

تشکیل اتم پوزیترونیوم توسط روش جفت‌شدگی در انرژی‌های پایین در برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن

رضا باقری، فریده شجاعی*

دانشکده فیزیک دانشگاه شهید باهنر، کرمان، ایران

چکیده

در کار حاضر محاسبه سطح مقطع جزئی و کل برای تولید اتم پوزیترونیوم در برخورد پوزیترون کم انرژی با اتم هیدروژن در کانال انتقال بار توسط تقریب مرتبه اول روش جفت‌شدگی نزدیک انجام شده است. در این محاسبات اتم هیدروژن در حالت پایه در نظر گرفته شده و احتمال تشکیل اتم پوزیترونیوم در حالت پایه به صورت یک مسئله سه‌جسمی مورد بررسی قرار گرفته است. در کانال اولیه تابع موج توسط پایه‌های متعامد لگر بسط داده شده است. نتایج به دست آمده به صورت نمودارهای سطح مقطع جزئی و کل با داده‌های تجربی و تئوری‌های مختلف در دسترس مقایسه گردیده است. سطح مقطع اطراف انرژی 20eV بیشینه بوده و نشان می‌دهد که احتمال تشکیل پوزیترونیوم در این انرژی نسبت به سایر مقادیر انرژی بیشتر است.

کلیدواژگان: جفت‌شدگی نزدیک، ربایش الکترون، سطح مقطع پراکندگی، انرژی‌های پایین.

مقدمه

دوم پیچیدگی ناشی از تشکیل پوزیترونیوم وجود دارد. سیستم پراکندگی پوزیترون دارای ویژگی‌های خاصی است، اولاً دارای دو مرکز (اتم و پوزیترونیوم) می‌باشد، در حالی که سیستم پراکندگی الکترون تنها یک مرکز دارد. ثانیاً اصول اساسی برهم‌کنش ماده و ضدماده را در بر دارد، ثالثاً کانال‌های باز پراکندگی پوزیترون نسبت به پراکندگی الکترون بیشتر است.

کاربردهای مهمی در رابطه با فرآیند پراکندگی پوزیترون در فیزیک، شیمی، پزشکی، علم مواد، مهندسی مواد و دیگر شاخه‌های علوم و تکنولوژی وجود دارد [۲۰]. پراکندگی پوزیترون توسط اتم و تشکیل اتم پوزیترونیوم مثالی از فرآیند بازچینی می‌باشد. روش‌های مختلفی برای بررسی این فرآیند

پراکندگی یکی از متداول‌ترین راه‌ها برای شناخت و کسب آگاهی در مورد ساختارهای ریز از جمله ساختارهای اتمی می‌باشد. بنابراین انرژی پرتابه ممکن است یکی از حالات تهییج، انتقال بار و یونیزاسیون رخ دهد، در این مقاله به پدیده ربایش بار (انتقال بار) پرداخته می‌شود، انرژی مورد نیاز برای جداسازی الکترون از اتم هیدروژن باید از انرژی قیدی الکترون (13.6eV) بیشتر باشد تا جداسازی حاصل شود. انرژی آستانه برای تشکیل پوزیترونیوم برابر تفاضل انرژی قیدی الکترون در کانال اولیه و کانال نهایی است.

در زمینه ربایش الکترون و پوزیترون از اتم هیدروژن کارهای زیادی انجام شده است، در مسئله اول پیچیدگی ناشی از تمیز ناپذیری الکترون و در مسئله

*نویسنده مسئول: fshojaei@uk.ac.ir

جفت شدگی نزدیک همگرا [۵] که مربوط به پراکندگی پوزیترون از اتم هیدروژن بود بدون فرض تشکیل پوزیترونیم صورت گرفت [۶-۷]. تشکیل پوزیترونیم یکی از مهمترین برخوردهای دوباره بازچینی است که می‌تواند در طبیعت رخ دهد. این پدیده هم در مطالعات نظری و هم در زمینه تجربی در دهه گذشته مورد توجه محققین قرار گرفته است.

در روش جفت‌شدگی نزدیک همگرا و روش‌های مشتق‌شده از آن پراکندگی به‌صورت سه‌جسمی بررسی می‌شود، در این مدل هدف را به‌استثنا یک الکترون (که به‌نام الکترون فعال^۸ شناخته می‌شود) هسته یخ‌زده^۹ نام‌گذاری می‌کنند، بنابراین سه جسم تشکیل دهنده عبارتند از پرتابه P، یک الکترون فعال متعلق به هدف e و نهایتاً جسم سوم مابقی هدف T خواهد بود.

در این مقاله پراکندگی پوزیترون-هیدروژن در کانال ربایش بار مورد بررسی قرار گرفته و احتمال حصول پوزیترونیم در کانال نهایی برحسب زاویه پراکندگی محاسبه شده است. حالات اتم هیدروژن و پوزیترونیم با توجه به نظریه روش جفت‌شدگی نزدیک دو مرکزی^{۱۰}، برحسب توابع متعامد لگر بسط داده شده و حالت پرتابه به‌صورت موج تخت در نظر گرفته می‌شود. در محاسبات، برهم‌کنش‌های مربوط به حالات گذار بازچینی تا تقریب مرتبه اول لحاظ و مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نهایتاً سطح مقطع کل پراکندگی محاسبه و به‌صورت نمودار برحسب انرژی رسم و با سایر نظریه‌های در دسترس و داده‌های

ارائه شده است. روش جفت‌شدگی^۱ و یا به اختصار CC بر خلاف اکثر روش‌های مورد استفاده در پراکندگی به محاسبه تمامی عناصر ماتریس گذار ناشی از کلیه برهم‌کنش‌ها می‌پردازد و از این رو می‌توان از آن به نام روشی نسبتاً کامل یاد کرد، در این روش که مسئله به‌صورت سه جسمی^۲ بررسی می‌شود تابع کلی سیستم به‌دلیل متعامد نبودن توابع موج در کانال اولیه و نهایی، با بسطی از توابع متعامد لگر^۳ معرفی می‌گردد.

ایگور بری^۴ و استلبویکس^۵ [۳] از شمار اندک افرادی هستند که با روش جفت‌شدگی محاسبات مربوط به پراکندگی را انجام داده‌اند.

در روش جفت‌شدگی نزدیک همگرا^۶ که به اختصار CCC نامیده شده است مسئله به‌صورت سه‌جسمی بررسی و هامیلتونی هدف در پایه‌های لگر قطری می‌شود. در یک سری از مقاله‌های ارائه شده با این روش سطح مقطع جزئی و کل برای کانال‌های کشسان، ناکشسان و یونش در ناحیه وسیعی از انرژی محاسبه شده است. این روش به سیستم‌های زیادی بسط داده شده است از جمله سیستم پوزیترون-هیدروژن، اما از تشکیل پوزیترونیم صرف‌نظر شده است. روش شامل نمایش حالات هدف در پایه‌های توابع انتگرال‌پذیر مجذوری می‌باشد که حالات گسسته را به‌خوبی حالات پیوسته مد نظر قرار می‌دهد. اهمیت اصلی پایه‌های لگر متعامد بودن آنهاست [۴] و به‌همین دلیل برخلاف پایه‌های اسلاتیر^۷ بدون روبرو شدن با مشکلات وابستگی خطی با افزایش جملات بسط می‌توان هامیلتونی را قطری سازی کرد. در سال ۱۹۹۲ اولین بسط با روش

⁶ Convergent Close-Coupling

⁷ Slater

⁸ Active Electron

⁹ Frozen-Core

¹⁰ Two Center Convergent Close-Coupling

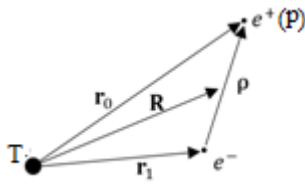
¹ Close-Coupling

² Three-Body

³ Laguerre

⁴ I. Bray

⁵ A. T. Stelbovics



شکل ۱. مختصات هندسی مکان پوزیترون و الکترون نسبت به پروتون هدف T.

که توابع $f_\alpha(\vec{r}_0)$ و $g_\beta(\vec{R})$ به ترتیب مربوط به موج‌های تخت در کانال‌های ابتدایی (پرتابه) و نهایی (T) و ضریب بسط در رابطه ۳ می‌باشند. قسمت شعاعی هر کدام از توابع $\psi_\alpha(r_1)$ و $\psi_\beta(\rho)$ با توجه به اینکه توابع موج کانال اولیه و نهایی فرآیند بازچینی تشکیل پوزیترونیوم، متعامد نمی‌باشند به صورت [۸]:

$$\xi_{n_i, \ell_i}(r) = \left(\frac{\lambda_{\ell_i} (n_i - 1)!}{(2\ell_i + 1 + n_i)!} \right)^{1/2} \times (\lambda_{\ell_i} r)^{\ell_i + 1} e^{(-\lambda_{\ell_i} r/2)} L_{n_i - 1}^{2\lambda_{\ell_i} + 2}(\lambda_{\ell_i} r) \quad \text{۴}$$

نوشته می‌شود که در آن $L_{n_i - 1}^{2\lambda_{\ell_i} + 2}(\lambda_{\ell_i} r)$ پایه‌های لگر بوده i معرف هریک از حالات α و β می‌باشد. برای هر مقدار تکانه زاویه‌ای مدارای خاص ℓ ، یک ضریب λ_{ℓ_i} در نظر گرفته می‌شود که برای اتم‌های هیدروژن و پوزیترونیوم مقداری متفاوت دارد. در نهایت توابع موج $\psi_\alpha(\vec{r}_1)$ و $\psi_\beta(\vec{\rho})$ توسط رابطه

$$\langle \mathbf{r} | \psi_i \rangle \equiv \langle \mathbf{r} | i_{n_i, \ell_i, m_i} \rangle = r^{-1} \xi_{n_i, \ell_i}(r) Y_{\ell_i, m_i}(\mathbf{r}) \quad \text{۵}$$

در فضای موقعیت قابل محاسبه خواهند بود.

با جانشینی رابطه ۳ در معادله شرودینگر ۲ مجموعه‌ای از معادلات جفت شده لیپمن شوینگر [۹]:

تجربی مقایسه شده است. در تمامی موارد از واحد اتمی استفاده شده است.

نظریه

سیستم پوزیترون-هیدروژن، همانند سیستم الکترون-هیدروژن یکی از اساسی‌ترین سیستم‌های سه جسمی در فیزیک اتمی می‌باشد. هامیلتونی کل شامل هامیلتونی پرتابه با جرم M_p (H_{e^+})، هامیلتونی هدف با جرم M_T (H_H) و جمله اختلالی ($V_{e^+, H}$) خواهد بود.

$$H = H_{e^+} + H_H + V_{e^+, H} \quad \text{۱}$$

در رابطه ۱ جمله اختلالی $V_{e^+, H}$ معرف برهم‌کنش میان پرتابه و هدف بوده، نمایی از هندسه برخورد در شکل ۱ نشان داده شده است. معادله ویژه مقداری به صورت:

$$(H - E^{(+)}) | \Psi_{i_0, k_0}^{S(+)} \rangle = 0 \quad \text{۲}$$

بوده که در اینجا $|\Psi_{i_0, k_0}^{S(+)}\rangle$ تابع حالت کلی سیستم است. علامت مثبت در رابطه ۲ نشانگر موج فرودی تخت یا کولنی و متعاقباً موج خروجی کروی بوده، S معرف اسپین کل است. همچنین i_0 و k_0 حکایت از این موضوع دارند که در ابتدای برخورد هدف در حالت i_0 و تکانه پرتابه مقدار k_0 بوده است.

تابع حالت کلی بدون در نظر گرفتن اسپین، از توابع حالت هیدروژن $\psi_\alpha(\vec{r}_1)$ و پوزیترونیوم $\psi_\beta(\vec{\rho})$ تشکیل شده است:

$$\Psi_{i_0, k_0}^{(+)} = \sum_{n, l, m} f_\alpha(\vec{r}_0) \psi_\alpha(\vec{r}_1) + \sum_{\beta} g_\beta(\vec{R}) \psi_\beta(\vec{\rho}) \quad \text{۳}$$

نوشته می‌شود. در رابطه ۷، $G_{\delta\delta}(q_{\delta}^2)$ تابع گرین مؤثر دو جسمی و k_{δ} اندازه حرکت ذره آزاد نسبت به مرکز جرم سیستم مقید در کانال δ می‌باشد. با نوشتن معادله ویژه مقدری ۲ برای مسئله توسط تابع موج معرفی شده در رابطه ۳ عناصر ماتریس گذار $V_{\delta\delta}(q_{\delta}, q_{\delta})$ به صورت:

$$V_{\alpha',\alpha}(k_{\alpha'}, k_{\alpha}) = \langle k_{\alpha'} | \langle \psi_{\alpha'} | U_{\alpha',\alpha} | \psi_{\alpha} \rangle | k_{\alpha} \rangle \quad 9$$

$$V_{\beta',\beta}(k_{\beta'}, k_{\beta}) = \langle k_{\beta'} | \langle \psi_{\beta'} | U_{\beta',\beta} | \psi_{\beta} \rangle | k_{\beta} \rangle \quad 10$$

$$V_{\beta,\alpha}(k_{\beta}, k_{\alpha}) = \langle k_{\beta} | \langle \psi_{\beta} | U_{\beta,\alpha} | \psi_{\alpha} \rangle | k_{\alpha} \rangle \quad 11$$

$$V_{\alpha,\beta}(k_{\alpha}, k_{\beta}) = \langle k_{\alpha} | \langle \psi_{\alpha} | U_{\alpha,\beta} | \psi_{\beta} \rangle | k_{\beta} \rangle \quad 12$$

تعریف می‌شوند. عملگرهای پتانسیل کانال متناظر به صورت:

$$U_{\alpha',\alpha} = \frac{Z}{r_0} - \frac{1}{\rho} \quad 13$$

$$U_{\beta',\beta} = \frac{Z}{|\mathbf{R} + \frac{\rho}{2}|} - \frac{Z}{|\mathbf{R} - \frac{\rho}{2}|} \quad 14$$

$$U_{\beta,\alpha} = U_{\alpha,\beta} = H - E \quad 15$$

بوده و منجر به عناصر ماتریس گذار می‌شوند. زیرنویس α و β نمایانگر کانال اولیه و نهایی می‌باشند. روابط ۱۳ و ۱۴ به ترتیب مربوط به برهم‌کنش‌های ممکن در لحظه قبل و بعد از برخورد بوده که از آنها به نام برهم‌کنش‌های ابتدایی-ابتدایی (یا نهایی-نهایی) و یا گذار اتم-اتم (پوزیترون-پوزیترون) نیز نامبرده می‌شود، جملات برهم‌کنشی در رابطه ۱۳ به ترتیب مربوط به پتانسیل میان پرتابه-پروتون و پرتابه-الکترون هستند همچنین در رابطه ۱۴ پتانسیل‌های برهم‌کنشی میان پروتون-پرتابه و پروتون-الکترون به چشم می‌خورد. در این مقاله درایه سوم ماتریس گذار $(V_{\beta,\alpha})$ مورد بررسی قرار گرفته است، این جمله تمامی برهم‌کنش‌های ممکن در حین

$$\begin{aligned} \langle k_f^{(-)} i_f^N | T^N | i_0 k_0^{(+)} \rangle &= \langle k_f^{(-)} i_f^N | V^N(\theta) | \psi_0^N \rangle \quad 6 \\ &= \langle k_f^{(-)} i_f^N | V^N(\theta) | i_0 k_0^{(+)} \rangle \\ &+ \sum_{n=1}^N \sum_k \int \frac{\langle k_f^{(-)} i_f^N | V^N(\theta) | i_n^N k^{(-)} \rangle \langle k^{(-)} i_n^N | T^N | i_0 k_0^{(+)} \rangle}{E^{(+)} - \epsilon_n^N - \epsilon_k} \end{aligned}$$

به دست می‌آید، که در آن ϵ_n^N ویژه مقدار انرژی اتم هیدروژن و ϵ_k برابر انرژی جنبشی پرتابه می‌باشد. برای ساده سازی، تابع موج به صورت $|i_0, k_0\rangle$ نمایش داده می‌شود. $E^{(+)}$ بیانگر ویژه مقدار انرژی سیستم در هر لحظه و $V^N(\theta)$ کلیه برهم‌کنش‌ها را شامل می‌شود. θ زاویه پراکندگی بوده و تأثیر $V^N(\theta)$ روی $|\psi_0^N\rangle$ همانند تأثیر ماتریس گذار T^N بر روی $|i_0 k_0^{(+)}\rangle$ می‌باشد. بالانویس N نشان‌دهنده تعداد حالات تابع موج می‌باشد. در رابطه ۶ حالات $|i_0 k_0^{(+)}\rangle$ و $|\psi_0^N\rangle$ به ترتیب مربوط به تابع حالت سیستم در قبل و در حین برخورد می‌باشند. اندیس‌های صفر در این توابع حالات متذکر این موضوع است که تابع اتمی و پرتابه در ابتدا به ترتیب در حالت پایه و دارای مقدار تکانه k_0 بوده‌اند. نماد جمع و به دنبال آن انتگرال در رابطه ۶ جمع بر روی تمامی مقادیر گسسته و پیوسته را یادآوری می‌کند. با کمی ساده سازی در طریقه نمایش، رابطه ۶ به صورت

$$\begin{aligned} T_{\delta\delta}(k_{\delta'}, k_{\delta}) &= V_{\delta\delta}(k_{\delta'}, k_{\delta}) + \sum_{\delta''} \int \frac{dk_{\delta''}}{(2\pi)^3} \quad 7 \\ &\times V_{\delta'\delta''}(k_{\delta'}, k_{\delta''}) G_{\delta''}(k_{\delta''}^2) T_{\delta''\delta}(k_{\delta''}, k_{\delta}) \end{aligned}$$

قابل بازنویسی است [۱۰]، در رابطه ۷ زیرنویس‌های δ و δ' برای خلاصه سازی حالات ابتدایی و انتهایی به کار برده شده‌اند که شامل اتم هیدروژن و پوزیترونیم بوده، به عبارتی تابع حالت کلی مطابق رابطه ۳ به صورت:

$$\Psi_{i_0, k_0}^{(+)} = \sum_{\delta} f_{\delta} \psi_{\delta}(r_{\delta}), \quad \delta = \alpha, \beta \quad 8$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{lab} = \frac{(1 + \tau^2 + 2\tau \cos \theta)^{\frac{3}{2}}}{(1 + \tau \cos \theta)} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{c.m.} \quad ۱۹$$

نتایج را به چارچوب آزمایشگاهی تبدیل نمود.

در رابطه ۱۹، τ برابر نسبت جرم پرتابه به هدف است

$$\left(\tau = \frac{M_p}{M_T}\right), \text{ در نهایت سطح مقطع کل با انتگرال}$$

گیری بر روی تمام فضا به صورت

$$\sigma_{total} = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{lab} d\Omega \quad ۲۰$$

قابل محاسبه خواهد بود.

انرژی آستانه تشکیل پوزیترونیم از رابطه

$$E_{th} = E_i - E_{ps} \quad ۲۱$$

قابل محاسبه است که E_i انرژی یونش هدف و E_{ps} انرژی قیدی حالت مقید اتم پوزیترونیم می‌باشد.

برهم‌کنش پوزیترون با اتم هیدروژن در انرژی کم موضوع ویژه‌ای می‌باشد، که با روش‌های متفاوت مورد بررسی قرار داده شده‌است. در روش‌هایی مانند: روش فادیف، روش موج واپیچیده برای تشکیل پوزیترونیم از اتم هیدروژن گستره انرژی از ۱۰۰ الکترون‌ولت به بالا بوده در صورتی که در روش جفت‌شدگی بحث انرژی‌های کمتر از ۱۰۰ الکترون‌ولت مطرح شده‌است. در کارهای انجام شده با روش بیان شده توسط ایگور بری و کادیرف [۱۱] محاسبه ماتریس گذار با استفاده از بسط امواج جزئی تابع موج ذرات ورودی و خروجی در فضای اندازه حرکت صورت گرفته‌است. اما در این مقاله عناصر ماتریس گذار در فضای موقعیت با تبدیل فوریه تابع موج حل شده‌اند.

برخورد، مابین دو کانال ابتدایی و نهایی را شامل می‌شود.

در رابطه ۱۱ ψ_α, k_α و ψ_β, k_β به ترتیب معرف موج تخت فرودی و تابع حالت هیدروژن پایه (موج تخت خارج شونده و تابع حالت پایه پوزیترونیم) می‌باشند. محاسبه عنصر ماتریسی رابطه ۱۱ مستلزم شناخت برهم‌کنش‌های حین برخورد است:

$$U_{\beta,\alpha} = \frac{-\nabla_0^2}{2} + \frac{Z}{r_0} - \frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{1}{\rho} - E \quad ۱۶$$

در رابطه ۱۶ جملات اول و سوم به ترتیب معرف انرژی جنبشی پرتابه و الکترون فعال هستند، همچنین جملات ۲ و ۴ مربوط به پتانسیل بین الکترون و پروتون هدف و پرتابه و الکترون هدف بوده و Z عدد اتمی هدف است. ویژه‌مقدار انرژی $E^{(+)}$ که در رابطه ۲ معرفی شد به علت قرار داشتن بر روی پوسته انرژی برابر $\epsilon_k^N + \epsilon_k$ در نظر گرفته شده‌است.

عنصر ماتریسی $T_{fi} = T_{\beta,\alpha}$ ، از رابطه ۷ با در نظر گرفتن تقریب مرتبه اول به صورت:

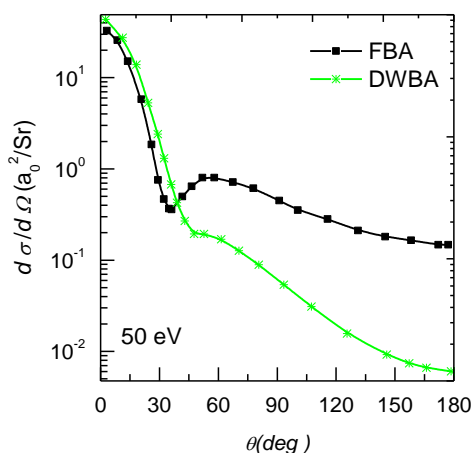
$$T_{fi} = V_{\beta,\alpha}(k_\beta, k_\alpha) \quad ۱۷$$

محاسبه و از رابطه:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{c.m.} = \pi^2 \frac{K_f}{K_i} |T_{fi}|^2 \quad ۱۸$$

برای محاسبه سطح مقطع جزئی پراکندگی (احتمال رخداد) استفاده می‌شود [۱۱]، $(K_f) K_i$ در رابطه ۱۸ به ترتیب حاصلضرب جرم کاهیده کانال ابتدایی (کانال نهایی) در سرعت اولیه (نهایی) هستند، لازم است این موضوع یادآوری شود که محاسبات تا به اینجا در چارچوب مرکز جرم صورت گرفته و نیاز است به کمک رابطه

نتایج



شکل ۲. نمودار تغییرات سطح مقطع جزئی پراکندگی نسبت به زاویه پراکندگی برای انرژی ۵۰ الکترون ولت از منبع [۱۲].

ماندال و همکارانش [۱۳] با استفاده از پراکندگی امواج جزئی و حل معادلات پراکندگی در تقریب امواج پیچیده^۴ دامنه پراکندگی و در نهایت سطح مقطع جزئی را محاسبه نموده‌اند، در همین مقاله [۱۳] ماندال با استفاده از تقریب موج واپیچیده به اضافه قطبش آدیاباتیک^۵ مجدداً سطح مقطع را محاسبه و دو قله کوچک در اطراف قله به وجود آمده دیده می‌شود که ماندال وجود آن را بر اساس در نظر گرفتن نیروی کوتاه برد قطبش بیان کرده که در این کار از این نیروها صرف‌نظر شده است. نتایج به دست آمده از مقاله حاضر به روش جفت شدگی نزدیک در تقریب اول به نتایج به دست آمده از روش تقریب موج واپیچیده به اضافه قطبش آدیاباتیک نزدیک است. شکل ۴ مشابه شکل ۳ اما برای انرژی ۵۰ الکترون ولت بوده که با نتایج منبع [۱۳] و [۱۴] مقایسه شده است. رفتار سطح مقطع جزئی به دست آمده از روش جفت شدگی نزدیک با وجود تقریب‌های به کار برده شده با مقایسه با دیگر روش‌های تئوری همخوانی دارد. لازم به ذکر است که محاسبات کار حاضر در تقریب مرتبه اول

در این کار محاسبات انجام شده برای ترازهای $H(1s)$ و $Ps(1s)$ می‌باشد که به صورت $CC(1,1)$ نمایش داده می‌شود، اغلب این مدل تقریب استاتیک جفت شده نامیده می‌شود. عنصر ماتریسی T_{fi} تا حد امکان به صورت تحلیلی محاسبه شده و محاسبات عددی به کمک نرم افزار ممتیکا^۱ انجام شده است.

برای سطح مقطع جزئی نهار [۱۲] تشکیل پوزیترونیم از اتم هیدروژن در گستره انرژی بیان شده را از دو روش تقریب مرتبه اول بورن^۲ و تقریب موج بورن واپیچیده^۳ محاسبه نموده است. وی سطح مقطع جزئی را جمع همه حالات مقید تشکیل پوزیترونیم به صورت:

$$H(1s) \rightarrow Ps(1s), Ps(2s), Ps(2p) \quad ۲۲$$

در نظر گرفته است، که نمودار آن در شکل ۲ نشان داده شده است.

در شکل ۳ نمودار سطح مقطع جزئی برحسب زوایای ۰ الی ۱۸۰ درجه برای انرژی ۲۰ الکترون ولت رسم شده و با دیگر نتایج مقایسه شده است. چنانچه از نمودار مشخص است رفتار سطح مقطع در همه انرژی‌ها یکسان می‌باشد تنها تفاوت جزئی که دیده می‌شود، می‌تواند بر اساس نوع روش به کار گرفته شده باشد.

^۴ Distorted Wave Approximation(DWA)

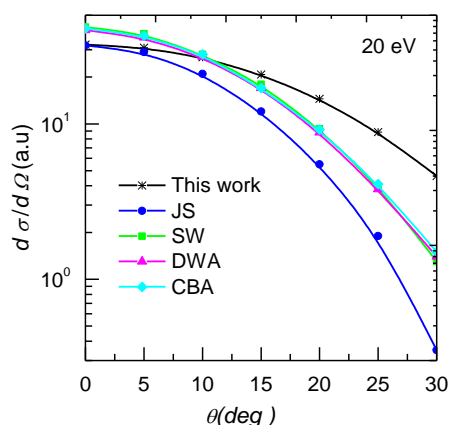
^۵ DWA plus adiabatic dipole polarization(DWPA)

^۱ Mathematica

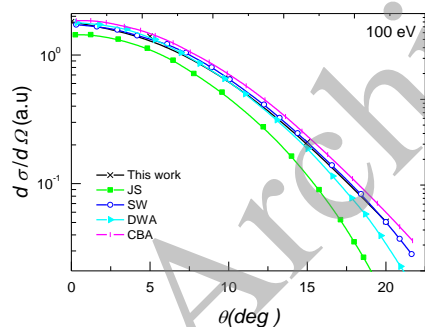
^۲ First Born Approximation(FBA)

^۳ Distorted Wave Born Approximation(DWBA)

۳۰ درجه رسم شده و با نتایج مختلف در دسترس مقایسه شده است.



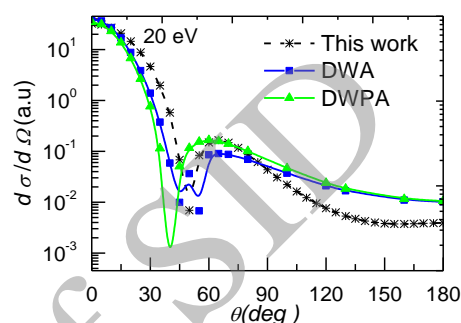
شکل ۵. نمودار تغییرات سطح مقطع جزئی پراکندگی نسبت به زاویه پراکندگی برای انرژی ۲۰ الکترون‌ولت. JS، SW تقریب موج واپیچیده مرتبه دوم، DWA به اضافه قطبش آدیاباتیکی CBA [۱۵].



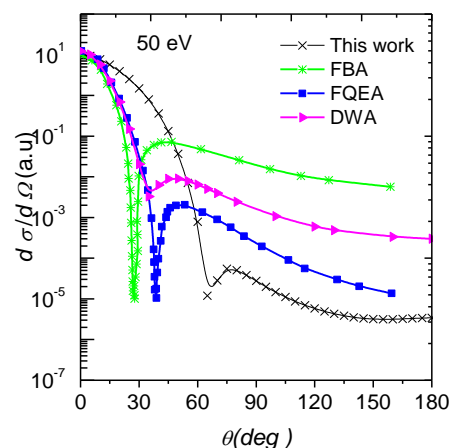
شکل ۶. مشابه شکل ۵ اما برای انرژی ۱۰۰ الکترون‌ولت.

با مقایسه دو شکل ۵ و ۶ می‌توان به این نتیجه رسید که چون انرژی ۲۰ الکترون‌ولت انرژی خاصی برای مسئله برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن (انرژی آستانه تشکیل پوزیترونیوم) می‌باشد لذا هر روش، با توجه به محاسبات مخصوص آن نظریه و در نظر گرفتن شرایط مسئله نتیجه متفاوتی داشته اما رفتار سطح مقطع جزئی برای انرژی ۱۰۰ الکترون‌ولت در زوایای کوچک پراکندگی برای همه روش‌ها در توافق خوبی می‌باشد،

برهم‌کنش و با اولین جمله بسط تابع موج انجام شده و سعی بر این است که در کارهای بعدی با افزودن جمله‌های مرتبه بالاتر و در نظر گرفتن جملات بیشتر در بسط تابع موج، برهم‌کنش‌های متفاوت را محاسبه نموده و تأثیر آنان بر دامنه پراکندگی بررسی شود.

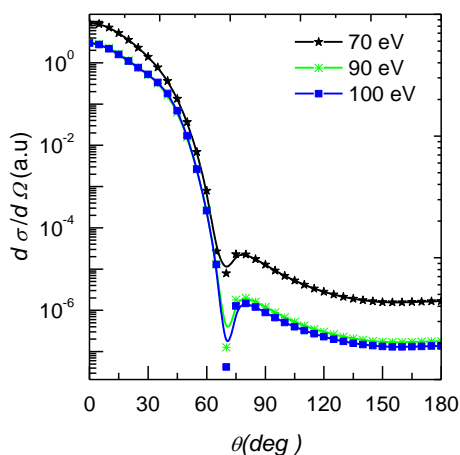


شکل ۳. نمودار تغییرات سطح مقطع جزئی پراکندگی نسبت به زاویه پراکندگی برای انرژی ۲۰ الکترون‌ولت. DWA (تقریب موج واپیچیده) و DWPA (تقریب موج واپیچیده با اضافه قطبش آدیاباتیکی) [۱۳].



شکل ۴. نمودار تغییرات سطح مقطع جزئی پراکندگی نسبت به زاویه پراکندگی برای انرژی ۵۰ الکترون‌ولت، FBA (تقریب مرتبه اول بورن) و FOEA (تقریب مرتبه اول تعویض) [۱۴]، DWA [۱۳].

برای مشاهده تأثیر زوایای پراکندگی نزدیک به صفر بر سطح مقطع جزئی دو شکل ۵ و ۶ برای انرژی ۲۰ و ۱۰۰ الکترون‌ولت در گستره زاویه پراکندگی صفر تا

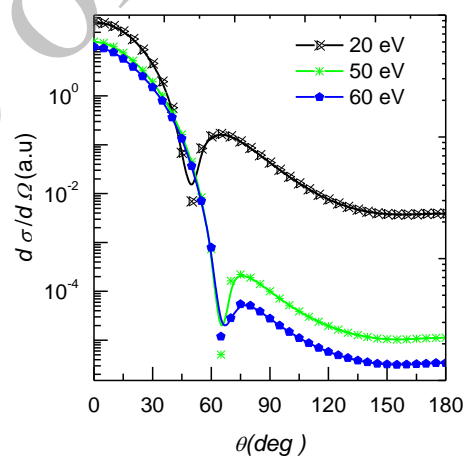


شکل ۸. نمودار تغییرات سطح مقطع جزئی پراکندگی در دستگاه آزمایشگاهی نسبت به زاویه پراکندگی (برای انرژی‌های ۹۰، ۷۰ و ۱۰۰ الکترون ولت).

با کمک رابطه ۲۰ سطح مقطع کل پراکندگی در چارچوب آزمایشگاهی محاسبه نموده و در شکل ۹ رسم شده است. نتایج سطح مقطع کل در دسترس برای نظریه‌های متفاوت دارای گستردگی زیادی بوده و سعی شده است که در ناحیه انرژی ۲۰ تا ۱۰۰ الکترون ولت نتایج چند نظریه متفاوت رسم و با تجربی مقایسه گردد. نتایج حول انرژی ۲۰ eV بیشینه بوده و نشان می‌دهند که احتمال تشکیل پوزیترونیم در این انرژی نسبت به سایر مقادیر انرژی بیشتر است. برای دقیق‌تر شدن در مقایسه، شکل ۱۰ رسم شده که تفاوت آن با شکل ۹ در محدوده انرژی و همچنین رسم سطح مقطع کل برحسب تغییرات لگاریتم انرژی است. در همه روش‌ها مشابه تجربی با افزایش انرژی سطح مقطع کل کاهش می‌یابد.

لذا انتظار می‌رود که اگر تقریب‌های بالاتر در مسئله جفت شدگی نزدیک لحاظ شود مسئله زوایای کوچک نیز برطرف خواهد شد.

برای بررسی تأثیر انرژی بر سطح مقطع جزئی شکل ۷ و ۸ رسم شده است همان‌گونه که مشاهده می‌شود به‌ازای تمام انرژی‌ها یک قله در نمودار دیده می‌شود که در انرژی ۲۰ الکترون ولت در حدود ۴۵ درجه و با بالا رفتن انرژی محل این قله تغییر کرده از یک انرژی به بعد محل این قله ثابت می‌شود. با افزایش انرژی سطح مقطع جزئی کاهش یافته و ارتفاع قله نیز تغییر می‌یابد. شکل ۷ تغییر مکان قله را به‌طور مشخص نشان می‌دهد.



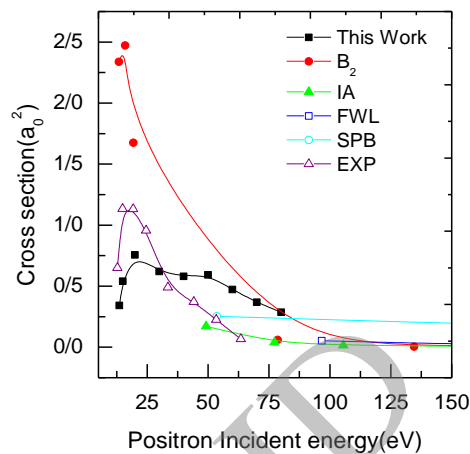
شکل ۷. نمودار تغییرات سطح مقطع جزئی پراکندگی در دستگاه آزمایشگاهی نسبت به زاویه پراکندگی (برای انرژی‌های ۲۰، ۵۰ و ۶۰ الکترون ولت).

است که در انرژی‌های پایین به علت امکان حرکت الکترون در طی زمان برخورد ظاهر می‌شود. از نکات مهمی که از این بحث‌ها نتیجه می‌شود می‌توان به مواردی نظیر قفل شدن قله مورد نظر، حرکت قله به سمت جلو با افزایش انرژی، کاهش احتمال و کاهش ارتفاع قله با افزایش انرژی ورودی پرتابه اشاره نمود که ماندال نیز به این موارد اشاره نموده است. به‌طور کلی ساختار سطح مقطع جزئی با دیگر تئوری‌ها تطابق دارد.

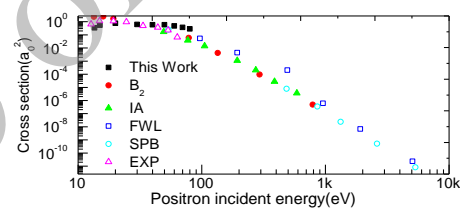
لازم به ذکر است که در محاسبه برهم‌کنش‌ها فقط جملات مربوط به $U_{\beta,\alpha}$ در نظر گرفته شده است و از اثر سایر جملات به‌خصوص جمله برهم‌کنشی $U_{\alpha,\alpha}$ که مربوط به برخورد کشسان است و وجود آن در برخوردهایی با انرژی‌هایی در محدوده $20-30\text{ eV}$ لازم به نظر می‌رسد صرف نظر شده است، بنابراین تغییر نتایج در گستره انرژی $20-30\text{ eV}$ با احتساب $U_{\alpha,\alpha}$ دور از انتظار نخواهد بود.

در نمودارهای ۹ و ۱۰ سطح مقطع کل پراکندگی پوزیترون توسط اتم هیدروژن و تشکیل اتم پوزیترونیوم در حالت پایه رسم شده است.

نهایتاً می‌توان نتیجه گرفت که روش محاسبه جفت شدگی نزدیک از میان گستره انرژی مذکور، با وجود تقریب‌های لحاظ شده‌ای همچون در نظر گرفتن پرتابه به صورت موج تخت در مقابل موج واپیچده در روش استاندارد و همچنین در نظر گرفتن تنها تقریب مرتبه اول در حالی که در حالت متعارف به حل معادله لیپمن شوینگر پرداخته می‌شود، نسبت به روش‌های دیگر که اکثراً در محدوده انرژی بالا مورد استفاده قرار می‌گیرند کارایی خوبی دارد. همچنین انتظار می‌رود که با در نظر گرفتن سایر جملات معادله انتگرالی لیپمن شوینگر در تقریب‌های مراتب بالاتر و نیز دیگر گذارها بر دقت روش افزوده شود.



شکل ۹. نمودار تغییرات سطح مقطع کل پراکندگی در دستگاه آزمایشگاهی نسبت به انرژی فرودی (B2) نتایج حاصل [۱۶]، (IA) نتایج حاصل [۱۷]، (FWL) نتایج حاصل [۱۸]، (SPB) نتایج [۱۹]، (EXP) نتایج [۲۰ و ۲۱].



شکل ۱۰. مشابه شکل ۹ با تفاوت در محدوده انرژی.

بحث و نتیجه‌گیری

همان‌طور که از شکل‌ها مشخص است احتمال رخداد مطلوب (برخورد پوزیترون با اتم هیدروژن و تشکیل پوزیترونیوم) در یک زاویه خاص همانند صفر درجه وابسته به انرژی بوده و با بالا رفتن انرژی کاهش می‌یابد، چنانچه نمودارهای مربوط به سطح مقطع جزئی نشان می‌دهند قله‌ای در نمودارها در زاویه مشخصی ایجاد شده است که با بالا رفتن انرژی، سطح مقطع جزئی کاهش یافته و از ارتفاع قله نیز کاسته می‌شود علاوه بر این مکان این قله از انرژی 40 eV به بعد ثابت می‌شود این قله در نمودارهای نهار [۱۲] نیز دیده می‌شود، این بیشینه در نتایج مربوط به جمله برهم‌کنشی $-\frac{\nabla^2}{2}$ ، معرف انرژی جنبشی الکترون فعال

مرجع‌ها

- Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43 (2010) 125203.
- [11] A.S. Kadyrov, I. Bray, Two-center convergent close-coupling approach to positron-hydrogen collisions, *Physical Review A* 66 (2002) 012710.
- [12] S.A. Nahar, Positronium formation during scattering of positrons by hydrogen atoms, *Physical Review A* 40 (1989) 6231.
- [13] P. Mandal, S. Guha, N.C. Sil, Positronium formation in positron scattering from hydrogen and helium atoms: the distorted-wave approximation, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 12 (1979) 2913.
- [14] P. Mandal, S. Guha, N.C. Sil, On the first-order approximations for positronium formation in atomic hydrogen, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 12 (1979) 1603.
- [15] R. Shakeshaft, J.M. Wadehra, Distorted-wave Born approximation for inelastic collisions: Application to electron capture by positrons from hydrogen atoms, *Physical Review A* 22 (1980) 968.
- [16] A. Igarashi, N. Toshima, Second-order Born cross sections for positronium formation in positron-hydrogen collisions, *Physical Review A* 47 (1993) 2386.
- [17] S.J. Ward, J.H. Macek, Positronium formation by electronic capture from hydrogenic ions, *Hyperfine Interactions*. 89 (1994) 477.
- [18] F. Shojaei, PhD Thesis, Shahid Bahonar University, Kerman (2008).
- [19] J.H. McGuier, N.C. Sil, N.C. Deb, Capture of atomic electrons by high-
- [1] M. Charlton, J.W. Humberston, *Positron Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2001).
- [2] Y.C. Jean, P.E. Mellon, D.M. Schrader, *Principles and Applications of Positron and Positronium Chemistry*. World Scientific Publishing Company, Singapore (2003).
- [3] I. Bray, A.T. Stelbovics, Calculation of electron scattering on Hydrogenic targets, *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics* VOL 35(1995) 209.
- [4] A.T. Stelbovics, L2 discretisation of the Coulomb problem in an Orthonormal Laguerre function basis, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 22 (1989) L159.
- [5] I. Bray, A.T. Stelbovics, Convergent close-coupling calculations of electron-hydrogen scattering, *Physical Review A* 46 (1992) 6995.
- [6] I. Bray, A.T. Selbovics, Convergent close-coupling calculations of low-energy positron-atomic-hydrogen scattering. *Physical Review A* 48 (1993) 4787.
- [7] I. Bray, A.T. Stelbovics, *Physical Review A* 49 (1994) R2224.
- [8] I. Bray, Convergent close-coupling method for the calculation of electron scattering on hydrogenlike targets, *Physical Review A* 49 (1993)1066.
- [9] I. Bray, A.T. Stelbovics, The convergent close-coupling method for a Coulomb three-body problem, *Computer Physics Communications* 85 (1995) 1-17.
- [10] R. Utamuratov, A.S. Kadyrov, D.V. Fursa, I. Bray, A.T. Stelbovics, Multiconfigurational two-centre convergent close coupling approach to positron scattering on helium, *Journal of*

velocity positrons, *Physical Review A* 34 685 (1986).

[20] W. Sperber, PhD Thesis, University Bielefeld, Germany (1993).

[21] W. Sperber, D. Becke, K.G. Lynn, W. Raith, A. Schweb, A. Sinapius, G. Spicher, M. Weber, Measurement of positronium formation in positron collisions with hydrogen atoms, *Physical Review Letters*. 68 (1992) 3690.

Archive of SID

Positronium formation in positron–atomic hydrogen collisions by close-coupling approach at low energies

Reza Bagheri, Farideh Shojaei*

Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

Abstract

In the present work, the calculation of differential and total cross sections is done for the formation of the positronium atom in low-energy in the collision of positron with the hydrogen atom. In these calculations, the hydrogen atom was considered in the ground state and the probability of forming the positronium atom by three-body problems was examined by method close-Coupling. In the first channel, the wave function was extended by orthogonal basis Laguerre. The discussed region of energy is 10-100 eV and the scattering angles are selected to be from 0 to 180 degree. The obtained results and the total cross section results were compared with different available experimental and theories data. The cross section is the maximum around the energy 20eV and shows the possibility of positronium formation in this energy higher than the other.

Keywords: Close Coupling, Electron Capture, Scattering Cross Section, Low Energies

*Corresponding Author: fshojaei@uk.ac.ir