</sup> detector

مختصات آزمایشگاه متمرکز شده و محور  $Z$  منطبق بر پرتو فرودی انتخاب می‌شود. موقعیت فضایی ذرات پراکنده نیز با مختصات کروی  $(\theta, \varphi) = \Omega$  معین می‌شود. همچنین حالت کوانتومی هدف نیز باید مشخص باشد. در بیشتر موارد هدف در حالت پایه مهیا می‌شود اما حالت‌های ناپایدار نیز در برخی آزمایش‌ها استفاده می‌شود.

## ۱-۲ سطح مقطع<sup>۱</sup>

نتایج آزمایش‌های پراکنده‌گی معمولاً در قالب کمیتی به نام سطح مقطع بیان می‌شود. سطح مقطع یک رویداد خاص، در یک فرآیند برخورد عبارت است از: نسبت تعداد رویدادهایی از این نوع، در واحد زمان و واحد سطح هدف پراکنده‌ساز، به شار نسبی ذرات فرودی روی هدف [۴۴].



شکل ۱-۱: تعریف سطح مقطع جزئی

فرض کنید شار  $J_i$  از ذرات در واحد زمان بر واحد سطح هدف فرود می‌آید. تعداد ذراتی که در واحد زمان در زاویه فضایی  $d\Omega$  (که زوایای قطبی و سمتی آن نسبت به راستای فرود ذرات  $\theta$  و  $\varphi$  است) پراکنده می‌شود، با شار  $J_s$  و زاویه فضایی  $d\Omega$  متناسب، و برابر با  $J_s d\sigma(\theta, \varphi) d\Omega$  خواهد بود. ضریب تناسب  $d\sigma(\theta, \varphi)$  به عنوان سطح مقطع جزئی<sup>۲</sup> شناخته می‌شود. به عبارت دیگر اگر آشکارسازی در راستای  $(\theta, \varphi)$  و در فاصله  $R$  از هدف قرار گیرد، در واحد زمان تعداد  $J_s d\sigma(\theta, \varphi) d\Omega$  ذره پراکنده شده دریافت می‌کند. با تقسیم این تعداد به مساحت آشکارساز، شار ذرات پراکنده شده به دست می‌آید،

$$J_s = J_i d\sigma(\theta, \varphi) d\Omega / r^2 d\Omega. \quad (5-1)$$

بنابراین سطح مقطع جزئی برابر خواهد شد با

<sup>1</sup> cross section

<sup>2</sup> differential cross section