

یونش هدف‌های مولکولی با استفاده از باریکه‌های یونی همدوس و

ناهمدوس

ابراهیم قنبری عدیوی*

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه اصفهان

دریافت: ۱۳۹۵/۰۵/۲۳ ویرایش نهائی: ۱۳۹۵/۱۲/۱۴ پذیرش: ۱۳۹۶/۰۳/۰۸

چکیده

یکی از جنبه‌های مهم و جالب یونش هدف‌های مولکولی با استفاده از باریکه‌های یونی، تداخلی است که بین باریکه‌های پراکنده شده از مراکز پراکندگی به وجود می‌آید. تجربه نشان داده است که الگوهای تداخلی‌ای که با استفاده از باریکه‌های همدوس و ناهمدوس به وجود می‌آیند، تفاوت‌های کوچک ولی مهمی با یکدیگر دارند. لحاظ کردن منشاء این تفاوت‌ها در رهیافت‌های نظری معمولاً دشوار و حتی غیرممکن است. در این پژوهش، مدلی نظری برای مطالعه سطح مقطع جزئی سه گانه یونش مولکول هیدروژن با استفاده از باریکه‌ای از پروتون‌های پر انرژی پیشنهاد شده است. در این مدل، سطح مقطع یونش از برهم‌نهی سطح مقطع‌های تقریب "دو مرکز مؤثر" با یک و دو موج کولنی به دست می‌آید. نتایج حاصله برای برخورد پروتون با مولکول هیدروژن با داده‌های تجربی مقایسه شده‌اند. مقایسه نشان می‌دهد که آثار تداخلی ناشی از برهم‌نهی دو سطح مقطع جزئی با الگوی تداخلی مشاهده شده برای باریکه پروتونی همدوس توافق بسیار خوبی دارد.

کلیدواژگان: یونش، سطح مقطع جزئی سه گانه، تقریب "دو مرکز مؤثر"، تداخل، باریکه‌های همدوس و ناهمدوس

مقدمه

نیز چنین شرایطی قابل بررسی و مطالعه است. در این نوع آزمایش‌ها، باریکه‌هایی که از مراکز اتمی موجود در یک مولکول پراکنده می‌شوند پس از پراکندگی با هم تداخل می‌کنند. بسته به اینکه فاصله میان مراکز پراکندگی از طول همدوسی عرضی باریکه فرودی بزرگتر باشد یا نباشد الگوی تداخلی ایجاد شده متفاوت خواهد بود. تجربه نشان داده است که تفاوت‌هایی که در الگوهای تداخلی قابل مشاهده هستند بسیار کوچکند. با این وجود، با استفاده از روش‌های دقیق آزمایشگاهی نظیر کلتریمس^۱ [۱،۲] یا موتریمی^۲ [۳]

در نورشناسی کلاسیک، یکی از شرایط ضروری برای آن که الگوی تداخلی در آزمایش دو شکافی یانگ قابل مشاهده باشد آن است که فاصله میان دو شکاف از طول همدوسی عرضی باریکه نور فرودی کوچکتر باشد. واضح است که در چنین آزمایشی اگر شرط فوق برقرار باشد، آنچه که بر روی پرده قابل مشاهده است با وقتی که این شرط برقرار نیست کاملاً متفاوت است. اخیراً، به یمن پیشرفت‌هایی که در ابزارها و تکنیک‌های آزمایشگاهی به وجود آمده است، معلوم شده است که در برخورد الکترون‌ها و یون‌ها با هدف‌های مولکولی

* نویسنده مسئول: ghanbari@phys.ui.ac.ir

¹ Cold target recoil-ion momentum spectroscopy (COLTRIMS)

² Magneto-optical trap combined with a reaction microscope (MOTReMi)

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

میان اندازه‌گیری‌های انجام شده با باریکه‌های همدوس و ناهمدوس را استخراج کرد؟³. تقریب "دو مرکز مؤثر"³ یکی از رهیافت‌هایی است که در سال‌های اخیر برای بررسی فرآیندهای یونش و ربایش الکترون از هدف‌های مولکولی مورد استفاده قرار گرفته است. به‌عنوان مثال با استفاده از این مدل سطح مقطع جزئی ربایش الکترون در برخورد پروتون‌های پرانرژی با مولکول‌های هیدروژن محاسبه و مورد بررسی قرار گرفته است [۸-۱۱]. همچنین سطح مقطع سه‌گانه یونش چنین هدف‌هایی با استفاده از پرتابه‌های الکترونی و پروتونی در تقریب «دو مرکز مؤثر» مورد مطالعه نظری قرار گرفته است [۱۷-۱۲]. در چنین تقریبی معمولاً دامنه پراکندگی به‌صورت مجموع چهار دامنه جزئی نوشته می‌شود که به دو دامنه جزئی دامنه‌های مستقیم و به دو دامنه دیگر دامنه‌های غیرمستقیم می‌گویند. در بیشتر محاسباتی که تاکنون بر اساس چنین تقریبی انجام شده است، معمولاً از سهم دامنه‌های جزئی غیرمستقیم در سطح مقطع جزئی برای فرآیند مورد مطالعه صرف نظر و فقط سهم دامنه‌های جزئی مستقیم در آن منظور شده است [۸-۱۸]. در مطالعه‌ای که اخیراً بر روی یونش مولکول هیدروژن توسط پروتون‌هایی با انرژی 10 keV انجام شده، به‌صورت تحلیلی نشان داده شده است که نادیده انگاشتن سهم جملات نامستقیم در سطح مقطع باعث کاهش قابل ملاحظه دامنه پراکندگی می‌شود. ولی این موضوع تأثیر چندانی بر شکل توزیع زاویه‌ای سطح مقطع ندارد [۱۵]. بنابراین می‌توان سهم جملات غیرمستقیم را به‌صورت یک ضریب بهنجارش در سطح مقطع محاسبه شده، لحاظ کرد [۱۶].

چنین تفاوت‌های کوچکی قابل اندازه‌گیری و مشاهده‌اند. این روش‌ها هم برای ربایش [۴،۵] و هم برای یونش [۶،۷] الکترون قابل کاربردند. ولی فرآیند یونش حاوی اطلاعات بیشتری از ساختار هدف و دینامیک برخورد است. دلیل این امر آن است که پس از فرآیند یونش الکترون یونیده شده و پرتابه پراکنده شده ممکن است با هر انرژی و تکانه مجازی و در هر جهتی گسیل شوند. بنابراین، آزمایشگر می‌تواند با قرار دادن آشکارساز در تمام جهت‌های ممکن و اندازه‌گیری تکانه و انرژی ذرات پراکنده شده بیشترین اطلاعات ممکن را در مورد سامانه برخوردی به‌دست آورد. سطح مقطع جزئی سه‌گانه^۱ یا کامل^۲ یکی از کمیت‌هایی است که با این روش‌ها قابل اندازه‌گیری است و اطلاعات مورد اشاره را در بر دارد. اخیراً، سطح مقطع‌های جزئی ربایش و یونش الکترون در برخورد باریکه‌های همدوس و ناهمدوس پروتون با مولکول هیدروژن اندازه‌گیری شده است [۶،۷]. این اندازه‌گیری‌ها نشان می‌دهد که میان سطح مقطع‌ها با باریکه‌های همدوس و ناهمدوس تفاوت‌های کوچک ولی معناداری وجود دارد. گنجاندن خاصیت ناهمدوسی پرتابه‌های فرودی در مدل‌های نظری کار بسیار دشوار و حتی ناممکنی است. در کارهای نظری که تا کنون در مورد یونش یا ربایش الکترون انجام شده است، اساساً فرض بر آن بوده است که باریکه فرودی همدوس است. لذا انجام آزمایش با باریکه‌های ناهمدوس مسأله جدیدی را بر روی فیزیک‌دانان گشوده است که حل آن به چالشی برای آنان تبدیل شده است. آن مسأله این است که "چگونه می‌توان ناهمدوسی باریکه‌های فرودی را در مدل‌های نظری گنجانده به‌طوری که بتوان از این مدل‌ها تفاوت

³Two-effective-center (TEC) approximation

¹ Triple differential cross section (TDCS)

² Fully differential cross sections (FDCS)

کنیم: در بخش نتایج خواهیم دید که هیچکدام از مدل‌های ارائه شده در مقالات قبلی با داده‌های تجربی مورد بحث در مقاله حاضر توافقی و سازگاری مناسبی ندارند. در این مقاله به تفاوت میان سطح مقطع‌های به‌دست آمده از باریکه‌های همدوس و ناهمدوس پرداخته شده است در حالی که مطالعات قبلی فقط نتایج حاصل از باریکه‌های همدوس را مورد مطالعه قرار داده‌اند تا آنجایی که نویسنده اطلاع دارد، تا کنون هیچ‌گونه مطالعه نظری بر روی داده‌های تجربی مورد بحث در این پژوهش [۷] انجام نشده است و توضیح نظری تفاوت‌های کوچک ولی معنادار اندازه‌گیری‌ها بر روی باریکه‌های همدوس و ناهمدوس یکی از مسائل باز و چالش برانگیز در فیزیک اتمی و مولکولی است. طرح مقاله به‌صورت زیر است: در بخش بعد خلاصه‌ای از مدل نظری پیشنهاد شده را با تأکید بر فرآیند یونش الکترون آورده‌ایم. در بخش سوم نتایج نظری به‌دست آمده از مدل را با نتایج تجربی مقایسه کرده و مورد بحث و تحلیل قرار داده‌ایم. در آخر خلاصه پژوهش و نتایج حاصل از آن ذکر شده‌اند. در این مقاله از یکاهای اتمی استفاده شده است.

مدل نظری

فرض کنیم که پرتابه پراثری P (با بار واحد و جرم M_P) بر یک هدف مولکولی با هسته‌های همسان فرود آید. هسته‌ها را با A و B نام‌گذاری می‌کنیم و فرض می‌کنیم که بار مؤثر هر کدام از آنها برابر واحد است. مولکول دو الکترون فعال دارد که به ترتیب با e_1 و e_2 نام‌گذاری می‌شوند. بردار مکان پرتابه نسبت به مرکز مولکول را با \mathbf{r}_p و بردار مکان هر کدام از الکترون‌ها را نسبت به این نقطه با \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 نشان می‌دهیم.

در مطالعاتی که قبلاً انجام داده‌ایم، مدل «دو مرکز مؤثر» با یک موج کولنی (TEC-1CW) [۱۶] و با دو موج کولنی (TEC-2CW) [۱۵] را برای یونش مولکول هیدروژن با پروتون به‌کار بردیم. نشان دادیم که این دو مدل در صورتی که انرژی الکترون خروجی کوچک باشد، در توافق خوبی با نتایج آزمایشگاهی است. در این پژوهش قصد داریم نشان دهیم که در صورت افزایش انرژی الکترون گسیل شده، توافق این دو مدل با تجربه سریعاً کاهش می‌یابد. با این وجود، در صورتی که سطح مقطع را با برهم‌نهی نتایج دو مدل به‌دست آوریم، در توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی خواهد بود. نتایج به‌دست آمده را هم با اندازه‌گیری‌های انجام شده با باریکه همدوس و هم با باریکه ناهمدوس مقایسه کرده‌ایم. نتایج در توافق بسیار خوبی با اندازه‌گیری‌های تجربی با استفاده از باریکه‌های همدوس است. علت آنکه نتایج حاصل از مدل نظری ارائه شده با اندازه‌گیری‌های تجربی انجام شده با استفاده از باریکه‌های ناهمدوس سازگاری کمتری دارند آن است که منظور کردن طول همدوسی عرضی باریکه در مدل‌های نظری کار بسیار دشواری است. در واقع در همه مدل‌های نظری، پرتابه را به‌عنوان یک موج تخت یا موج کولنی پیوسته در نظر می‌گیرند، در حالی که برای در نظر گرفتن ناهمدوسی باریکه فرودی باید آن را یک بسته موج با پهنای مناسب و طول همدوسی عرضی متناسب با ویژگی‌های باریکه در نظر گرفت. در نظر گرفتن این عوامل باعث پیچیدگی بسیار زیاد محاسبات و حتی ناممکن شدن آنها می‌شود.

همان‌گونه که در بالا نیز ذکر شد، نویسنده در دو سال اخیر در پژوهش‌های دیگری به مطالعه یونش مولکول هیدروژن با استفاده از باریکه‌های پروتونی پرداخته است [۱۵، ۱۶، ۱۹]. لذا لازم است که بر تفاوت میان آن پژوهش‌ها و کار انجام شده در پژوهش حاضر تأکید

نشان می‌دهد. تداخل این امواج باعث ایجاد الگوی تداخلی در اندازه‌گیری سطح مقطع یونش الکترون می‌شود.

در بررسی نظری این پدیده، تابع موج حالت پایه این هدف مولکولی را می‌توان به صورت زیر نوشت [۱۱]:

$$\varphi_{\alpha} = N_{\alpha} [\chi_A + \chi_B] \quad ۱$$

که در آن

$$\begin{aligned} \chi_A &= \phi(\mathbf{r}_{1A}) [\phi(\mathbf{r}_{2B}) + \lambda \phi(\mathbf{r}_{2A})], \\ \chi_B &= \phi(\mathbf{r}_{1B}) [\phi(\mathbf{r}_{2A}) + \lambda \phi(\mathbf{r}_{2B})] \end{aligned} \quad ۲$$

است. $\lambda = 0.256$ مقدار ثابتی است و χ_A تابع موجی است که نشان می‌دهد احتمال یافتن الکترون e_1 در اطراف هسته A بیشینه است حال آن که χ_B نشانگر یافتن همان الکترون با بیشترین احتمال در اطراف هسته B است.

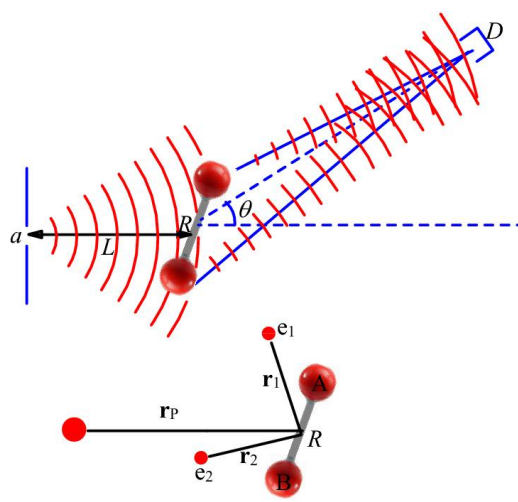
در معادله فوق، $\phi(\mathbf{r})$ تابع موج حالت پایه اتم هیدروژن ماندنی با بار مؤثر $\alpha = 1.193$ است. همچنین داریم:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{1A} &= \mathbf{r}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{R}, & \mathbf{r}_{2A} &= \mathbf{r}_2 + \frac{1}{2} \mathbf{R}, \\ \mathbf{r}_{1B} &= \mathbf{r}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{R}, & \mathbf{r}_{2B} &= \mathbf{r}_2 - \frac{1}{2} \mathbf{R} \end{aligned} \quad ۳$$

که در آن \mathbf{R} بردار مکان هسته B نسبت به هسته A است. ضریب بهنجارش N_{α} با عبارت زیر داده می‌شود:

$$N_{\alpha} = 1 / \sqrt{2[(1 + \lambda^2)(1 + D_{\alpha}^2) + 4\lambda D_{\alpha}]} \quad ۴$$

که در آن D_{α} انتگرال همپوشانی تابع موج دو اتم هیدروژن ماندنی است که در اطراف هسته‌های A و B جای‌گزیده شده‌اند و داریم:



شکل ۱. باریکه یونی موج مادی ای است که از شکافی به پهنا a و به فاصله L از مرکز هدف مولکولی بر آن فرود می‌آید. در اطراف هر هسته یک الکترون وجود دارد که قبل از انجام برهم‌کنش با تابع موج مقید مولکولی توصیف می‌شود. پس از برهم‌کنش هر کدام از الکترون‌ها با احتمالی که توسط یک موج مادی رونده توصیف می‌شود یونیده می‌شود. حاصل برهم‌نهی این دو موج در محل آشکارساز D ، باعث ایجاد الگوی تداخلی در اندازه‌گیری سطح مقطع می‌شود. با تنظیم پهنا a شکاف و فاصله L می‌توان طول همدوسی عرضی و در نتیجه میزان همدوسی باریکه را تنظیم کرد. R طول پیوند مولکول و θ راستای حرکت الکترون یونیده شده نسبت به راستای باریکه فرودی را نشان می‌دهد. همچنین بردارهای مختصات ژاکوبی استفاده شده در متن در شکل نشان داده شده‌اند.

شکل ۱، نموداری از مسأله و مدل طرح شده در این بخش را نشان می‌دهد. از دیدگاه مکانیک موجی، باریکه فرودی به صورت یک موج مادی بر هدف مولکولی که شامل دو مرکز پراکندگی است فرود می‌آید. حاصل این برهم‌کنش یونش یکی از الکترون‌های هدف است. همان‌گونه که در تداخل نور در آزمایش ینگ، نمی‌دانیم که فوتونی که به آشکارساز می‌رسد از کدام شکاف آمده است، و همین عدم قطعیت باعث ایجاد تداخل می‌شود، در این آزمایش هم نمی‌دانیم الکترونی که یونیده شده است از اطراف کدام مرکز پراکنده‌ساز به آشکارساز می‌رسد. در نتیجه دو موج از مراکز پراکنده‌ساز به آشکارساز می‌رسند. هر کدام از این موج‌ها نشانگر احتمال یونش الکترون از اطراف هر یک از هسته‌ها را

یکدیگر و در انرژی‌هایی بیشتر از انرژی تلاشی^۱ چنین سامانه‌ای ارائه دادند، نشان دادند که تابع موج کولنی برای توصیف رفتار الکترون در این سامانه تابع موج مناسبی است. این مدل به مدل BBK معروف است [۲۰]. دلیل واپیچش موج تخت به موج کولنی در فواصل دور، بلند برد بودن برهم‌کنش کولنی موجود بین الکترون و یون پرتابه و نیز برهم‌کنش کولنی میان الکترون و یون هدف باقیمانده است.

همچنین φ_β تابع موج حالت مقید یون باقی‌مانده در کانال نهایی است، که با عبارت زیر داده می‌شود:

$$\varphi_\beta = N_\beta \chi_\beta = N_\beta [\psi(\mathbf{r}_{2A}) + \psi(\mathbf{r}_{2B})] \quad ۹$$

که در آن $\psi(\mathbf{r})$ تابع موج حالت پایه اتم هیدروژن ماندی با بار مؤثر $\beta = 1.3918$ است. ثابت بهنجارش N_β نیز برابر است با $N_\beta = 1/\sqrt{2(1+D_\beta^2)}$ که در آن انتگرال همپوشانی D_β با عبارتی مشابه معادله ۵ داده می‌شود که در آن باید β را جایگزین α کرد.

به‌طور مشابه، تابع موج سامانه برخوردی در کانال نهایی در تقریب "دو مرکز مؤثر" با دو موج کولنی (TEC-2CW) را به صورت:

$$\Phi_f = \varphi_\beta \xi_{e-CW} \xi_{p-CW} \quad ۱۰$$

می‌نویسیم که در آن حرکت پرتابه پراکنده شده به جای آن که با موج تخت $(2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{r}_p}$ داده شود با تابع موج کولنی ξ_{p-CW} نسبت به هر یک از مراکز پراکندگی توصیف می‌شود.

در ادامه فرض می‌کنیم که در کانال اولیه، دو اتم هیدروژن مانند متشکل از $(A+e_1)$ و $(B+e_2)$

$$D_\alpha = \int \phi(\mathbf{r}_{1A}) \phi(\mathbf{r}_{1B}) d\mathbf{r}_1 \quad ۵$$

$$= (1 + \alpha R + \frac{1}{3} \alpha^2 R^2) e^{-\alpha R}$$

با توجه به آنکه دنباله کولنی در کانال اولیه وجود ندارد، می‌توان پرتابه را در این کانال با یک موج تخت نمایش داد. به این ترتیب تابع موج سامانه برخوردی در کانال اولیه با عبارت:

$$\Phi_i = (2\pi)^{-3/2} \varphi_\alpha e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_p} \quad ۶$$

داده می‌شود که در آن تکانه پرتابه در چارچوب مرکز جرم است.

بدون کاستن از کلیت مسأله، فرض می‌کنیم که در خلال برخورد، الکترون e_1 توسط پرتابه پراثری P یونیده می‌شود. بنابراین، تابع موج سامانه برخوردی در کانال نهایی در تقریب "دو مرکز مؤثر" با یک موج کولنی (TEC-1CW) را به صورت:

$$\Phi_f = (2\pi)^{-3/2} \varphi_\beta \xi_{e-CW} e^{i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{r}_p} \quad ۷$$

فرض می‌کنیم که در آن تکانه پرتابه در کانال خروجی و ξ_{e-CW} تابع موج کولنی برای توصیف حرکت الکترون یونیده شده است:

$$\xi_{e-CW} = (2\pi)^{-3/2} \Gamma(1-i\eta) e^{-\pi\eta/2} \times e^{i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{r}_p} {}_1F_1(i\eta; 1; -ik_e r_1 - i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}_1) \quad ۸$$

که در آن تکانه الکترون و $\eta = -1/k_e$ است. علت آنکه تابع موج الکترون یونیده شده را تابع موج کولنی در نظر می‌گیریم آن است که برنر (Brauner)، بریگز (Briggs) و کلار (Klar) در یکی از اولین کارهایی که برای به‌دست آوردن تابع موج توصیف کننده سه ذره با برهم‌کنش کولنی در فواصل دور از

¹Total break-up threshold energy

سطح مقطع جزئی سه‌گانه یا کامل به‌راحتی قابل محاسبه‌اند.

با مراجعه به دو مرجع فوق، دیده می‌شود که در صورتی که انرژی جنبشی الکترون یونیده شده کمتر از 20 eV باشد [۶]، هم سطح مقطع محاسبه شده با تقریب TEC-1CW یعنی $\sigma_{TEC-1CW}$ [۱۶] و هم سطح مقطع محاسبه شده با تقریب TEC-2CW یعنی $\sigma_{TEC-2CW}$ [۱۵] سازگاری بسیار خوبی با نتایج تجربی دارند. این سازگاری هم برای یونش الکترون در صفحه پراکندگی، هم برای یونش در صفحه عمود بر صفحه پراکندگی و هم برای یونش در صفحه سمتی کاملاً مشهود است [۱۵، ۱۶]. با انتشار نتایج آزمایشگاهی جدید که در آنها انرژی گسیل الکترون بیش از 20 eV است [۷] معلوم شد که نه $\sigma_{TEC-1CW}$ و نه $\sigma_{TEC-2CW}$ هیچکدام توافق خوبی با نتایج تجربی ندارند. به‌همین دلیل در اینجا مدلی پیشنهاد شده است که ترکیبی از دو مدل فوق است. در این مدل ابتدا $\sigma_{TEC-1CW}$ و $\sigma_{TEC-2CW}$ را محاسبه و به واحد بهنجار می‌کنیم و سپس میانگین آنها را به‌عنوان سطح مقطع یونش الکترون محاسبه می‌کنیم:

$$\sigma_{average} = \frac{\sigma_{TEC-1CW} + \sigma_{TEC-2CW}}{2} \quad ۱۳$$

به بیان دیگر، سطح مقطع یونش الکترون را معادل برهم‌نهی سطح مقطع‌های جزئی به‌دست آمده از مدل‌های $\sigma_{TEC-1CW}$ و $\sigma_{TEC-2CW}$ فرض می‌کنیم که بر ۲ تقسیم شده است.

بحث و نتیجه‌گیری

داده‌های آزمایشگاهی‌ای که اخیراً منتشر شده‌اند، سطح مقطع دیفرانسیلی کامل را برای پراکندگی الکترون یونیده شده در سطح مخروطی با زاویه نیم‌رأس 35° نشان می‌دهند [۷]. زاویه نیم‌رأس مخروط نسبت به

در کنار هم مولکول مورد نظر را تشکیل داده‌اند. با این فرض و در تقریب مرتبه اول، دامنه گذار برای چنین فرآیندی عبارت است از:

$$T = \langle \Phi_f | V_A + V_B | \Phi_i \rangle \quad ۱۱$$

که در آن V_B و V_A به ترتیب پتانسیل‌های برهم‌کنش میان پرتابه و اتم‌های A و B است. جانشانی توابع موج اولیه و نهایی در عبارت بالا، دامنه پراکندگی را به چهار دامنه جزئی تفکیک می‌کند:

$$T = T_{1d} + T_{1ind} + T_{2md} + T_{2d} \quad ۱۲$$

که در آن T_{1d} و T_{2d} را دامنه‌های جزئی مستقیم و T_{1ind} و T_{2md} را دامنه‌های جزئی غیرمستقیم برای یونش الکترون از هدف مولکولی می‌نامند. دامنه مستقیم T_{1d} احتمال یونش الکترون e_1 در اثر برهم‌کنش پرتابه با اتم A (در حالی که احتمال حضور الکترون e_1 در اطراف آن بیشینه است) را نشان می‌دهد. T_{1ind} احتمال یونش الکترون e_1 در اثر برهم‌کنش پرتابه با اتم A (در حالی که احتمال حضور الکترون e_1 در اطراف هسته B بیشینه است) را نشان می‌دهد. تعابیر مشابهی را می‌توان برای T_{2ind} و T_{2d} نیز به کار برد.

هر کدام از این دامنه‌های جزئی انتگرال‌های نه بعدی هستند که به‌روش‌های تحلیلی می‌توان یا شکل‌های بسته‌ای برای آنها به‌دست آورد و یا آنها را به انتگرال‌های یک بعدی کاهش داد که به‌روش عددی، به‌سرعت و سهولت قابل محاسبه‌اند. خواننده علاقمند را برای جزئیات محاسبه دامنه یونش در تقریب TEC-1CW به مرجع [۶] و در تقریب TEC-2CW به مرجع [۱۵] ارجاع می‌دهیم. با داشتن دامنه‌های یونش

تفاوت‌های جزئی در اطراف قله و در بازه زاویه‌ای ۱۸۰ تا ۳۶۰ درجه کاملاً مشهود است. در نتایج تجربی با باریکه‌های ناهمدوس، ساختارهای کوچکی در دو ناحیه مورد اشاره دیده می‌شود که در نتایج تجربی با باریکه‌های همدوس غایب هستند. با این وجود، همان گونه که از نمودارها دیده می‌شود نتایج محاسبات با مدل ارائه شده در توافق بهتری با نتایج تجربی برای باریکه‌های همدوس است. البته چنین نتیجه‌ای دور از انتظار نیست، زیرا گنجاندن ناهمدوسی باریکه فرودی در مدل نظری بسیار دشوار است و ما اساساً فرض کرده‌ایم که باریکه فرودی یک باریکه همدوس است، لذا آن را با یک موج تخت با یک تکانه محدود و معین که در تمام فضا گسترده شده‌است نمایش داده‌ایم.

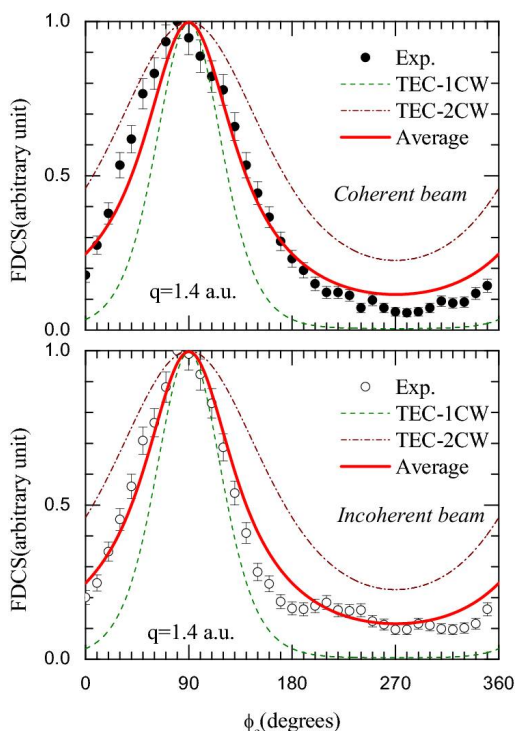
یکی از ایده‌هایی که برای در نظر گرفتن ناهمدوسی باریکه‌ها ممکن است مطرح شود آن است که باریکه فرودی را نه با یک موج تخت تک انرژی بلکه با یک بسته موج با پهنای محدود انرژی و تکانه در نظر بگیریم. علاوه بر این، برای بسته موج در نظر گرفته شده باید پهنای فضایی محدود و معینی در نظر بگیریم. به‌ویژه برای باریکه‌های ناهمدوس پهنای عرضی باریکه باید محدود و معین باشد، به‌طوری که فاصله میانگین دو اتم در مولکول هیدروژن بزرگتر از پهنای عرضی بسته موج توصیف کننده پرتابه باشد. در این صورت می‌توان گفت که اگر باریکه همدوس باشد، به‌طور هم‌زمان هر دو مرکز پراکندگی را خواهد دید، و الگوی تداخلی ایجاد شده ناشی از مشاهده هم‌زمان دو مرکز پراکندگی است.

راستای باریکه فرودی سنجیده می‌شود. این داده‌ها هم برای یونش با باریکه‌های همدوس و هم برای یونش با باریکه‌های ناهمدوس گزارش شده‌اند. در آزمایش‌های انجام شده، انرژی پروتون‌های فرودی برابر 75 keV و انرژی جنبشی الکترون یونیده شده برابر 41.4 eV و بزرگی تکانه منتقل شده از پرتابه به هدف برابر $(q = K_i - K_f)$: $q = 1.25, 1.4, 1.65 \text{ a.u.}$ است [۷].

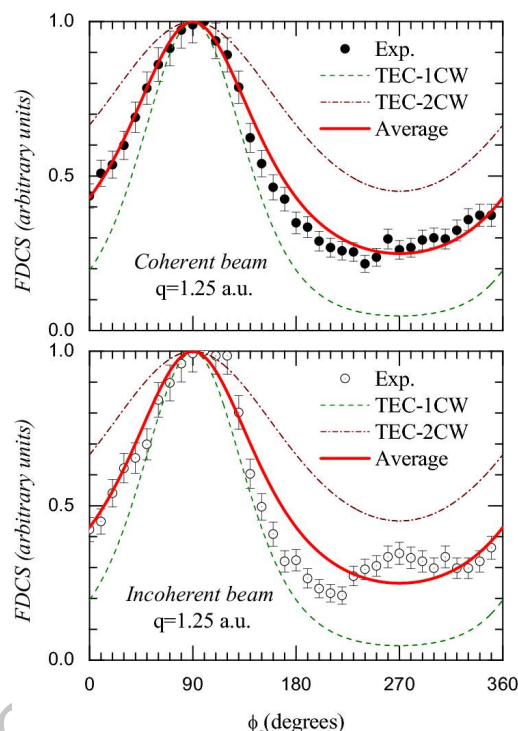
در این بخش $\sigma_{TEC-1CW}$ ، $\sigma_{TEC-1CW}$ و $\sigma_{TEC-1CW}$ را برای انرژی‌های فوق و سه مقدار تعیین شده تکانه انتقالی محاسبه کرده و با داده‌های تجربی همدوس و ناهمدوس مقایسه کرده‌ایم.

در شکل ۲ نتایج محاسبات را با داده‌های تجربی برای باریکه‌های همدوس و ناهمدوس با $q = 1.25 \text{ au}$ مقایسه کرده‌ایم [۷]. در این شکل سطح مقطع دیفرانسیلی (FDCS) یونش به‌صورت تابعی از زاویه سمتی گسیل الکترون (ϕ_e) نمایش داده شده است. نمودار بالائی برای باریکه همدوس و نمودار زیرین برای باریکه ناهمدوس رسم شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود، هر دو مدل TEC-1CW و TEC-2CW مکان قله مشاهده شده در نتایج تجربی را به‌خوبی پیش‌بینی می‌کنند. با این حال TEC-2CW پهنایی به مراتب بیشتر و TEC-1CW پهنایی به مراتب کمتر از نتایج تجربی برای این قله پیش‌گویی می‌کند. در سایر زوایا، TEC-2CW سطح مقطع‌ها را بزرگتر از تجربه و TEC-1CW سطح مقطع‌ها را کوچکتر از تجربه تخمین می‌زند. اما در مدل حاضر، هم مکان قله، هم پهنای آن و هم بزرگی سطح مقطع‌ها در سایر زوایای سمتی به‌خوبی با نتایج تجربی سازگارند.

نکته دیگری که باید به آن اشاره کرد آن است که داده‌های تجربی برای باریکه‌های همدوس و ناهمدوس تفاوت‌های کوچک ولی مهمی با یکدیگر دارند. این



شکل ۳. همانند شکل ۲ ولی برای تکانه انتقالی ۱.۴ a.u.



شکل ۴. سطح مقطع دیفرانسیلی کامل برای یونش مولکول

هیدروژن با استفاده از باریکه‌های همدوس و ناهمدوسی از پروتون‌هایی با انرژی 75 keV به‌عنوان تابعی از زاویه سمتی الکترون گسیل شده رسم شده است. الکترون بر روی سطح مخروطی با زاویه نیم‌رأس 35° و با انرژی جنبشی 41.4 eV گسیل می‌شود. تکانه انتقال یافته از پرتابه به هدف برابر $q=1.25 \text{ a.u.}$ است. داده‌های تجربی از مرجع [۷] گرفته شده‌اند.

در این وضعیت باید نکته دیگری را نیز در نظر داشته باشیم و آن این است که در انجام چنین آزمایش‌هایی، جهت‌گیری مولکول‌ها کاملاً تصادفی و کاتوره‌ای است و نمی‌توان یک مولکول با جهت‌گیری خاص را از سایر مولکول‌ها جدا کرد و آزمایش را با آن انجام داد. در نتیجه، اگر باریکه با طول همدوسی عرضی محدود برای مولکول‌هایی که بر راستای باریکه عمودند ناهمدوس به حساب آید ممکن است برای بعضی دیگر از جهت‌گیری‌های مولکول همدوس باشد. بنابراین نتایج تجربی‌ای که برای باریکه‌های ناهمدوس گزارش شده‌اند در واقع ترکیبی از پراکندگی‌های همدوس و ناهمدوس‌اند.

اگر باریکه ناهمدوس باشد، پهنای عرضی باریکه از فاصله میان دو مرکز پراکندگی موجود در مولکول هدف کوچکتر است و این به آن معناست که باریکه هنگام پراکنده شدن فقط یکی از مراکز پراکندگی را می‌بیند. بنابراین، الگوی تداخلی از آنچه که برای یک باریکه همدوس مشاهده می‌شود متفاوت است.

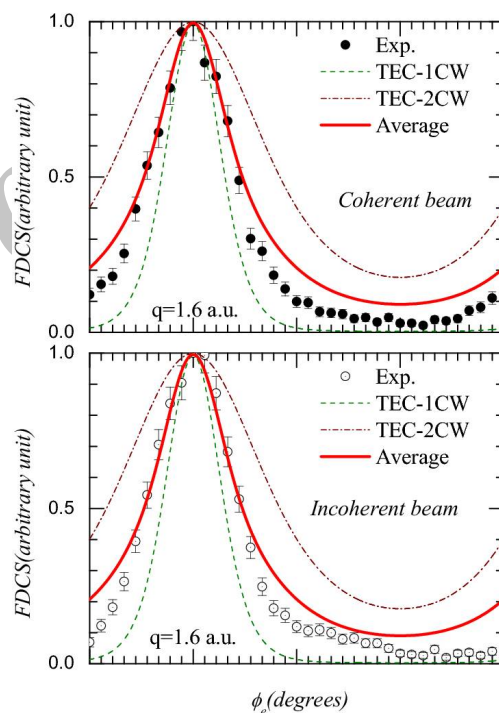
به‌کار بردن رهیافت بسته موجی و در نظر گرفتن همه موارد اشاره شده در مدل‌های نظری ناممکن است. مدلی که در اینجا پیشنهاد شده است، نیز مدلی است که بر اساس همدوس بودن باریکه طراحی شده است، بنابراین نتایج محاسبات با باریکه‌های همدوس

قله در اطراف زاویه سمتی 90° درجه قابل مشاهده است. با این وجود ترکیب دو فرمولبندی، به صورتی که در مدل حاضر پیشنهاد شده است، نتایجی را به دست می‌دهد که در توافق بسیار بهتری با داده‌های تجربی است. همانگونه که شکل‌های ۳ و ۴ نشان می‌دهند، این مدل ترکیبی، مکان قله را به درستی پیش‌بینی می‌کند. هم از نظر بزرگی و هم از نظر شکل، توزیع زاویه‌ای سطح مقطع یونش توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی گزارش شده با باریکه‌های همدوس دارد. مدل حاضر پهنای قله را به درستی پیش‌بینی می‌کند و بزرگی سطح مقطع را در سایر زوایای پراکندگی نیز به درستی تخمین می‌زند.

علی‌رغم موفقیت‌های برشمرده شده در بالا، این مدل دارای کاستی‌هایی نیز می‌باشد که می‌توان به دو مورد از آنها اشاره کرد: اول آن که با افزایش بزرگی تکانه انتقال یافته از پرتابه به هدف (q)، تفاوت میان نتایج نظری و داده‌های تجربی افزایش می‌یابد. در شکل ۳، این تفاوت در زوایای سمتی بزرگتر از 270° درجه و در شکل ۴ در زوایای نزدیک به صفر و زوایای بزرگتر از 180° درجه قابل مشاهده است. دیگر آن که مدل در توضیح ساختارهای کوچکی که در نتایج تجربی گزارش شده برای باریکه‌های ناهمدوس قابل مشاهده‌اند ناکام است. با وجود این ناکامی‌ها، شکل‌های ۲ تا ۴ نشان می‌دهند که مدل مذکور توصیف قابل قبولی از نتایج تجربی گزارش شده برای باریکه‌های همدوس ارائه می‌دهد. شایان ذکر است که تا آنجایی که ما می‌دانیم تا کنون داده‌های تجربی نمایش داده شده در شکل‌های ۲ تا ۴ به صورت نظری مورد مطالعه و بررسی نظری قرار نگرفته‌اند و این اولین پژوهش نظری در این زمینه است.

به‌طور خلاصه در این پژوهش، با ترکیب تقریب‌های TEC-1CW و TEC-2CW، مدلی برای مطالعه نظری

سازگارتر است و هماهنگی بیشتری را نشان می‌دهد. برای آن که نشان دهیم که توافق میان نتایج به دست آمده از مدل نظری حاضر با داده‌های تجربی تصادفی نیست، محاسبات را برای دو مقدار دیگر از تکانه انتقالی، یعنی $q=1.4$ a.u. و $q=1.6$ a.u. انجام داده و نتایج آن را در شکل‌های ۳، ۴ با داده‌های آزمایشگاهی متناظر مقایسه کرده‌ایم. همانگونه که از این شکل‌ها دیده می‌شود، هر یک از مدل‌های TEC-1CW و TEC-2CW به تنهایی در توصیف نتایج آزمایشگاهی ناموفق هستند.



شکل ۴. همانند شکل ۲ ولی برای تکانه انتقالی 1.6 a.u.

هر دو مدل هم پهنای قله مشاهده شده در نتایج تجربی و هم بزرگی سطح مقطع یونش را در سایر زوایای سمتی نادرست تخمین می‌زنند. همانند قبل، نتایج مدل TEC-2CW بزرگتر از مقادیر متناظر آزمایشگاهی و نتایج مدل TEC-1CW کوچکتر از آن مقادیر است. تنها موفقیت مشترک دو مدل در پیش‌بینی صحیح مکان قله‌ای است که در نتایج تجربی مشاهده شده است. این

microscopes, *Reports on Progress in Physics* **66** (2003) 1463

[3] D. Fischer, D. Globig, J. Goullon, M. Grieser, R. Hubele, V.L.B. de Jesus, A. Kelkar, A. LaForge, H. Lindenblatt, D. Misra, B. Najjari, K. Schneider, M. Schulz, M. Sell, and X. Wang, Ion-lithium collision dynamics studied with a laser-cooled in-ring target, *Physical Review Letters* **109** (2012) 113202

[4] M. Schulz, T. Vajnai, J.A. Brand, Differential double capture cross sections in $p+\text{He}$ collisions, *Physical Review A* **75** (2007) 022717

[5] S. Sharma, T.P. Arthanayaka, A. Hasan, B.R. Lamichhane, J. Remolina, A. Smith, M. Schulz, Fully differential study of interference effects in the ionization of H_2 by proton impact, *Physical Review A* **90** (2014) 052710

[6] A. Hasan, S. Sharma, T.P. Arthanayaka, B.R. Lamichhane, J. Remolina, S. Akula, D.H. Madison, M. Schulz, Triple differential study of ionization of H_2 by proton impact for varying electron ejection geometries, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **47** (2014) 215201

[7] T.P. Arthanayaka, S. Sharma, B.R. Lamichhane, A. Hasan, J. Remolina, S. Gurung and M. Schulz, Separation of single- and two-center interference in ionization of H_2 by proton impact, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **48** (2015) 071001

[8] T.F. Tuan, E. Gerjuoy, Charge transfer in molecular hydrogen, *Physical Review* **117** (1960) 756-763

[9] Y.D. Wang, J.H. McGuire, R.D. Rivarola, Impact-parameter treatment of high-velocity electron capture from diatomic molecules at fixed orientation, *Physical Review A* **40** (1989) 3673-3680.

[10] E. Ghanbari-Adivi, S.H. Sattarpour, Eikonal approximation for single-electron capture from hydrogen molecules by proton

یونش مولکول‌های هیدروژن توسط باریکه‌های همدوس و ناهمدوس از پروتون‌های پراثرژی پیشنهاد شد. این مدل اولین مطالعه نظری بر روی داده‌های تجربی نمایش داده شده و بحث شده در متن مقاله است. در مواردی که انرژی الکترون یونیده شده کوچکتر از 20 eV است، تقریب‌های TEC-1CW و TEC-2CW هر یک به تنهایی با داده‌های تجربی توافق خوبی دارند. نشان دادیم که اگر انرژی الکترون گسیل شده افزایش یابد، این مدل‌ها موفقیت خود را از دست خواهند داد و در این موارد باید مدلی مرکب از دو مدل فوق را به کاربرد. مدل حاصل در پیش‌بینی مکان قله مشاهده شده در اندازه‌گیری‌های تجربی، پهنای این قله، شکل توزیع زاویه‌ای سطح مقطع و بزرگی سطح مقطع یونش بسیار موفق است. توافق نتایج محاسبات با اندازه‌گیری‌های گزارش شده برای باریکه‌های همدوس قابل ملاحظه‌تر است. این بدان دلیل است که در مدل ارائه شده اساساً فرض بر آن است که باریکه فرودی یک باریکه همدوس است. برای توصیف ساختارهایی که در داده‌های مربوط به باریکه‌های ناهمدوس قابل مشاهده‌اند باید خاصیت ناهمدوسی باریکه را در مدل منظور کرد که کار بسیار دشوار و حتی ناممکنی است.

مرجع‌ها

[1] R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, J. Ullrich, R. Moshhammer, H. Schmidt-Böcking, Cold target recoil ion momentum spectroscopy: a 'momentum microscope' to view atomic collision dynamics, *Physics Reports* **330** (2000) 95

[2] J. Ullrich, R. Moshhammer, A. Dorn, R. Dörner, L.Ph.H. Schmidt, H. Schmidt-Böcking, Recoil-ion and electron momentum spectroscopy: reaction-

- [18] C.R. Stia, O.A. Fojón, S. Chatterjee, D. Misra, L.C. Tribedi and R.D. Rivarola, Tracing fingerprints of young type interferences in angular distributions of ejected electrons from molecular targets, *Journal of Physics: Conference Series* **212** (2010) 012019
- [19] E. Ghanbari-Adivi, Molecular three-body Brauner-Briggs-Klar theory for ion-impact ionization of molecules, *Europhys. Lett.* **116** (2016) 63001
- [20] M. Brauner, J.S. Briggs, H. Klar, Triply-differential cross sections for ionisation of hydrogen atoms by electrons and positrons, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.*, **22** (1989) 2265
- [11] E. Ghanbari-Adivi, S.H. Sattarpour, Single charge exchange in collision of fast protons with hydrogen molecules, *International Journal of Modern Physics E* **24** (2015) 1550095
- [12] P. Weck, O.A. Fojon, J. Hanssen, B. Joulakian, R.D. Rivarola, Two-effective center approximation for the single ionization of molecular hydrogen by fast electron impact, *Physical Review A* **63** (2001) 042709.
- [13] P.F. Weck, O.A. Fojon, B. Joulakian, C.R. Stia, J. Hanssen, and R.D. Rivarola, Two-center continuum approximation with correct boundary conditions for single-electron emission in e^- -H₂ collisions, *Physical Review A* **66** (2002) 012711.
- [14] C.R. Stia, O.A. Fojon, P.F. Weck, J. Hanssen, B. Joulakian, R.D. Rivarola, Molecular three-continuum approximation for ionization of H₂ by electron impact, *Physical Review A* **66** (2002) 052709 .
- [15] E. Ghanbari-Adivi, Energetic proton-impact single ionization of hydrogen molecules, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **48** (2015) 195203
- [16] E. Ghanbari-Adivi, Two-effective-center approximation for proton-impact single ionization of hydrogen, *The European Physical Journal D* **69** (2015) 228
- [17] M.F. Ciappina, C.A. Tachino, R.D. Rivarola, S. Sharma and M. Schulz, Single- and two-centre effects in fully differential cross sections for single ionization of H₂ molecules by 75 keV protons, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **48** (2015) 115204

Ionization of the molecular targets using the coherent and incoherent ion beams

Ebrahim Ghanbari-Adivi*

Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Isfahan, Isfahan 81746-73441, Iran

Received: 13.08.2016 Final revised: 04.03.2017 Accepted: 29.05.2017

Abstract

One of the important and interesting aspects of the ionization of the molecular targets using the ionic beams is the interference which occurs between the beams scattered from different molecular scattering centers. Experience has shown that the interference patterns occurred using the coherent and incoherent beams have some small but important differences with each other. The taking into account of the origin of these differences by theoretical approaches is usually difficult even impossible. In this research, a theoretical model is proposed to study the triple differential cross sections of ionization of hydrogen molecules by energetic proton beams. In this model, the ionization cross section is obtained by a superposition of the partial cross sections in the two-effective-center (TEC) approximation with one and two Coulomb waves. The obtained results for collision of protons with hydrogen molecules are compared with experimental data. Comparison shows that the interference effects due to the superposition of the two partial amplitudes are in good agreement with the interference patterns observed for the coherent proton beam.

Keywords: ionization, triple differential cross section, two-effective-center approximation, interference, coherent and incoherent beams

* Corresponding Author: ghanbari@phys.ui.ac.ir