سطح مقطع های موج s اتمهای $d\mu(1s)$ در گاز H_2 با ساده سازی پتانسیل مؤثر سه بعدی

قیصری، روح اله*؛ رحیمی، ناهید؛ اسلامی زاده، هادی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه خلیج فارس ۷۵۱۶۹، بوشهر

چکیده

در این تحقیق سطح مقطع برخورد الاستیک اتم میونی $d\mu(1s)$ با هسته های گاز H_2 تخمین زده می شود. با توجه به فرض مسئله سطح مقطع برخورد الاستیک آن دسته از اتم های میونی ورودی $d\mu$ را مورد مطالعه قرار می دهیم، که با موج s توصیف می شوند. سطح مقطع برخورد اتم های فرودی را در انرژی های $E=0.01,0.1eV$ همراه با شیفت فاز در پراکندگی بدست خواهیم آورد. برای اعتبار تئوری، اولین تراز انرژی مولکول $pd\mu$ نیز با تعیین ثابتهای موجود در پتانسیل مؤثر بدست می آید. در برخورد الاستیک اتم میونی $d\mu$ با هسته هیدروژن، تابع موج ذرات خروجی در فاصله ی زیاد می بایست با تابع موج کروی توصیف شوند که ما این همپوشانی را از حل معادله شرودینگر نشان خواهیم داد.

s-Wave Cross Sections of $d\mu(1s)$ in H_2 Gas by Using a Three Dimentional-Effective Potential Simplfied

Gheisari, Rouhollah*; Rahimi, Nahid; Eslamizadeh, Hadi

Physics Department, Persian Gulf University 75169, Bushehr

Abstract

In this research, we estimate the elastic cross sections of $d\mu(1s)$ atoms in H_2 gas. s-wave cross sections are investigated. These quantities for atom-projectiles with $E=0.01,0.1eV$ are obtained, as well as the phase shift. Also, the lowest state of $pd\mu$ molecule is calculated, by substituting constant parameters in the effective potential. In the elastic collisions $\mu d(1s)+p$, out-going wave function overlaps with spherical wave function. We show this fact here.

PACS No.25

مقدمه

مطالعات و آزمایش های فراوانی روی برهمکنش اتم های میونی با ایزوتوپهای هیدروژن انجام شده است. یک دسته از مطالعات تئوریک روی برهمکنش های رابطه (۱) متمرکز شده است [۱ و ۲ و ۳].

$$\mu d(1s)+p \rightarrow pd\mu \rightarrow \mu d(1s)+p \qquad (۱)$$

مقادیر سطوح مقطع اتم های میونی در واکنش ها، در طراحی راکتورهای μCF و مطالعه ی لایه های نازک اهمیت دارند. آنچه مورد مطالعه قرار می گیرد، واکنش الاستیک اتم میونی $\mu d(1s)$ با هسته های p است.

بر طبق آنچه فرض کرده ایم، اتم های میونی μd اولیه دارای انرژی $E\sim 10^{-2},10^{-1}eV$ هستند. *به دلیل اینکه موج s مورد بررسی قرار می گیرد، ذرات فرودی با انرژی مذکور فرض می شوند.*

شکل پتانسیل مورد مطالعه در این مقاله، از پتانسیل سه بعدی مطرح شده در مرجع [۱] استخراج می گردد. با انجام محاسبات و ساده سازی پارامتر های A_2' ، A_2 ، β_2' ، β_2 ، α_2'

و α_2 [۱] را طوری تعیین می کنیم که در نهایت پتانسیل مورد نظر، شرایط مسئله را بر آورده کند.

روش کار

در مرجع [۱] پتانسیل مؤثر بر حسب مختصات ژاکوبی به صورت زیر بیان شده است.

$$\vec{V}^{k,j}(\rho_k,\rho_j)=\frac{e^2}{\zeta_j}\int_{|\zeta_j\rho_j-\rho_k|}^{\zeta_j\rho_j+\rho_k} exp[-\alpha_{j3}r_{j3}(x)] \times(-\frac{1}{r_{j3}(x)}+\frac{1}{r_{jk}(x)})\exp(-\frac{\alpha_{k3}}{\gamma}x) \times[A'_j\exp(-\left|\frac{\beta'_j}{\gamma}\vec{x}+\beta_j\vec{\rho}_j\right|) + A_j\exp(-\left|\frac{\alpha'_j}{\gamma}\vec{x}+\alpha_j\vec{\rho}_j\right|)]dx \quad (۲)$$

در این کار با ساده سازی تحلیلی و انتخاب $k=1$ و $j=2$، شکل پتانسیل را به پتانسیل سه بعدی زیر تبدیل می کنیم.

$$V^{1,2}(\rho_1,\rho_2)=\frac{e^2}{\zeta_2}\int_{|\zeta_2\rho_2-\rho_1|}^{\zeta_2\rho_2+\rho_1} e^{-\frac{\alpha_{23}}{\gamma}((\zeta_1\zeta_1-1)\frac{\zeta_1}{\zeta_2}\rho_1^2+\frac{\zeta_1}{\zeta_2}x^2+(1-\zeta_2\zeta_1)\rho_2^2)^{1/2}} \times (-\frac{\gamma}{((\zeta_1\zeta_2-1)\frac{\zeta_1}{\zeta_2}\rho_1^2+\frac{\zeta_1}{\zeta_2}x^2+(1-\zeta_2\zeta_1)\rho_2^2)^{1/2}}+ \frac{\gamma}{((1-\zeta_2-\zeta_1\zeta_2+\zeta_1\zeta_2^2)\rho_2^2+((\zeta_1^2-\zeta_1+\frac{(1-\zeta_1)}{\zeta_2})\rho_1^2-\frac{(1-\zeta_1)(1-\zeta_2)}{\zeta_2}x^2)^{1/2}})$$

$$\times e^{-\frac{\alpha_{13}}{\gamma}x}[A'_2\exp-\{((\frac{\zeta_2\beta'_2}{\gamma}+\beta_2)^2-\frac{\zeta_2\beta'_2}{\gamma}(\frac{\zeta_2\beta'_2}{\gamma}+\beta_2))\rho_2^2+ (\frac{\beta'^2_2}{\gamma^2}-\frac{\beta'_2}{\gamma\zeta_2}(\frac{\zeta_2\beta'_2}{\gamma}+\beta_2))\rho_1^2+\frac{\beta'_2}{\gamma\zeta_2}(\frac{\zeta_2\beta'_2}{\gamma}+\beta_2)x^2\}^{1/2} + A_2\exp-\{((\frac{\zeta_2\alpha'_2}{\gamma}+\alpha_2)^2-\frac{\zeta_2\alpha'_2}{\gamma}(\frac{\zeta_2\alpha'_2}{\gamma}+\alpha_2))\rho_2^2+ (\frac{\alpha'^2_2}{\gamma^2}-\frac{\alpha'_2}{\gamma\zeta_2}(\frac{\zeta_2\alpha'_2}{\gamma}+\alpha_2))\rho_1^2+\frac{\alpha'_2}{\gamma\zeta_2}(\frac{\zeta_2\alpha'_2}{\gamma}+\alpha_2)x^2\}^{1/2}]dx \quad (۳)$$

در پتانسیل رابطه (۳)، ثابت های $\zeta_2=\frac{m_2}{m_2+m_3}$، $\zeta_1=\frac{m_1}{m_1+m_3}$، $\gamma=1-\zeta_1\zeta_2$، $\alpha_{23}=3.7\times10^{10}cm$، ثابت پلانک و مقدار بار الکترون را جایگزین می کنیم. m_1 و m_2 به ترتیب جرم های مربوط به هسته های پروتون و دوترون و m_3 معرف جرم میون است. ρ_1 فاصله اتم μd از p و ρ_2 فاصله اتم μp از d است. با این قید که $A_2=A'_2$ و $\alpha'_2=\beta'_2$، مجهولات A'_2، A_2، β'_2، β_2، α'_2 و α_2 را طوری تعیین می کنیم، که پتانسیل شرایط مسئله را برآورده سازد. برای بدست آوردن انرژی پایین ترین تراز مولکول $pd\mu$ با انتخاب $\rho_1=1.5\times\zeta_2\rho_2$ به پتانسیل مؤثر $V(\rho_2)$ دست می یابیم. رابطه بین ρ_1 و ρ_2 طوری است، که پتانسیل مورد نظر شامل پایین ترین نقطه چاه پتانسیل سه بعدی (رابطه ۳) باشد. با تعیین A'_2، A_2، β'_2، β_2، α'_2 و α_2 پایین ترین نقطه چاه در زیر سطح پایین ترین تراز انرژی مولکول $pd\mu$ واقع می شود (شکل ۱) و از سوی دیگر با قرار دادن $V(\rho_2)$ در معادله شرودینگر و به ازای l=0 (موج s)، تابع موج $y_2(\rho_2)$ را بدست می آوریم. تابع موج می بایست در محدوده ای که غیر صفر است، بهنجار شود. در این راستا با قید رابطه (٤) ضریب بهنجارش تابع موج را بدست می آوریم.

$$\int_0^{b_2} c_2^2 y_2(\rho_2)^2\rho_2^2 d\rho_2=1 \quad (٤)$$

$b_2\approx1.4\times10^{-12}cm$ محدوده غیر صفر تابع موج و c_2 ضریب بهنجارش است.

اگر بخواهیم سطح مقطع ها را در پراکندگی الاستیک $\mu d(1s)+p$ بدست آوریم، با انتخاب $\rho_2=0.8\times\zeta_1\rho_1$ پتانسیل مؤثر $V(\rho_1)$ را طوری خواهیم داشت، که شامل پایین ترین نقطه چاه پتانسیل سه بعدی باشد. با اعمال پتانسیل مؤثر $V(\rho_1)$ در معادله شرودینگر و حل آن به ازای انرژی های $E\sim10^{-2},10^{-1}eV$ توابع موج مربوطه را در راستای جدید بدست می آوریم. تابع موج

$$g(\rho_1)=S\frac{\sin(k\rho_1+\delta_o)}{(k\rho_1)} \quad (٥)$$

بیانگر توابع موج کروی بعد از پراکندگی است. با قرار دادن محدوده انرژی مذکور در رابطه (٦) می توان عدد موج k را بدست آورد.

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m},\ m=\frac{m_1(m_2+m_3)}{m_1+m_2+m_3} \quad (٦)$$

به ازای ρ_1های بزرگ می بایست تابع موج حاصل از حل معادله شرودینگر از تابع موج کروی پیروی کند. نتایج کار در شکل ۳

نشان داده شده است. می بایست مجموع انتگرال توان دوم دو تابع موج $g(\rho_1)$ و $y_1(\rho_1)$ برابر با یک باشد.

$$\int_0^{d_1} c_1^2 y_1(\rho_1)^2 \rho_1^2 d\rho_1 + \int_{d_1}^{\infty} g(\rho_1)^2 \rho_1^2 d\rho_1 = 1 \qquad (۷)$$

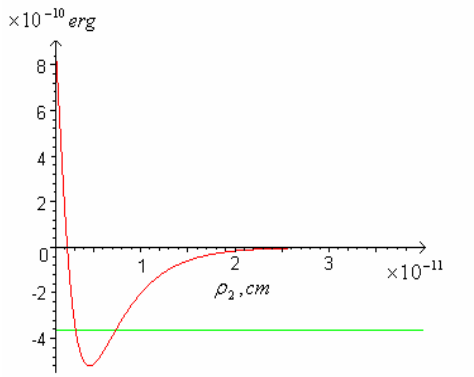
c_1 ضریب بهنجارش تابع موج $y_1(\rho_1)$ و d_1 تا بینهایت محدوده ی همپوشانی دو تابع است که بسته به مقدار انرژی وارد شده در معادله شرودینگر مقادیر متفاوتی خواهد داشت. با تعیین ثابت S ، δ_0 در موج کروی و ضریب بهنجارش c_1، شرایط بیان شده در بالا را به ازای انرژی های داده شده فراهم کرده ایم. با وارد کردن مقادیر بدست آمده δ_0 (شیفت فاز در پراکندگی) و k در رابطه ی (۸) سطح مقطع های واکنش را به دست آورده و با مقادیر برآورد شده از مرجع [۵] مقایسه می نماییم.

$$\sigma_s^{el} = \frac{4\pi}{k^2} \sin \delta_0^{\,2} \qquad (۸)$$

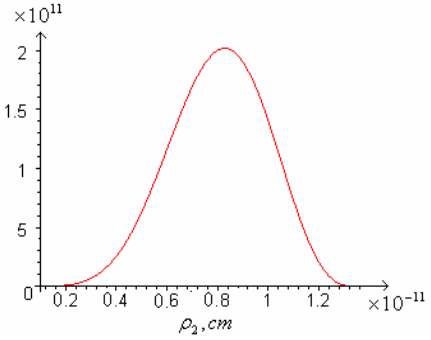
جدول ۱ نتایج حاصل از مقادیر سطح مقطع را نشان می دهد.

بحث و نتیجه گیری

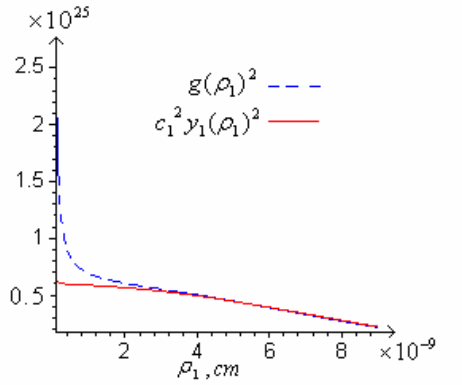
برای بدست آوردن تراز های مولکولی $pd\mu$ به کمک پتانسیل $V(\rho_2)$، محاسبات انجام شد. ما توانستیم پایین ترین تراز را بدست آوریم. مقدار انرژی تراز مذکور $E_2 \approx -226eV$ بدست آمد، که خطای محاسبات با مقدار انرژی گزارش شده در مرجع [٤] ،تقریبا" ۲درصد است. توان دوم تابع موج بهنجار شده، $c_2^2 \rho_2^2 y_2^2(\rho_2)$، حاصل از حل معادله شرودینگر با اعمال پتانسیل $V(\rho_2)$ دارای یک قله است (شکل ۲). این تابع موج در محدوده $\rho_2 = 0$ تا $\rho_2 = b_2$ اعتبار دارد. در واکنش الاستیک اتم میونی $d\mu(1s)$ با هسته های گاز H_2، اتم های میونی با هسته ها برخورد و بسته به انرژی با ترکیبی از امواج s ، p ، d و غیره پراکنده می شود. تابع موج $y_1(\rho_1)$ حاصل از حل معادله شرودینگر با اعمال $V(\rho_1)$ در فاصله بین $\rho_1 = 0$ تا $\rho_1 = d_1$ اعتبار دارد. در فواصل دورتر تابع موج به صورت یک موج کروی رفتار می کند، بنابراین در فواصل خارج از این محدوده، $g(\rho_1)$ موج ذره را توصیف می کند. در انرژی های $E = 0.01, 0.1eV$ پراکندگی اتم ها با موج s قابل توصیف است. به همین علت انرژی اتم های ورودی را در این حدود گرفتیم و سطح مقطع های موج s را با دقت خوبی نزدیک به سطح مقطع های برآورد شده از مرجع [۵] به دست آوردیم. به ازای انرژی $0.01eV$ و $\delta_0 = 0.034$ خطای محاسبه در سطح مقطع با مقدار برآورد شده در مرجع [۵]، ۸٫۸۰ در صد و به ازای انرژی $0.1eV$ و $\delta_0 = 0.039$ خطای محاسبه شده در سطح مقطع ۷٫۳۳ در صد است. در آخر اشاره می کنیم که، محاسبه انتگرال مربوط به پتانسیل ها به روش سیمپسون [٦] و حل معادله شرودینگر به روش روسن–بروک [۷ و ۸] انجام گرفته است.



شکل ۱ : پتانسیل مؤثر $V(\rho_2)$ و پایین ترین تراز انرژی مولکول $pd\mu$.



شکل ۲ : توان دوم تابع موج بهنجار شده، $c_2^2 \rho_2^2 y_2^2(\rho_2)$ ، حاصل از حل معادله شرودینگر با پتانسیل $V(\rho_2)$ برای پایین ترین تراز مولکول $pd\mu$.



شکل ۳ : همپوشانی توان دوم تابع موج، $c_1^2 y_1^2(\rho_1)$ ، و تابع موج کروی در ρ_1 های بزرگ.

جدول ۱ : سطح مقطع های پراکندگی الاستیک $\mu d(1s) + p$ $(\times 10^{-18} cm^2)$ به ازای انرژی های برخوردی (eV).

انرژی	این مقاله	[٥]
۰,۰۱	۰,۹۱۲	۱
۰,۱	۰,۱۱۷	۰,۱۰۹

مرجع ها

[۱] R. Gheisari; *Mol. Phys.* **107** (2009) 1685.

[۲] R. A. Sultanov and S. K. Adhikari; *Phys. Rev. A* **61** (2000)022711.

[۳] R. A. Sultanov and D. Guster; *J. of Com. Phys.* **192** (2003) 231.

[٤] V.E.Markushin; *Few-Body Systems Suppl.* **99** (1999)1-10.

[٥] M. C. Fujiwara; Ph.D. thesis, Uppsala University (1996).

[٦] Bernard V. Liengme; "A Guide to Microsoft Excel for Scientists and Engineers , 2nd ed "; Woborn, MA (2000) 195.

[۷] E. Hairer and *G.* Wanner; *"Solving Ordinary Differential Equations II, 2nd ed"*; *Springer* (1996).

[۸] L.F. Shampine and *R.M.* Corless; *"Initial Value Problems for ODEs in Problem Solving Environments"*; *J. Comp. Appl. Math*, **125** (2000) 31-40.