

نشریه دانشکده علوم جلد سوم شماره ۳ مه‌ماه ۱۳۵۰

# محاسبه جمع مقاطع تصادم برای تحریک و یونیزه شدن اتمها و یونهای شبه هیدرژن در اثر برخورد با ذرات باردار و تند

دکتر کاظم اسیدوار

گروه فیزیک

دانشکده علوم - دانشگاه تهران

**مقدمه** - در فیزیک پلاسما، مطالعه اتمسفر ستاره‌ها و خورشید برای دانستن حالت پلاسما از قبیل دانسیته و درجه حرارت الکترونها، تصادمهای اتمی رل مهمی را بازی میکنند. در میان این تصادمها، تصادمهایی که میان الکترونها و اتمهای خنثی انجام میگیرد مهمتر هستند. در این تصادمات سطوح انرژی اتمها تغییر مییابند و این تغییر موجب تشعشع اتمها میگردد. چون مقدار عمده پلاسما از اتم هیدرژن و یون آن تشکیل شده مطالعه این تصادمات در مورد اتم هیدرژن و الکترون اهمیت بیشتری دارند.

در این مطالعات بایستی مقطع مؤثر را در باره این تصادمات محاسبه نمود. هانس بتا (Hans Bethe) در ۱۹۳۰ مقطع مؤثر تمام تصادمات میان اتم هیدرژن و الکترون را که در آنها اتم هیدرژن در ابتدا در پائین ترین سطح انرژی خود و یا حالت نرمال خود قرار گرفته است محاسبه نموده است. محاسبات بتا با وجود کامل بودن برای محاسبات پلاسما کافی نیست، چون در پلاسماهایی که درجه حرارت آنها زیاد است تمام اتمهای هیدرژن در حالت نرمال خود قرار ندارند.

در این مقاله یک فرمول آنالیتیک بدست آمده است که شبیه فرمول بتا مقطع مؤثر کل تصادمات غیرالاستیکی را بدست میدهد و در آن هر نوع تحریک ممکن و یونیزاسیون جمع شده است ولی فرق آن

با فرمول بتا این است که اتم هیدرژن میتواند هرگونه حالت اولیه را داشته باشد. بنابراین فرمول بتا یک حالت اختصاصی از فرمولهای بدست آمده در اینجا خواهد بود.

**فرموله نمودن مسئله** - در ابتدا رابطه‌ای که مربوط به خواص مجموعه‌های کامل است بدست می‌آید. این رابطه معروف بر رابطه بهم بستگی (Closure) است و بدست آوردن آن بقرار زیر است. برای سهولت ابتدا مسئله در یک بعد مطرح میشود. هر تابع آنالیتیک نامشخص  $f(x)$  را میتوان بطریق زیر بر حسب مجموعه کامل (Complete Set)  $u_n(x)$  گسترش داد.

$$f(x) = \sum_n a_n u_n(x) \quad (1)$$

جائیکه  $s_n$  عبارت از جمع اگر  $u_n$  متقاطع و عبارت از انتگرال اگر  $u_n$  مداوم باشد میباشد. برای مثال بسط بوسیله سری فوریه یک حالت اختصاصی از (۱) است. از اینجهت که  $u_n(x)$  یک مجموعه ارتونورمه است حاصل میشود.

$$a_n = \int u_n^*(x') f(x') dx' \quad (2)$$

و بدین ترتیب رابطه (۱) بصورت زیر در می‌آید:

$$f(x) = \sum_n u_n^*(x') u_n(x) f(x') \quad (3)$$

از اینجهت که  $f(x)$  یک تابع نامشخص است، رابطه بالا در صورتی صادق است که:

$$\sum_n u_n^*(x') u_n(x) = \delta(x - x') \quad (4)$$

باشد.

رابطه (۳) و (۴) را باسانی میتوان به  $\delta$  بعد تعمیم داد. در مورد سه بعد اگر مجموعه کامل

به  $\psi_n(\mathbf{r})$  نشان داده شود برای هرتابع نامشخص  $A(\mathbf{r})$  رابطه زیر حاصل میشود:

$$A(\mathbf{r}) = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}') \quad (5)$$

$$\sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}') \psi_n(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (6)$$

چون تمام محاسباتی که در زیر توضیح داده خواهد شد، در سه بعد انجام میگیرد از نوشتن اندیس  $\mathbf{r}$  صرفنظر میشود و طبق نوتاسیون دیراک  $\psi_n(\mathbf{r})$  به  $|n\rangle$  نشان داده میشود. برای مثال طبق این نوتاسیون:

$$\langle n' | A | n \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (7)$$

میباشد. در محاسباتی که برای تعیین مقطع تصادم کل در انرژیهای بالا لازم است احیاج بمجدور قدر مطلق (۷) وقتی که این مجدور نسبت به  $n'$  جمع شده باشد میباشد. در زیر این مقدار تعیین ارزش میشود. ابتدا بر رابطه زیر توجه میکنیم:

$$\sum_{n' \neq n} |\langle n' | A | n \rangle|^2 = \sum_{n'} |\langle n' | A | n \rangle|^2 - |\langle n | A | n \rangle|^2 \quad (۸)$$

جائیکه  $A = A(\mathbf{r})$  ممکن است یک تابع معمولی و یا یک عامل فیزیکی (Physical Operator) مانند انرژی و یا ممان و یا پتانسیل ذره باشد. این عامل ممکن است بصورت یک مشتق و یا یک انتگرال باشد. در طرف راست (۸) جمع نسبت به تمام مقادیری است که  $n'$  میگیرد و در طرف چپ جمع نسبت به تمام مقادیر  $n'$  باستانی  $n' = n$  میباشد.

اکنون دنا بتعریف و با استفاده از (۶):

$$\begin{aligned} \sum_{n'} |\langle n' | A | n \rangle|^2 &= \sum_{n'} \int \psi_{n'}^*(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) d\tau \\ &\quad \times \int \psi_n(\mathbf{r}') A^*(\mathbf{r}'') \psi_{n'}^*(\mathbf{r}'') d\tau'' \\ &= \int \psi_n^*(\mathbf{r}'') \psi_n(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) A^*(\mathbf{r}'') [\sum_{n'} \psi_{n'}^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}')] d\tau d\tau'' \\ &= \int \psi_n^*(\mathbf{r}) |A(\mathbf{r})|^2 \psi_n(\mathbf{r}) d\tau \\ &= \langle n | |A|^2 | n \rangle \end{aligned} \quad (۹)$$

بدین ترتیب رابطه زیر حاصل میشود:

$$\sum_{n' \neq n} |\langle n' | A | n \rangle|^2 = \langle n | |A|^2 | n \rangle - |\langle n | A | n \rangle|^2 \quad (۱۰)$$

این رابطه ایست که در پی بدست آوردن آن بودیم.

اکنون تصادمی میان یک اتم شبه هیدروژن و ذره‌ای که دارای بار الکتریکی است در نظر میگیریم. اتمهای شبه هیدروژن مدلی از اتمهای حقیقی هستند که در آن الکترونها مستقل از یکدیگر در میدان مرکزی هسته اتم دور میزنند (در اینجا برای سهولت فهم مسئله تشبیهات کلاسیک بکار میرود) مقداری از بار هسته بوسیله الکترونهای داخلی خنثی شده‌اند. مقدار بار خنثی شده بوسیله الکترونهای داخلی برای هر الکترون مشخص از هراتم را بوسیله محاسباتی که بنام محاسبات هارتری فاک

(Hartree Fock) معروفند میتوان معین نمود.

تصادم یک ذره باردار با یک اتم در اثر نیروی کولونی است که بین این ذره و الکترونها اتم وجود دارد. از نظر تصادم غیرالاستیکی که مورد نظر ما است نیروی کولون بین ذره و هسته اتم رلی بازی نمیکند. طبق تعریف اگر اتم در اثر تصادم حالت خود را از دست ندهد تصادم الاستیکی و در غیر اینصورت غیرالاستیکی است. در اثر تصادم غیرالاستیکی، اتم ممکن است بترازهای انرژی بالاتر و یا پائین تر انتقال یابد. اگر اتم بتراز انرژی پائین تر انتقال یابد برخورد تصادم فوق الاستیک (Super Elastic) نامیده میشود ولی اگر اتم بتراز انرژی بالاتر انتقال یابد ولی الکترون از اتم کنده نشود عمل را تحریک (Excitation) خوانند. هرگاه انتقال انرژی بقدری باشد که الکترون از اتم کنده شود عمل یونیزه شدن (Ionization) نامیده میشود.

وقتی تصادم در انرژیهای بالا انجام گیرد تصادمهای الاستیکی نسبت بتصادمهای غیرالاستیکی قابل صرفنظر کردن است. در این گزارش مقطع تصادم مربوط به مجموعه برخوردهای غیرالاستیکی در انرژیهای بالا بین ذرات دارای بار الکتریکی و اتمها و یا یونها شبیه هیدرژن محاسبه گردیده است. از تصحیحی که بنا بنظریه نسبیت در انرژیهای بالا بایستی بعمل آید صرفنظر شده است. بنابراین دامنه اعتبار فرمولهای بدست آمده برای سرعتهایی از ذرات باردار است که شرط  $v/c \ll 1$  صدق نماید جائیکه  $v$  سرعت ذره و  $c$  سرعت نور است.

فرض کنیم که بار الکتریکی ذره باردار  $ze$  و توده آن  $M$  باشد جائیکه  $e$  قدر مطلق بار الکتریکی الکترون است. مقطع تصادم برای مجموعه برخوردهای غیرالاستیکی برطبق تقریب بورن (Born Approximation) با رابطه زیر داده میشود:

$$Q_B(i) = \frac{8\pi}{a_0^2 R_1^2} \left(\frac{M}{\mu} z\right)^2 \sum_{f \neq i} \int_{R_1 - R_2}^{R_1 + R_2} | \langle f | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | i \rangle |^2 \frac{dq}{q^3} \quad (11)$$

جائیکه  $Q_B$  مقطع تصادم برطبق تقریب بورن و  $i$  حالت اولیه اتم و  $f$  حالت اتمهای آنست. بدیهی است که برای مجموعه برخوردهای غیرالاستیکی  $f$  شامل مجموعه حالات باستثای  $f=i$  میشود. در رابطه بالا  $R_1$  و  $R_2$  عدد موج ذره باردار پیش و پس از تصادم میباشد و اگر  $t=1$  گرفته شود و انرژی اتم پیش از برخورد به  $E_i$  و  $E_f$  نشان داده شود بین  $R_1$  و  $R_2$  و  $E_i$  و  $E_f$  رابطه زیر برقرار است:

$$R_1^2 - R_2^2 = (M/\mu)(E_f - E_i) \quad (12)$$

در این رابطه و (۱۱)  $\mu$  توده یک الکترون و در (۱۱)  $a_0$  شعاع بهر (Bohr) میباشد.

در (۱۱) بردار  $\mathbf{q}$  عبارت از زمانی است که ذره باردار با تم منتقل میکند و در سیستم واحدی

که  $t=1$  میباشد بایستی داشته باشیم :

$$\mathbf{q} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 \quad (13)$$

و از این روشی نیموم و ماکزیموم  $|\mathbf{q}|$  بایستی با روابط :

$$q_{\min} = R_1 - R_2 \quad \text{و} \quad q_{\max} = R_1 + R_2 \quad (14)$$

داده شده باشند. اگر نمره کوانتوم کل اتم هسته هیدروژن پیش از برخورد  $n$  و پس از برخورد  $n'$  باشد و اتم دارای بار مرکزی  $Z$  باشد  $E_i$  و  $E_f$  با روابط :

$$E_i = -\frac{Z^2}{a_0^2 n^2} \quad \text{و} \quad E_f = -\frac{Z^2}{a_0^2 n'^2} \quad (15)$$

داده میشوند. در انرژیهای بالا که شرط  $R_1 \gg 1/a_0$  صدق میکند، باسانی میتوان نشان داد که حدود انتگرال (۱۱) با روابط زیر داده میشوند.

$$q_{\min} = \frac{\alpha_{nn'}^2}{2R_1} \quad \text{و} \quad \alpha_{nn'}^2 \equiv \frac{Z^2}{a_0^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \quad \text{و} \quad q_{\max} = 2R_1 \quad (16)$$

جائیکه علامت  $\equiv$  نماینده تعریف یک مقدار جدید است.

اکنون انتگرال (۱۱) را میتوان بدو قسمت نمود و در نتیجه (۱۱) بصورت زیر نوشته میشود :

$$Q = Q_1 + Q_2 \quad (17)$$

$$Q_1 = \frac{8\pi}{a_0^2 R_1^2} \cdot \left( \frac{M}{\mu} z \right)^2 \sum_{f \neq i} \int_{q_{\min}}^{q_0} \frac{dq}{q^3} |\langle f | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | i \rangle|^2 \quad (18)$$

$$Q_2 = \frac{8\pi}{a_0^2 R_1^2} \left( \frac{M}{\mu} z \right)^2 \sum_{f \neq 0} \int_{q_0}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} |\langle f | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | i \rangle|^2 \quad (19)$$

در روابط بالا پارامتر  $q_0$  طوری انتخاب میشود که شرط زیر را اقلان نماید :

$$\frac{\alpha_{nn'}^2}{2R_1} \ll q_0 \ll \frac{Z}{a_0} \left( \frac{1}{n} + \frac{1}{n'} \right) \quad (20)$$

علت انتخاب پارامتر  $q_0$  بقرار زیر است. با توجه بر رابطه (۱۸) ملاحظه میشود که در نواحی مجانبی  $|i\rangle$  و  $|f\rangle$  متناسب با  $\exp[-Zr/na_0]$  و  $\exp[-Zr/n'a_0]$  میباشند و از این قرار وقتی  $r$  زیاد میشود انتگرال  $\langle f | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle$  متناسب با  $\exp\left[-(Zr/a_0)\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{n'}\right)\right]$  میشود. بنابراین در انتگرال  $\langle f | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle$  میتوان گفت که از ارزشهایی از  $r$  که خیلی بزرگتر از:

$$r_0 = \left( \frac{a_0}{Z} \right) \left( \frac{1}{n} + \frac{1}{n'} \right)^{-1}$$

باشند، میتوان صرفنظر نمود چون در این صورت انتگرال فوق العاده کوچک است. بنابراین بجای اینکه حدود انتگرال نسبت به  $r$  از صفر تا بینهایت باشد میتوان آنرا از صفر تا  $r_0$  گرفت. در این حدود (۲۰) نشان میدهد که:

$$q_0 r_0 \ll 1 \quad (21)$$

است چون  $r$  کوچکتر و یا مساوی  $r_0$  است میتوان در (۱۸) تابع  $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$  را نسبت به  $\mathbf{r}$  و  $\mathbf{q}$  بسط داد و اولین جمله‌ای که صفر نمیشود نگهداشت. از اینجهت (۱۸) تبدیل برابطه زیر میشود:

$$Q = \frac{8\pi}{a_0^2 R_1^2} \left( \frac{M}{\mu} z \right)^2 \sum_{f \neq i} |\langle f | z | i \rangle|^2 \int_{q_{\min}}^{q_0} \frac{dq}{q} \quad (22)$$

و یا توجه به (۱۶) خواهیم داشت:

$$Q_1 = \frac{8\pi}{a_0^2 R_1^2} \left( \frac{M}{\mu} z \right)^2 \sum_{f \neq i} |\langle f | z | i \rangle|^2 \ln \frac{2R_1 q_0}{\alpha_{nn'}^2} \quad (23)$$

از طرف دیگر نامساوی اول (۲۰) نشان میدهد که حد پائینی انتگرال (۱۹) مستقل از انرژی حالت انتهایی تحریک میباشد بنابراین قاعده جمع (۱۰) را برای این انتگرال با قرار دادن  $A = \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$  میتوان بکار برد و از اینرو نتیجه میشود:

$$Q_2 = \frac{8\pi}{a_0^2 R_1^2} \left( \frac{M}{\mu} z \right)^2 \int_{q_0}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} [1 - |\langle i | e^{iq \cdot r} | i \rangle|^2] \quad (24)$$

باین ترتیب مسئله تعیین ارزش مقطع تصادم برای مجموعه تصادمهای غیرالاستیکی تبدیل به تعیین ارزش ماتریسهای غیر نظری (۲۳) و ماتریسهای نظری (۲۴) میشود. در (۲۴) به علاوه یک انتگرال نسبت به  $q$  بایستی بعمل آید. تعیین ارزش این ماتریسها بوسیله توابع موجی بعمل میآیند که تابعی از بردار وضعی الکترون در محور مختصات هزلولی (Parabolic Coordinates) میباشد. این تعیین ارزش شامل یکعده عملیات جبری است که خالی از ایده‌های فیزیکی میباشد، از اینجهت در اینجا ذکر نمیگردند. علاقمندان میتوانند بمقاله مفصل تری که بعداً بزبان انگلیسی منتشر میگردد مراجعه نمایند. فعلاً بایستی در نظر گرفته شود که ماتریسهای (۲۳) بردو نوع اند. در یک نوع حالت‌انتزائی مربوط بتحریک میباشد و از اینجهت  $|f\rangle$  تابع بسته‌ایست. در نوع دیگر الکترون یونیزه میشود و از اینجهت  $|f\rangle$  برابر با تابع موج کولن با انرژی مثبت میشود. تابع موج کولن کن به  $|R\rangle$  نشان داده میشود بستگی بجهت حرکت الکترون پس از یونیزه شدن اتم دارد و  $R$  همان این الکترون میباشد. در زیرانتگرال مجذور قدر منطق ماتریسهای مربوط نسبت به  $\hat{k}$  که جهت حرکت الکترون را مشخص میکند داده شده‌اند.

همچنین بایستی دقت شود که  $li <$  با اعداد کوانتوم در مختصات هزلولی که  $nmn_1$  باشند و  $|f\rangle$  با اعداد مشابه کوانتوم که  $n'mn'_1$  باشند مشخص شده‌اند.  $n$  عبارت از عدد کوانتوم کل و  $m$  قدر مطلق عدد کوانتوم مغناطیسی و  $n_1$  عدد کوانتوم هزلولی است. ماتریسهای مربوط بقرار زیرند:

$$\begin{aligned} \langle m'mn'_1 | z | nmn_1 \rangle &= \frac{1}{4Z} \left[ \frac{4\alpha'\alpha}{(\alpha+\alpha')^2} \right]^{m+2} \\ &\times \left[ \frac{(n_1+m)!}{n_1!} \times \frac{(n_2+m)!}{n_2!} \times \left( \frac{(n'_1+m)!}{n'_1!} \right) \times \frac{(n'_2+m)!}{n'_2!} \right]^{1/2} \\ &\times \sum_{r_1=0}^{n_1} \sum_{r_2=0}^{n_2} \sum_{r'_1=0}^{n'_1} \sum_{r'_2=0}^{n'_2} \left( \frac{-2\alpha}{\alpha+\alpha'} \right)^{r_1+r_2} \left( \frac{-2\alpha'}{\alpha+\alpha'} \right)^{r'_1+r'_2} \\ &\times \binom{n_1}{r_1} \binom{n'_1}{r'_1} \binom{n_2}{r_2} \binom{n'_2}{r'_2} \times \frac{(m+r_1+r'_1)!}{(m+r_1)! (m+r'_1)!} \times \frac{(m+r_2+r'_2)!}{(m+r_2)! (m+r'_2)!} \\ &\times [\lambda_1(\lambda_2+1) - \lambda_2(\lambda_2+1)] \quad (25) \end{aligned}$$

در رابطه بالا محور  $Z$  در جهت  $\mathbf{q}$  گرفته شده و مقادیر  $\alpha$ ،  $\alpha'$ ،  $\lambda_1$ ،  $\lambda_2$  با روابط زیر داده شده‌اند.

$$\alpha = Z/n \quad , \quad \alpha' = Z/n' \quad (26)$$

$$\lambda_1 = m + l + r_1 + r'_1 \quad , \quad \lambda_2 = m + l + v_2 + v'_2 \quad (27)$$

همچنین

$$n'_2 = n' - l - m - n'_1 \quad \text{و} \quad n_2 = n - l - m - n_1$$

میباشد.

برای تعیین ارزش  $\langle \mathbf{R} | z | nm n_1 \rangle$  محور  $Z$  بایستی در جهت  $\mathbf{q}$  باشد. ولی باسانی

میتوان نشان داد که اگر انتگرال مجذور قدر مطلق ماتریس بالا نسبت به  $\hat{\mathbf{R}}$  بعمل آید عدد حاصل نسبت با انتخاب محور  $Z$  نامتغیر است. از اینرو میتوان محور  $Z$  را در جهت  $\mathbf{R}$  انتخاب نمود. در

این صورت ماتریس بالا به  $\langle \mathbf{R} | \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{r} | nm n_1 \rangle$  تبدیل میگردد. بدیهی است که  $\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{r}$  نسبت بهر محور نامشخص فقط دارای مؤلفه‌های  $\mu = 0$  و  $\mu = 1$  میباشد. جائیکه  $\mu$  اعداد کوانتوم مغناطیسی است. از اینجهت که  $\mathbf{R}$  در جهت محور  $Z$  گرفته شده است. ماتریس بالا تنها برای ارزشهای  $m = 0$  و  $m = 1$  غیر صفر است. مجذور این ماتریس وقتی انتگرال آن نسبت به  $\hat{\mathbf{R}}$  بعمل آمده باشد بقرار زیر است:

$$\int d\hat{\mathbf{R}} | \langle \mathbf{R} | z | nm n_1 \rangle |^2 = \begin{cases} \frac{4\pi}{3} |sG|^2 & , \quad m=0 \\ \frac{16\pi}{3} |sF|^2 & , \quad m=1 \end{cases} \quad (28)$$

$$0 \quad m \neq 0 \text{ و } 1$$

چنانکه  $s$  و  $G$  و  $F$  با روابط زیر داده شده‌اند:

$$\delta = \frac{-i^m (2\alpha)^{m+2}}{2m! \sqrt{\pi Z}} \left[ \frac{(n_1 + m)! (n_2 + m)!}{n_1! n_2!} \right]^{1/2} \left( \frac{\beta}{1 - e^{-2\pi\beta}} \right)^{1/2}$$

$$\times \sum_{r_1=0}^{n_1} \binom{n_1}{r_1} (-2\alpha)^{r_1} \sum_{r_2=0}^{n_2} \binom{n_2}{r_2} (-2\alpha)^{r_2}$$

$$\times \sum_{\mu_2=0}^{m+r_2} \binom{m+r_2}{\mu_2} \times \frac{(-2)^{\mu_2}}{\mu_2! Z} \prod_{\lambda_2=0}^{\mu_2} (Z-iR\lambda_2) \quad , \quad \beta=Z/R \quad (29)$$

$$F = -\frac{f}{|a|} \left[ (1+\mu_2)e^{i\varphi} + (3+v_1+v_2)e^{-i\varphi} - \frac{2Z}{|a|} \right] \quad (30)$$

$$G = \frac{f}{|a|^2} \left\{ (1+\mu_2)(2+\mu_2)e^{2i\varphi} - (1+r_1-r_2)(2+r_1+r_2)e^{-2i\varphi} \right. \\ \left. + 2v_2(1+\mu_2) + \frac{4Z}{|a|^2} [Z - \alpha(2+\mu_2+v_2) - iR(1+\mu_2-v_2)] \right\} \quad (31)$$

در روابط (۲۸)  $s$  عامل جمعی است که بر  $F$  و  $G$  اثر میکند و  $a$  و  $\varphi$  و  $f$  با روابط زیر داده میشوند.

$$a = \alpha + iR \quad , \quad \varphi = \tan^{-1} R/\alpha \quad , \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} \quad (32)$$

$$f = |a|^{-2} e^{-2\beta\varphi} a^{-(2m+v_1+v_2)} a^{*\mu_2} \quad (33)$$

همچنین ماتریسهای قطری (۲۴) با رابطه زیر داده میشوند.

$$\langle n m n_1 | e^{iq \cdot r} | n m n_1 \rangle = d \sum_{v_1=0}^{n_1} \sum_{v'_1=0}^{n'_1} \sum_{v_2=0}^{n_2} \sum_{v'_2=0}^{n'_2} (-2a)^{v_1+v'_2+v_2+v'_2} \\ \times \binom{n_1}{v_1} \binom{n'_1}{v'_1} \binom{n_2}{v_2} \binom{n'_2}{v'_2} \times \frac{(m+v_1+v'_1)!}{(m+v_1)! (m+v'_1)!} \times \frac{(m+r_2+r'_2)!}{(m+v_2)! (m+v'_2)!} \\ \times \frac{[(2m+2+v_1+v'_1+v_2+v'_2)(2a) - i(v_2-v_1+v'_2-v'_1)q]}{(2a-iq)^{m+2+v_1+v'_1} (2a+iq)^{m+2+v_2+v'_2}} \quad (34)$$

$$C = \frac{(2a)^{2(m+2)}}{4Z} \left[ \frac{(n_1+m)!}{n_1!} \times \frac{(n_2+m)!}{n_2!} \right] \quad (35)$$

وقتی ماتریس بالا در (۲۴) قرار داده شده و نسبت به  $q$  انتگرال بعمل آید و همچنین از رابطه (۱۶) برای  $q_{\min}$  و  $q_{\max}^m$  که اعتبار آن در انرژیهای بالا است استفاده گردد و  $Q_2$  که بدین طریق بدست

میآید با  $Q_1$  که با (۲۳) داده شده جمع گردد نتیجه زیر حاصل میگردد :

$$Q(nmn_1) = (Mz/\mu Z)^2 E^{-1} [A(nmn_1) \ln E + B(nmn_1)] \quad (۳۶)$$

جائیکه  $E$  انرژی ذره باردار بر حسب ریذبرگ و پارامترهای  $A(nmn_1)$  و  $B(nmn_1)$  اعداد ثابتی هستند که میتوان بصورت زیر نوشت :

$$A(nmn_1) = 8 \left( \frac{M}{\mu} z \right)^2 T [\tau + (\sigma^2)] \quad (۳۷)$$

$$T = \frac{M^2}{32Z^2} \sum_{\gamma} \sum_{\gamma'' \leq \gamma} H(\gamma) H(\gamma'') (2 - \delta_{\gamma\gamma''}) \sum_{\rho=0}^2 D(\gamma\gamma'', \rho)$$

$$H(\gamma) = (-1)^{v_1 + v'_1 + v_2 + v'_2} \binom{n_1}{v_1} \binom{n_1}{v'_1} \binom{n_2}{v_2} \binom{n_2}{v'_2} \quad (۳۸)$$

$$\times \frac{(m + v_1 + v'_1)!}{(m + v_1)! (m + v'_1)!} \times \frac{(m + v_2 + v'_2)!}{(m + v_2)! (m + v'_2)!} \quad (۳۹)$$

در رابطه بالا  $\gamma$  معرف چهار اندیس  $v_1 v_2 v'_1 v'_2$  میباشد و حدود  $v_1$  و  $v_2$  از صفر تا  $n_1$  حدود  $v'_1$  و  $v'_2$  از صفر تا  $n_2$  میباشد. همچنین  $\gamma''$  معرف چهار اندیس دیگر  $v_1 v_2 v'_1 v'_2$  است که حدودشان در بالا تعریف گشته است. بالاخره سه ارزش  $D(\gamma\gamma'', \rho)$  بقرار زیرند :

$$D(\gamma\gamma'', 0) = 4\lambda''_1 \lambda_2 \quad \text{و} \quad D(\gamma\gamma'', 1) = 2[\lambda''_1 (\lambda_1 - \lambda_2) - \lambda_2 (\lambda''_1 - \lambda''_2)]$$

$$D(\gamma\gamma'', 2) = -(\lambda_1 - \lambda_2) (\lambda''_1 - \lambda''_2) \quad (۴۰)$$

در رابطه (۳۷)  $\tau$  و  $\sigma_0$  بقرار زیر تعریف میشوند.

$$\tau = \lambda_1 + \lambda''_2 + 2 \quad \text{و} \quad \sigma_0 = \mu + (\lambda_1 - \lambda_2) - (\lambda''_1 - \lambda''_2) \quad (۴۱)$$

$\lambda_1$  و  $\lambda_2$  در روابط بالا قبلاً تعریف گشته اند.

روابط بالا برای  $D(\gamma\gamma'', \sigma)$  و  $\tau$  و  $\sigma_0$  در صورتی اعتبار دارند که  $\lambda_1 - \lambda_2 \leq \lambda''_1 - \lambda''_2$

باشد. اگر  $\lambda_1 - \lambda_2 > \lambda''_1 - \lambda''_2$  باشد بایستی تعویض  $\lambda_1 \rightleftharpoons \lambda_2$  و  $\lambda''_1 \rightleftharpoons \lambda''_2$  صورت گیرد.

همچنین بایستی توجه نمود که در (۳۷)  $T$  یک عامل جمع است و  $\sigma$  و  $\tau$  است بر  $T$  اثر میکنند.

بالاخره پارامتر  $B(nmn_1)$  با رابطه زیر داده میشود.

$$B(nmn_1) = 8 \left( \frac{M}{\mu} z \right)^2 \left\{ \sum_{n'_1 \neq n} \left[ \ln \frac{4\alpha\mu}{M(\alpha^2 - \alpha'^2)} \right] \sum_{n'_1} | \langle n'_1 m n'_1 | z | n m n_1 \rangle |^2 \right. \\ \left. + \int_0^\infty R^2 dR \ln \frac{4\alpha\mu}{M(\alpha^2 + R^2)} \int d\hat{R} | \langle \mathbf{R} | z | n m n_1 \rangle |^2 \right. \\ \left. - T \left[ s(2, \tau, -1) - \binom{\sigma_0}{2} s(1, \tau-1, 0) - \sum_{\sigma=2}^{\sigma_0/2} \binom{\sigma_0}{2\sigma} s(0, \sigma-2-\tau+1) \right] \right\} \quad (42)$$

در (۴۲) همه علائم تعریف گشته باستانی  $s(l, i, j)$  که با رابطه زیر داده میشود.

$$s(l, i, j) = \sum_{i'=1}^i \binom{i}{i'} \frac{(-1)^{i'}}{i'+j} \quad (43)$$

باسانی میتوان در  $A(nmn_1)$  و  $B(nmn_1)$  جمع نسبت به  $m$  و  $n_1$  بعمل آورد، در اینصورت مقطع کل تصادم برای تراز انرژی  $n$  با رابطه زیر داده میشود.

$$Q(n) = (Mz/\mu Z)^2 E^{-1} [A(n) \ln E + B(n)] \quad (44)$$

جائی که:

$$A(n) = \frac{1}{n^2} \sum_{m=0}^{n-1} (2 - \delta_{m,0}) \sum_{n_1=0}^{n-1-m} A(nmn_1) \quad (45)$$

$$B(n) = \frac{1}{n^2} \sum_{m=0}^{n-1} (2 - \delta_{m-0}) \sum_{n_1=0}^{n-1-m} B(nmn_1) \quad (46)$$

میشوند.

## نتایج حاصله

نتایج محاسبات در دو جدول ۱ و ۲ خلاصه میشوند. در جدول ۱ مقادیر  $A(nmn_1)$  و  $B(nmn_1)$  برای تمام ارزشهای  $n$  و  $m$  و  $n_1$  که متعلق به ۳ و ۲ و ۱  $n$  میشوند محاسبه شده‌اند. میتوان  $A(nmn_1)$  و  $B(nmn_1)$  را بطور غیر مستقیم بدست آورد بدین ترتیب که ضرایب  $A$  و  $B$  را برای تحریک و یونیزه شدن از تراز  $nmn_1$  به تراز دیگری بطور جداگانه حساب نمود، وقتی این ضرایب برای همه ترازهای تحریک و یونیزه شدن با یکدیگر جمع کردند، حاصل جمع بایستی معادل  $A(nmn_1)$  و  $B(nmn_1)$  گردد. این محاسبات قبلاً بوسیله مؤلف انجام گردیده است (۲) و نتایج در جدول ۲ داده شده است و با  $\Sigma$  مشخص گردیده‌اند. همچنین این حاصل جمع بوسیله طریقه‌ای که در این مقاله داده شده محاسبه شده و با  $s$  نشان داده شده‌اند. بطوریکه دیده میشود اختلاف  $\Sigma$  و  $s$  بیش از چند درصد نیست. قسمتی از این اختلاف مربوط بانتهال ترازهای انرژی میشود که در  $\Sigma$  گنجانیده نشده‌اند و قسمت دیگر مربوط بکمبود دقت در محاسبات است.

جدول ۱- ارزشهای  $A$  و  $B$  برای ترازهای انرژی  $nmn_1$  و  $\bar{n}$  جائیکه  $\bar{n}$  میانگین ارزشهای  $A$  و  $B$  برای تراز  $n$  میباشد.

جدول ۱

$nmn_1$	A	B	$nmn_1$	A	B	$nmn_1$	A	B
۱۰۰	۴۰۰	۷۰۱۸	۳۱۰	۹۹۰	۴۲۰۳۸	۴۱۰	۲۸۸	۱۳۵۱
۲۰۰	۲۸۰۰	۱۰۶۰۳	۳۱۱	۹۹۰	۳۹۹۰۳	۴۱۱	۲۸۸	۱۳۴۲
۲۰۱	۲۸۰۰	۸۲۰۳	۳۲۰	۷۲۰	۳۲۹۰۸	۴۱۲	۲۸۸	۱۲۸۵
۲۱۰	۲۴۰۰	۸۴۰۶	۳	۹۶۰	۴۰۲۰۳	۴۲۰	۲۴۰	۱۱۶۰
$\bar{2}$	۲۶۰۰	۸۹۰۴	۴۰۰	۳۰۴۰	۱۴۹۹	۴۲۱	۲۴۰	۱۱۶۰
۳۰۰	۱۰۸۰	۴۹۰۰	۴۰۱	۳۰۴۰	۱۴۱۴	۴۳۰	۱۶۰	۸۷۰۳
۳۰۱	۱۰۸۰	۴۴۲۵	۴۰۲	۳۰۴۰	۱۳۷۳	۴	۲۶۴	۱۲۴۴
۳۰۲	۱۰۸۰	۳۹۶۵	۴۰۳	۳۰۴۰	۱۲۸۳			

جدول ۲- مقایسه مقاطع تصادم کل ترازهای انرژی مربوط با اعداد کوانتوم  $n=1$  و  $2$  و  $3$  جائیکه اتمی که در هریک از این ترازهای انرژی قرار گرفته باشد میتواند بهر تراز انرژی دیگر تحریک شده و یا یونیزه شود.  $n'$  نمره کوانتوم اتم پس از تحریک و  $R$  مربوط به یونیزه شدن اتم میباشد. تعاریف  $A$  و  $B$  در متن داده شده است.  $\Sigma$  حاصل جمع اعداد مربوط بارزشهای مختلف  $n'$  و  $R$  میباشد.

$s$  معادل  $\Sigma$  بوده ولی با طریقه‌ای که در این مقاله ذکر گردیده است محاسبه گردیده است.

جدول ۲

n n'	۱		۲		۳	
	A	B	A	B	A	
۱			۰٫۰۵۵	۰٫۰۳۸	۰٫۰۰۴	۰٫۰۰۴
۲	۲٫۲۲۲	۱٫۰۵۳			۸٫۲۲۰	۲۰٫۱۱۸
۳	۰٫۰۳۵۶	۰٫۰۳۹۷	۱۸٫۴۵۰	۴۵٫۰۴		
۴	۰٫۰۱۲۴	۰٫۰۱۵۷	۲٫۰۵۵	۸٫۲۸	۶۹٫۳۰	۲۳٫۷۷۷
۵	۰٫۰۰۵۸	۰٫۰۰۷۸	۰٫۸۵۰	۳٫۴	۸٫۴۷	۴۱٫۱۶
۶	۰٫۰۰۳۲	۰٫۰۰۴۴	۰٫۴۰	۱٫۷	۲٫۶۸	۱۵٫۳۸
۷	۰٫۰۰۱۹۷	۰٫۰۰۲۸	۰٫۲۲	۰٫۹۹	۱٫۲۲	۷٫۶۹
۸	۰٫۰۰۱۲۹	۰٫۰۰۱۸	۰٫۱۴	۰٫۶۳	۰٫۶۷۲	۴٫۴۹
۹			۰٫۰۹۱	۰٫۴۳	۰٫۴۱۵	۲٫۸۸
۱۰			۰٫۰۶۴	۰٫۳۰	۰٫۲۷۶	۱٫۹۷
۱۱			۰٫۰۴۷	۰٫۲۲	۰٫۱۹۴	۱٫۴۲
۱۲			۰٫۰۳۵	۰٫۱۷	۰٫۱۴۳	۱٫۰۵
R	۱٫۱۳۴	۰٫۰۲۶	۲٫۴۳	۲۵٫۰	۱٫۰۴	۵۴٫۵
$\Sigma$	۳٫۹۶	۷٫۰۲۸	۲۵٫۸۲۷	۸۷٫۴۲	۹۲٫۶۱۰	۳۸۸٫۴۶
s	۴٫۰۰	۷٫۱۸	۲۶٫۰۰	۸۸٫۳۱	۹۶٫۰۰	۴۰۲٫۳

تشکر - تمام محاسبات بوسیله کامپیوتر آی ، بی ، ام ۳۶۰ مدل ۴۰ شرکت ملی نفت انجام گرفته و پروگرام نمودن در روی کامپیوتر بوسیله ابوالحسن خطیب دانشجوی دانشکده فنی دانشگاه تهران انجام یافته است . زبان پروگرام فورتران ۴ بوده است و مقدار زیادی از عملیات محاسباتی برای مثال محاسبات بوسیله اعداد موهومی برای اولین بار در روی کامپیوتر ذکر شده انجام گرفته است .

در خاتمه از اولیای شرکت ملی نفت که تسهیلات محاسباتی را برای انجام محاسبات در این مقاله در اختیار مؤلف گذارده اند تشکر و قدردانی میشود .

#### منابع (Reference)

- 1— H. A. Bethe , Ann. Phys. (Leipzig) 5 , 325 (1930) .
- 2- K. Omidvar , Phys. Rev. **188** , 140 (1969)