الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي

كلية العلوم الدقيقة

القسم:الفيزياء

رقم الترتيب:
رقم التسلسل:

مذكرة تخرج مقدمة لنيل شهادة

ماستر أكاديمي

مجال:علوم المادة

تخصص:فيزياء تطبيقية إشعاع وطاقة

من إعداد: ليفة آمال

الموضوع

الدراسة النظرية لمبدأ التغيري لـSchwinger المعتمد عليه في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة للذرات

نوقشت يوم: 09 / 06 / 2018

أمام لجنة المناقشة المكونة من الأساتذة:

محلو السعيد	أستاذ محاضر- ب-	جامعة الوادي	رئيسا.
ديلمي سامية	أستاذة محاضرة - أ-	جامعة الوادي	مناقشا.
عسكري سهيلة	أستاذة مساعدة قسم - أ-	جامعة الوادي	مؤطرا.

الموسم الجامعي: 2017 / 2018

الإهداء

اهدي ثمرتي جهدي إلى :

الوالدين العزيزين أطال الله عمرهما وأشكرهما على الدعم والتشجيع .

أخوتي وأخواتي .

كل عائلتي .

الأحبة والأصدقاء .

إلى كل طالب علم يتهجد على طريق المضنى .

شكر وعرفان

أتقدم أولا وأخر الشكر لله عز وجل الذي وفقني في إنجاز هذا العمل والصلاة والسلام على الحبيب محمد عليه أفضل الصلاة والسلام.

أتقدم بأسمى عبارات الشكر والتقدير إلى الأستاذة الفاضلة **عسكري سهيلة** على مجهوداتها وتوجيهاتها خلال إشرافها على إعداد هذه المذكرة.

كما أشكر أعضاء اللجنة المناقشة على قبولهما لمناقشة هذا العمل بداية برئيس اللجنة الأستاذ **محلو السعيد**

وكذلك المناقشة الأستاذة **ديلمي سامية**

كما وجب علينا تقديم الشكر والتقدير **أساتذتي الكرام**.

فهرس المحتويات

فهرس الأشكال..... I

فهرس الجداول..... II

قائمة الترميزات..... III

مقدمة عامة..... 12

الفصل الأول : الآليات الذرية الأساسية

1- مقدمة..... 17

2- التصادم..... 17

2-1- التصادم المرن..... 17

2-2- التصادم غير المرن..... 18

3- التأين..... 18

3-1- أنواع التأين..... 18

3-1-1- التأين بواسطة الفوتونات..... 18

3-1-2- التأين بالتصادم الإلكتروني..... 19

3-1-2-1- التأين المباشر..... 19

3-1-2-2 التأين غير المباشر..... 20

4- الإثارة..... 20

4-1- الإثارة بواسطة فوتونات..... 20

4-2- الإثارة بالتصادم الإلكتروني..... 20

4-3- الإثارة بواسطة الذرات أو الأيونات..... 21

5- إعادة التركيب..... 21

5-1- إعادة التركيب الإشعاعي..... 21

5-2- إعادة تركيب ثنائي الإلكترون..... 22

5-3- إعادة تركيب ثلاث أجسام..... 23

6 - الطرق النظرية الرئيسية للتقريبات 23

6-1- تقريب Born 24

6-2- تقريب VPS (Vainshtein, Presnyakov et Sobelman) 25

6-3- تقريب المسارات المقترنة (اقتران - قريب) 25

6-4- تقريب Glauber 27

6-5- تقريب تغيري 27

7- خلاصة 28

قائمة المراجع 29

الفصل الثاني : التقريب التغيري لـ Schwinger في نظرية التصادم

1- مقدمة 32

2- التقريب التغيري لـ Schwinger.في نظرية التصادم 32

2-1- سعة التغيري التقريبية الشكلية لـ Schwinger 36

3- خلاصة 38

قائمة المراجع 39

الفصل الثالث : سعة الانتقال التغيري لـ Schwinger للإثارة المباشرة

1- مقدمة 41

2 - الأنظمة الهيدروجينية 41

3- سعة الانتقال التغيري لـ Schwinger للإثارة المباشرة 42

4- سعة الانتقال eiaconale و المقطع الفعال الكلي للإثارة 49

4 -1- سعة الانتقال eiaconale 49

4-2- المقاطع الفعالة eiaconale للإثارة 51

5- خلاصة 52

قائمة المراجع 53

الفصل الرابع : تطبيق مبدأ التغيري لـ Schwinger في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة

1- مقدمة..... 56
2- تطبيق مبدأ التغيري لـ Schwinger في حساب المقاطع فعالة للإثارة المباشرة..... 56
2-1 الإثارة شبيه بالهيدروجين Be^{3+} بواسطة تأثير بروتون عند الطاقات المتوسطة..... 56
2-1-1 الحساب النظري والعددي..... 56
2-1-2 النتائج..... 57
2-1-3 المناقشة..... 63
2-2 الإثارة الذرة الهيدروجين H بواسطة تأثير بروتون عند طاقات متوسطة..... 64
2-2-1 النتائج..... 64
2-2-2 المناقشة..... 69
3- خلاصة..... 70
قائمة المراجع..... 71
خلاصة عامة..... 73
الملحق..... 75
قائمة المراجع..... 78

فهرس الأشكال

الفصل الأول

الشكل (I-1): تصادم مرن أحادي البعد..... 17

الشكل (I-2):تصادم مرن ثنائي البعد..... 18

الشكل (I-3):عملية تأين بالتصادم الإلكتروني..... 19

الشكل (I-4):عملية الإثارة بالتصادم الإلكتروني والعملية العكسية لها..... 21

الشكل (I-5):عمليتي إعادة التشكيل الإشعاعي والتأين الضوئي..... 22

الشكل (I-6): عملية إعادة تشكيل ثنائي إلكترون..... 23

الفصل الثالث

الشكل (III-1):النظام التصادم في تقريب eiconale..... 43

الفصل الرابع

الشكل (IV-1): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة (1S،2S) (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{+3} بواسطة تأثير بروتونات..... 58

الشكل (IV-2): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة (2S،2P)(في $10^{-19}cm^2$) لأيونBe^{+3} بواسطة تأثير بروتونات..... 60

الشكل (IV-3): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوى n = 2 (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{3+} بواسطة تأثير بروتونات..... 62

الشكل (IV-4): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة 2S (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات..... 65

الشكل (IV-5): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة 2P (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات..... 67

الشكل (IV-6): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوى n=2 (في$10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات..... 69

فهرس الجداول

الجدول (IV-1): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة (1S،2S) (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{+3} بواسطة تأثير البروتونات..... 57
الجدول (IV-2): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة (1S،2P) (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{+3} بواسطة تأثير بروتونات..... 59
الجدول (IV-3): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوى n = 2 (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{3+} بواسطة تأثير بروتونات..... 61
الجدول (IV-4) : المقاطع الفعالة للإثارة في حالة 2S (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات..... 64
الجدول (IV-5): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة 2P (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات..... 66
الجدول (IV-6): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوى n=2 (في$10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات..... 68

قائمة الترميزات

الرموز باللاتينية:

Z: العدد الذري.
$h\nu$: طاقة فوتون.
N: عدد الإلكترونات.
X_Z : طاقة التأين.
h: ثابت بلانك.
a_0: نصف قطر بور.
m_e: كتلة الالكترون.
M_P: كتلة القذيفة.
M_T: كتلة الهدف.
Z_T: شحنة القذيفة.
Z_P: شحنة الهدف.
P: احتمال الانتقال.
$\Psi_{el}(r،\theta،\varphi)$: دالة موجة للإلكترون.
T: طاقة حركية جسيمات.
V: طاقة تفاعل جسيمات.
t: زمن التصادم.
E: طاقة كلية للنظام.
H: هاملتون كلي للنظام.
G^+: مؤثر Green.
$T_{\beta\alpha}$: سعة الانتقال.
D_{ij}: عنصر مؤثر مصفوفة D.
$\tilde{b}_j$ ، $\tilde{a}_i$: مركبات خاصة بشعاع الحالة.
$\vec{q}$: كمية حركة منقولة إلى الهدف.
$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$: سعة الانتقال التغيري.

الرموز باليونانية:

ν : تردد إشعاع.
$\upsilon(z)$: دالة الموجة
$d\Omega$: الزاوية الصلبة.
$|\Psi_\beta^-\rangle$: حالة الانتشار النهائية.
$|\Psi_\alpha^+\rangle$: حالة الانتشار الابتدائية.
μ : الكتلة المختزلة للنظام.
$\vec{v}$: سرعة التأثير.

$\vec{\rho}$: معامل التأثير.

$\sigma_{\beta\alpha}$: المقطع الفعال.

المؤشرات:

i: الحالة الاساسية.

j: الحالة المثارة.

c: تصادم.

el: إلكترون.

α: حالة الابتدائية.

β: حالة النهائية.

مقدمة عامة

مقدمة عامة

في العديد من مجالات الفيزياء، تبقى التصادمات الذرية هي العمليات الأساسية ذات أهمية خاصة في الفيزياء النووية والفيزياء الفلكية، تعتبر معرفة طبيعة وفعالية عمليات التصادم ذات أهمية كبيرة في فيزياء الفلكية وفيزياء الليزر وحتى في الكيمياء، على السبيل المثال تحدث الآليات الأولية للتفاعل (الإثارة، التأين، إعادة التركيب بأنواعه) في الفيزياء الفلكية أثناء تكوين الأجسام الكونية[1].

إن معرفة هذه الآليات تجعل من الممكن تحليل ظواهر المجرة، ففي مجال الاندماج الحراري النووي تتفاعل الأيونات المتعددة مع ذرة الهيدروجين و يتجلى ذلك في البلازما الإنصهارية والنووية الحرارية داخل النجوم، حيث تؤدي التصادمات إلى انتاج أيونات متحركة ينتج عنها انبعاث الأشعة السينية X[2].

بفضل طرق التحليل الطيفية الفعالة من الممكن الحصول على تقدير دقيق للكثافة، درجة الحرارة وكذلك تسليط الضوء على عمليات نقل الطاقة داخل هذه البلازما، وبالتالي فإن مفهوم المقطع الفعال الكلي هو دراسة واسعة من حيث تأثير التصادمات.

تعتبر ذرة الهيدروجين، أو بشكل عام نظام أيوني للإلكترون الواحد ذو أهمية أساسية للوصف النظري للهياكل الذرية، سيكون هناك حاجة لنظرية موثوقة لوصف تفاعل النوى مع الإلكترونات عبر قوة كولوم مع ذلك تبقى مشكلة دراسة عملية التصادم الذري بواسطة التأثير الأيوني لا يمكن حلها بالكامل حتى في أبسط الحالات، لهذا السبب ركز الباحثين على تطوير التقنيات و طرق التقريب حيث يمكن وصف عمليات التصادم المختلفة بشكل مناسب.

هناك حالتان يمكن استخدام التقريب فيها و اجراء تبسيط كبير، الأولى أين يمكن تطبيق الاضطراب بسبب زمن التفاعل القصير، والثانية هو حالة التصادمات البطيئة جدا. في مشكلة التصادم الأكثر أهمية هو تحديد دالة الموجة التي تصف النظام لأنها تحتوي على جميع المعلومات الضرورية لوصفه، ومع ذلك لحل هذه المشكلة يتم تطوير تقنيات مختلفة من أجل التوصل إلى حل شبه دقيق، هذا ما سنصفه باختصار لمعرفة التقريبات التي استخدمت على نطاق واسع في العقود الأخيرة.

في البداية يجدر الإشارة إلى أن تقريب بورن هو في الأساس تطور مضطرب لدالة الموجة أو سعة الانتشار في طاقة التفاعل، بشكل عام يعطي تقريب بورن نتيجة جيدة للطاقات الواردة العالية، وبالتالي يجب أن تكون سرعة التصادم أكبر من السرعات الإلكترونية المدارية.

من أجل التغلب على بعض نقاط الضعف في تقريب بورن، قام Glouber بتطويره في أواخر الخمسينات باسم "طريقة معامل التأثير"[3]، فإن تقريب Glouber هو أحد صيغ التقريب eiconale الذي يسمح بإدخال تأثيرات الكمون التفاعل في دالة الموجة التي تصف الحالة النهائية للنظام.

في أوائل الستينات تم تطوير طريقة جديدة تسمى VPS(Sobelman, Vainshtein, Pressnyakov) تتكون هذه الطريقة من تصحيح جزئي لدالة الموجة عن طريق إدراج التشوه الناشئ عن التفاعل بين الجسيم الوارد والإلكترونات المرتبطة[4]، تم اقتراح نسخة مختلفة جزئيا من المقاربة الأصلية في سنة 1965 من قبل Carroll, Mc. Crothers[5]، طبقه Mc. Carroll, Salin[6] في سنة 1966 على تصادم بروتون ذرة الهيدروجين.

بديل آخر لتقريب بورن هو تقريب المعادلات المقترنة، حيث يتم تطوير دالة الموجة للانتشار على اساس دوال الموجة التي تمثل المسارات المختلفة للتفاعلات، هذا يؤدي إلى نظام من المعادلات التفاضلية إلى جانب معاملات التطور.

بإضافة إلى هذه التطبيقات لحساب إجمالي للمقاطع الفعالة هو الاهتمام الرئيسي بالدراسات على عمليات التصادم، في الواقع قام العديد من الباحثين بفحص مشكلة الانتشار المتعددة، حيث أن في سنة 1976 قام الباحث Park و مجموعته بنشر النتائج التجريبية فيما يتعلق بقياسات المقاطع الفعالة الكلية للانتشار[5].

لقد وضعت عدة مقاربات لإعطاء نماذج مناسبة لدراسة عملية التصادم، نذكر منها نموذج Cheshire وSullivon الذي تم انشاؤه في سنة 1967، النموذج الذي اقترحه Bransden و Coleman في سنة 1972 بالاستناد إلى المسارات المتقاربة الذي استخدمه Reading ومجموعته سنة 1976، ثم تناوله Fichard و مجموعته 1977[7].

كشفت غالبية هذه الطرق التقريب عن أوجه قصورها عند النظر في تأثيرات الاقتران، إما لأن الحسابات أصبحت صعبة للغاية من خلال جمع الحالات المستمرة أو لأن هذه الأساليب غير دقيقة، لهذا السبب كنا مهتمين في هذه الدراسة إلى مقاربة جديدة نسبيا تستند إلى نظرية التغيري، وتسمى "مبدأ التغيري لـSchwinger" الذي يتكون من تطوير دالة الموجة لنظام تصادمي قائم على حالات الاختبار، على هذا الأساس أردنا الإجابة عن السؤال مدى دقة هذه الأداة في دراسة عملية التصادم لإثارة الأيونات والذرات بواسطة تأثير بروتون عند سرعات متوسطة في حساب المقاطع الفعالة الكلية للإثارة ؟

هدفنا الرئيسي في هذه المذكرة هو الدراسة النظرية لمبدأ التغيري لـ Schwinger في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة لبعض الذرات ومعرفة مدى دقة هذا التقريب التغيري، بتقييم المقاطع الفعالة المحسوبة بالمقارنة مع تلك المحسوبة في الدراسات النظرية وكذلك بالنسبة للتجريبية.

لأول مرة في سنة 1979 تم تقديم تطبيق مبدأ التغيري لـ Schwinger على نظام التصادم (الإلكترون - ذرة الهيدروجين) من قبل Lucchese و Mc Koy، والذي كان يهدف إلى إظهار أن هذا الأخير يوفر حلولا جيدة لمشاكل الانتشار دون الحاجة إلى التطورات على اسس مهمة، وفي وقت لاحق طور Luchese watson وMc Koy هذه المقاربة في حالة تشتت الإلكترون المرن عن طريق الجزيئات، في الواقع كان هدفهما هو إظهار أن سعة الانتشار استنتجت من المبدأ التغيري لـ Schwinger تتقارب بشكل كبير مع الأساس الذي يتم تطوير دالة موجة الانتشار عليه[8].

في سنة 1984 Brendlé وتحت إشراف R. Gayet في مختبر التصادم الذري في جامعة Bordeax-I (France)، قام بتطوير هذه الطريقة بشكل أكبر لدراسة إثارة الأيونات والذرات عن طريق تأثير النواة عند السرعات المتوسطة وأظهرت وجود استقرارا ملحوظا في النتائج بالنسبة لمختلف الاسس المختارة [9].

في سنة 1998 قام B. Lasri تحت اشراف M. Bouamoud بإعادة النظر في هذه النظرية الشكلية من خلال اعتماد لغة البرمجة Fortran وذلك بحساب المقاطع الفعالة للإثارة، حيث استمر في تطوير مقاربة التغيري في تمثيل دالة الموجة للانتشار ذلك من خلال تطوير الأساس[10].

تم تطبيق هذا النموذج النظري الجديد بنجاح من خلال شكلية معامل التأثير لإثارة أيونات الهليوم (Fe^{24+} ، Xe^{54+} ، Kr^{34+} ، ...) مع النواة شحنتها تتراوح من1 إلى 54 بما في ذلك الغازات النادرة (He ، Ne ، Ar ، Kr ، Xe) بسرعات متوسطة [11 ،12 ، 13].

حيث سنتناول في هذه المذكرة اربعة فصول:

الفصل الأول: يتضمن الدراسة العامة حول مختلف الآليات الذرية الأساسية التي تحدث في البلازما و متمثلة في عمليات التصادم، والتعريف أهم آليات التفاعل الأولية الناتجة عن التصادم بين الجسيمات (الإثارة، التأين، إعادة تركيب بأنواعه)، والتعرف على الطرق النظرية الرئيسية للتقريبات التي استخدمت لدراسة عمليات التصادمات الذرية.

الفصل الثاني: يدرس المبدأ التغيري لـ Schwinger في نظرية التصادم مع تحديد السعة الانتقالية في حالة حدوث التصادم المباشر.

الفصل الثالث: يتم تكييف هذا المبدأ في دراسة الإثارة الذرية حيث يقوم بتطوير سعة الانتقال التغيري من أجل الوصول إلى المقاطع الفعالة الكلية للإثارة الأنظمة الهيدروجينية من خلال التأثير الأيوني بسرعات متوسطة، تم التعامل مع هذه المشكلة في تقريب معامل تأثير حيث من المفترض أن يصف المقذوف مسارا مستقيما بالنسبة إلى الهدف.

الفصل الرابع: والذي يتم فيه تطبيق هذا المبدأ التغيري لـ Schwinger في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة للأنظمة الهيدروجينية (H ، Be^{3+} ...) بواسطة تأثير بروتونات عند الطاقات المختلفة، حيث يناقش النتائج المتنوعة التي تم الحصول عليها.

قائمة المراجع

[1]A.D. Whiteford, N.R. Bandello, C.P. Balance, S.D. Loc, M.G. Mullane and H.P. Summers, "exitation of Ar^{15+} and Fe^{23+} for diagnostic application to fusion and astrophysical plasmas ", J. Phys. B35, P3729, 2002.

[2]W.A. Schroeder, T.R. Nelson, A.B. Borisov, J. W. Longworth, K. Boyer and C. K. Rhodes, " an efficient, selective collisional ejection mechanism for inner – shell population inversion laser – driven plasmas " J. Phys B34, 297, 2001.

[3]R.J. Glauber, lectures in theoretical physics,Vol.1, Phys, A 14, P608 614,1976.

[4]L. Vainshtein, L. Presnyakov and I. Sobelman," On the excitation of neutral atom by electron impact ", Proc .Phys .Soc, Vol.89, 1966.

[5]D. Crothers and R. Mc Carroll, Proc. Phys. Soc. 86 issue: 4, P 753 – 760,1965.

[6]Brendan M. Mc. Laughlin, Thomas G. Winter and James F. Cann," Ballmer -α emission in proton – hydrogen collision ", J. Phys, B: At . Mol. Opt .Phys, Vol.30, P 1043 – 1045,1997.

[7]J. F Redding, A.L . Ford and R. L. Becker," A New atomic orbital method for ion – atom collision ", J. Phys, B: At. Mol .Phys, V14, N12, 1981, P 1995 – 2012.

[8]Robert R. Lucchese and Vincent Mc. Koy," Application of the Schwinger Variational principle to electron Scattering " J. Phys. B: At. Mol. Phys, Vol.12, No.14, 1979.

[9]B. Brendlé, R. Gayet, J.P. Rozt and K. Wohrer, " Application of the Schwinger Principle to Direct Excitation of Atom or Ions by impact of Bare Nuclei it intermediate Velocities ", Phys. Rev, Vol.54, N.18, 2007.

[10]B. Lasri, Thése de Magistère, Institut de Physique, Université Aboubekr Belkaid de Tlemcen, 1998.

[11]B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, " à L'excitation directe du Fe^{24+} ($1S^2$) à 400MeV par impact de différent atomes: contribution des états du continuum" Phys. Chemi. News, Vol 20, P12-17, 2004.

[12]B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud, R. Gayet, " Nouvelle Modélisation du Phénomène de Canalisation de L'ion Xe^{52+} ($1S^2$) dans un Monocristal de Silicium " Physical and Chimical News, Vol. 28, P97 -102, 2006.

[13]B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen, "A New Variational Model for the excitation of Ar^{16+} ion impinging on neutral gaseous target sat intermediate impact energies ", Journal of electron Devices, Vol.5, P 127 – 131, 2007.

الفصل الأول

الآليات الذرية الأساسية

I-1- مقدمة

تاريخ العلم هو قصة الفضول البشري واحدة من الصفات التي لا يستطيع الغنى عنها لفهم العالم الذي نعيش فيه والمجالات المحيطة بنا. في العديد من مجالات الفيزياء يعتبر التفاعل بين الجسيمات(الذرات، الإلكترونات، الأيونات، الفوتونات) من أهم العمليات الذرية لكثير من المجالات كفيزياء البلازما، الفيزياء الفلكية وعلم الأحياء الإشعاعي، ينتج عن هذا التفاعل عدة آليات ذرية أساسية تصنف إلى عمليات إشعاعية وتصادمية، هذه الأليات تساعد في دراسة وتحليل الأطياف الذرية على سبيل المثال الآليات الأولية للتفاعل (التصادم، التأين، الإثارة، إعادة التركيب بأنواعه) تحدث خلال تشكل الأجسام الكونية، والإشعاع الكلي الناتج عن البلازما الفلكية ينتج من تراكب جميع العمليات الإشعاعية التي تعتمد على الأهمية النسبية للموجة ودرجات كثافة الجسيمات المشحونة الذي يشع البلازما. سنتعرف في هذا الفصل على مختلف العمليات الذرية الأساسية [1-4].

I-2 التصادم:

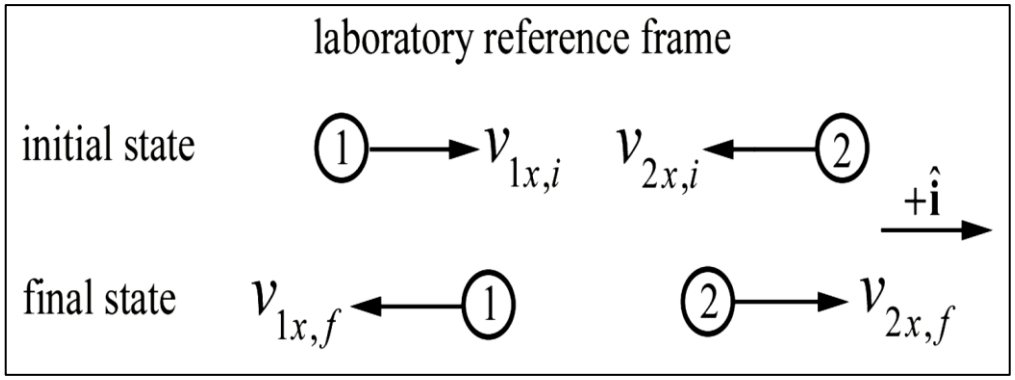
إن ظاهرة تصادم الأجسام من أهم الظواهر الفيزيائية، لأن من خلالها يحصل تبادل الطاقة والدفع الزاوي...، معظم التصادمات تنطوي على جسمين إذ أن أغلب التصادمات هي تصادمات ثنائية.

في الأساس ظواهر التصادم الذري يحدث بين الجسيمات الأولية (الفوتونات، الإلكترونات، ...) والنظام الذري (ذرة، أيون، جزيء) أو بين نظامين ذريين، ويوجد نوعين من التصادمات المرنة وغير المرنة [5-7].

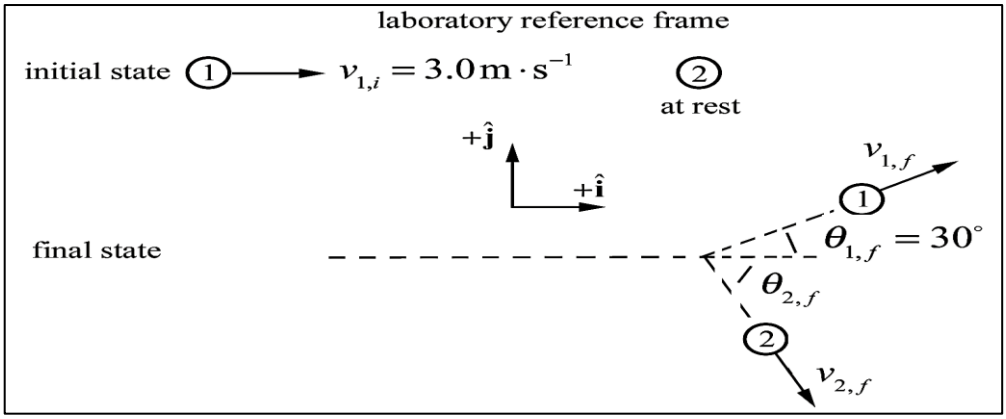
I-2-1 التصادم المرن:

يقال أن هناك تصادم مرن عندما يبقى عدد الجسيمات ثابت والطاقة الداخلية للجسيمات لم تتغير قبل وبعد الصدمة، بعبارة أخرى الجسيمات لا تشوه أو تغير طبيعتها.

التصادمات المرنة هي الآلية الرئيسية لتبادل حركة بين الجسيمات، وهي تحدد معاملات النقل مثل التنقل الكهربائي أو معاملات النشر، هناك نوعين من التصادمات المرنة أحادية البعد وثنائية البعد.



الشكل (I-1): تصادم مرن أحادي البعد.



الشكل (I- 2): تصادم مرن ثنائي البعد.

I-2-1 التصادم غير المرن:

يقال أن التصادم غير مرن عندما يكون جزءا من الطاقة الحركية الأولية للنظام تحولت إلى أشكال أخرى من الطاقة، ثم يصاحب التصادم تغير في الطاقة الداخلية وتغيير في عدد الجسيمات بعضها يمكن أن تنشأ عن تجزئة أو تكافؤ الطاقة الكلية، نتيجة هذا يتعرض الجسيم الهدف (ذرة أو جزيء) للإثارة أو تأين خلال تصادم غير مرن.

I-3- التأين:

التأين هو عبارة عن عملية تتحول فيها الذرة أو الجزيء إلى أيونات وذلك بإضافة أو ازالة جسيمات مشحونة مثل الإلكترونات أو أيونات أخرى، يوجد نوعين للتأين (المباشر وغير المباشر)، وهناك عدة أليات لحدوث التأين، نذكر منها التأين بالصدم الإلكتروني، إن احتمال حدوث عملية التأين يعتمد على طاقة الإلكترون في الذرة وطاقة التأين، إذا ورد إلى وسط جسيمات بطاقة كافية يمكن للإلكترونات المقيدة ضمن مدارتها تمتص قدرا محددا من الطاقة يسمح لبعضها بالتغلب على القوة الجاذبة التي تربطها بالنواة والانفلات من مداراتها والانفصال عن الذرة فنقول أن الذرة تأينت، ويمكن للإلكترون أن يترك الذرة، فإذا تركها إلكترون واحد حصلنا على أيون مشحون بشحنة إيجابية واحدة، وإذا تركها إلكترونين حصلنا على أيون مشحون بشحنة إيجابية مضاعفة وهكذا، لكن الطاقة اللازمة أو الكمون اللازم لهذه العملية يزداد لأنه كلما ازداد عدد الإلكترونات التي تفقدها الذرة ازدادت طاقة الإلكترونات المتبقية[5،8].

I-3-1- أنواع التأين:

I-3-1-1- التأين بواسطة الفوتونات:

التأين الضوئي أو التأين الإشعاعي هو عبارة عن امتصاص فوتون طاقته (hν) من طرف أيون، ويتم تحرير إلكترون بحيث أن طاقة الفوتون أكبر من طاقة التأين للأيون ويعبر عن ذلك بالعلاقة التالية[9]:

$$(Z ، N) + h\nu \rightarrow (Z ، N\text{-}1) + e^{-} \qquad (1\text{-}I)$$

I-3-1-2- التأين بالتصادم الإلكتروني:

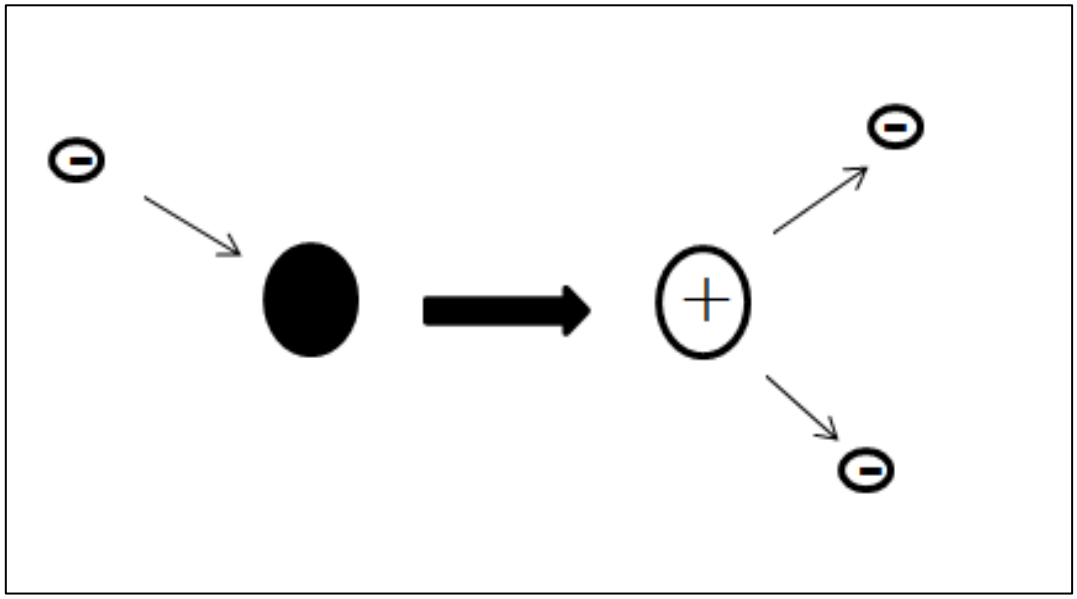
يعتبر التأين لذرة أو أيون أو جزيء عن طريق التأثير الإلكتروني من أهم عمليات التصادم الإلكتروني وتسمى العملية العكسية لها بإعادة التركيب ثلاثة أجسام، وتحدث هذه العملية المبينة في الشكل (I-3) نتيجة تفاعل بين الإلكترون والذرة لتعطي زوج أيون - الكترون حر، هذا التفاعل يضمن نقل الطاقة وكمية الحركة بين الإلكترونات، يجب أن تكون طاقة الإلكترون الوارد أعلى من طاقة التأين للذرة، ويمكن التعبير عن هذه الظاهرة بالمعادلة التالية [9-12]:

$$(Z ، N) + e^- \rightarrow (Z ،N-1) + e^- + e^- \qquad (2\text{-I})$$

في حالة تفاعل أيون والإلكترون الحر الذي ينتج عنه تحرير الإلكترون آخر من أيون الهدف.

$$X^{z+} + e^- \rightarrow X^{(z+1)} + e^- + e^- \qquad (3\text{-I})$$

ويوجد نوعين للتأين بالتصادم الإلكتروني، تأين مباشر وتأين غير مباشر.



الشكل (I-3): عملية التأين بالتصادم الإلكتروني [11].

I-3-1-2-1- التأين المباشر:

التأين عن طريق التأثير الإلكتروني المباشر هو عملية تحدث عندما الأيونات أو الذرات تشتت الإلكترون الوارد ويتم تحرير واحدة من الإلكترونات المرتبطة مباشرة عند التفاعل، وفي هذه الحالة يجب أن تكون طاقة الإلكترون الوارد أكبر من طاقة ربط الإلكترون المحرر من الأيون أو الذرة، إذا كانت الطاقة الحركية للإلكترون الوارد كبيرة بما فيه الكفاية لاقتلاع إلكترون من طبقة الداخلية هذا يؤدي إلى أيون أو الذرة في حالة مثارة [12،13].

I-3-1-2-2- التأين غير المباشر:

تحدث هذه العملية عندما تكون طاقة الإلكترون الوارد عالية، فيثار إلكترون ينتمي إلى الطبقة الفرعية الداخلية لأيون أو الذرة الهدف، وهذا يؤدي إلى أيون أو الذرة في الإثارة المضاعفة، والتي يمكن أن يتبعها تأين تلقائي، وهذا يتطلب أن تكون طاقة الإلكترون الوارد أكبر أو مساوية لطاقة التأين الأولى للأيونات أو الذرات. ولقد درست هذه العملية منذ منتصف سنة 1960 تلعب دورا حاسما في تحديد حالة التأين في البلازما الساخنة [14،15].

I-4- الإثارة:

عندما تكتسب الذرة كمية محددة من الطاقة التي يمتصها أحد الإلكترونات الداخلية في الذرة تكفيه للقفز إلى مدار خارجي ذي سوية طاقية أعلى، وبذلك تنتقل من حالتها المستقرة إلى حالة جديدة مثارة عندها نقول أن الذرة قد تعرضت لعملية تهييج أو إثارة، أما الإلكترون فتزداد طاقته الكامنة بعد هذا الانتقال[16].

يمكن أن تحدث إثارة للذرات بالطرق الأتية:

I-4-1- الإثارة بواسطة فوتونات:

تتم الإثارة بواسطة الفوتونات بتعريض المادة المراد إثارتها لإشعاع معروف التركيب يكون عادة مؤلفا من مجموعة معينة من إشعاعات وحيدة اللون، أو بعبارة أخرى إعطاء المجموعات الذرية دفعات محددة تماما من الطاقة مساوية لـ $h\nu$، وتتميز الإثارة الضوئية بإمكانية إيقافها في لحظة معينة، وهذا ما يسمح بدراسة الإصدار غير الحراري الحاصل بعد وقف الإثارة أي ما يسمى بالإضاءة بلا حرارة، وبالضبط دراسة مدة الحياة وقوانين التخامد، إن الإصدار الذي يملك إثارة لاحقة ذات مدة حياة صغيرة يسمى استشعاع أو ما يعرف بإضاءة الاشعاع، أما الذي تمتد إثارته اللاحقة لمدة طويلة فيسمى الوميض الفسفوري أو إصدار ضيائي وهو حالة انتقال مشع يكون فيه تواتر الضوء الممتص نفس تواتر الضوء الصادر[5، 11، 15].

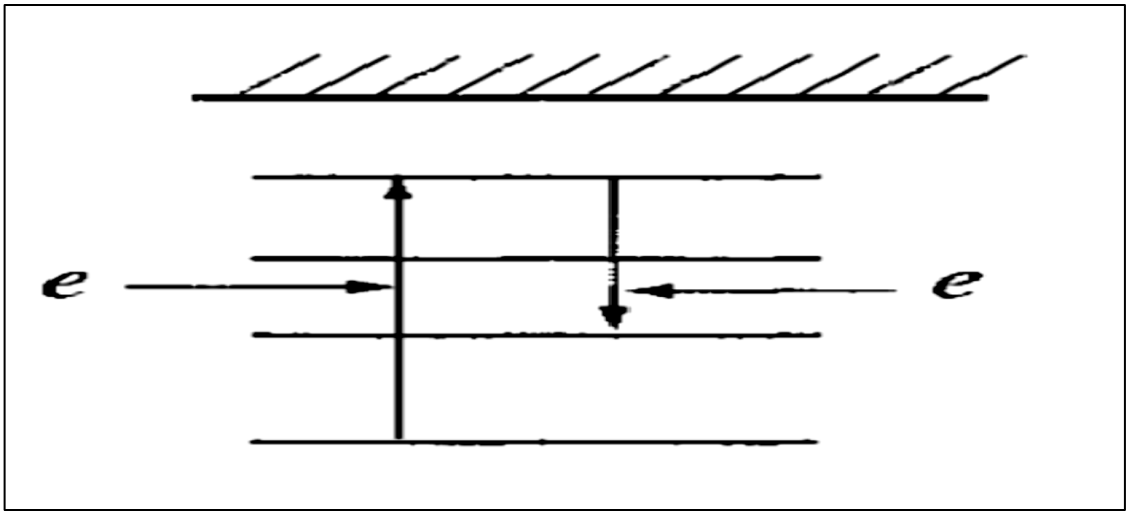
$$(Z \cdot N) + h\nu \rightarrow (Z \cdot N)^* \qquad (4\text{-I})$$

I-4-2- الإثارة بالتصادم الإلكتروني:

في حالة الإثارة يعطي الإلكترون الساقط جزءا من طاقته إلى ذرة أو أيون لتنتقل بذلك إلى حالة أعلى طاقة، العملية العكسية لها هي عودة من الإثارة من خلال التفاعل التالي [5، 9، 15، 17]:

$$(Z \cdot N) + e^- \leftrightarrow (Z \cdot N)^* + e^- \qquad (5\text{-I})$$

$$X^{z+}(i) + e^-(\epsilon_i) \rightarrow X^{z+} + e^-(j) + e^-(\epsilon_j) \qquad (6\text{-I})$$



الشكل (I-4): عملية الإثارة بالتصادم الإلكتروني والعملية العكسية لها [11].

I-4-3- الإثارة بواسطة الذرات أو الأيونات:

بفرض أن الذرة الهدف ذات كتلة هي في حالة سكون وأن ذرة أخرى واردة ذات كتلة وبطاقة حركية عندئذ يحصل التفاعل الآتي:

$$A + B \rightarrow A + B^* \qquad (7\text{-}I)$$

من الواضح أن هذه الطاقة الحركية أكبر من الطاقة اللازمة في حالة الفوتونات أو الإلكترونات وذلك لأنه في حالة الذرات الواردة لا تكتسب الذرة الهدف إلا جزءا من الطاقة الواردة.

I-5- إعادة التركيب:

إعادة تركيب (إلكترون - أيون) تحدث في معظم الأحيان في الحالات المثارة، وذلك من خلال إلغاء إثارة الأيون وإعادته إلى حالة أساسية أو حالات شبه مستقرة وذلك في سلسلة من التحولات الإشعاعية وهناك عدة آليات لإعادة التركيب نذكر منها[18]:

- إعادة التركيب الإشعاعي.
- إعادة تركيب ثنائي الإلكترون.
- إعادة تركيب ثلاث أجسام.

I-5-1- إعادة التركيب الإشعاعي:

التركيب الإشعاعي ينتمي إلى العمليات الإشعاعية الأساسية التي تميز تفاعل الإشعاع الكهرومغناطيسي مع الذرات أو الأيونات والانبعاثات الاشعاعية الناتجة عن تصادمات أيونات والإلكترونات، الذي كثيرا ما يستخدم في البحوث المتعلقة بالتفاعلات الإشعاعية والتصادمية الأساسية ولتشخيص البلازما كذلك[19].

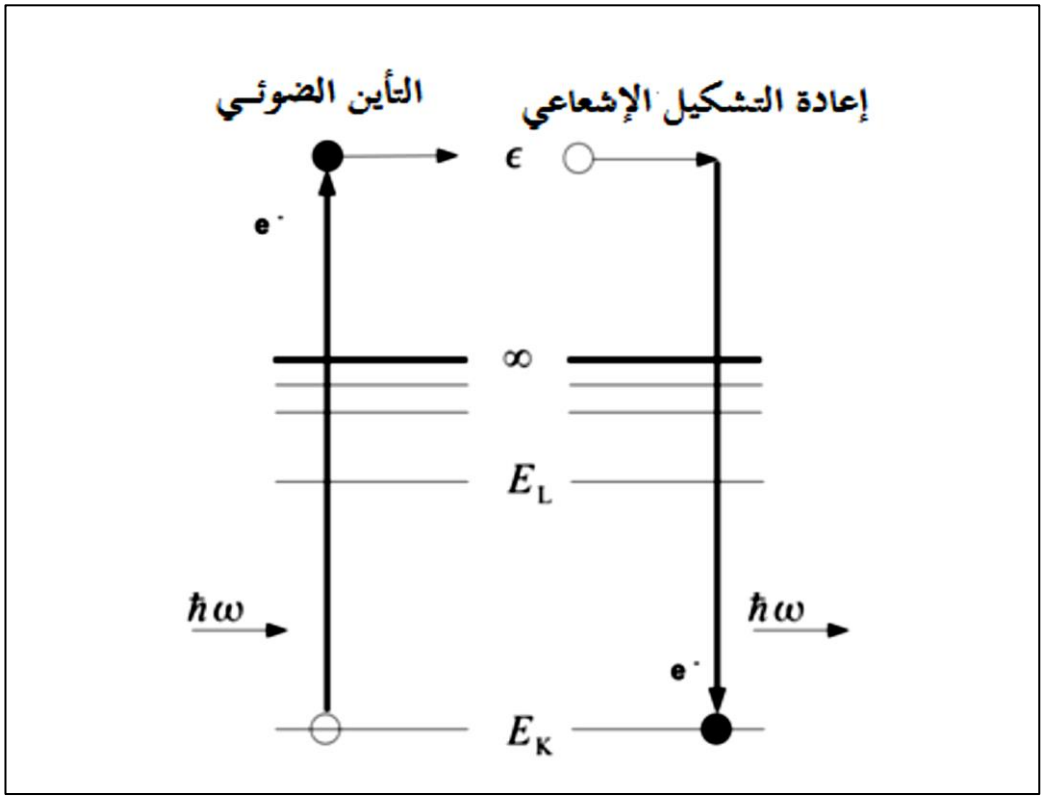
وتتمثل في التقاط إلكترون حر بواسطة أيون (Z ، N-1) ويتم إرسال فوتون طاقته hν ويعبر عن هذه العملية كالتالي:

$$(Z ، N-1) + e^- \rightarrow (Z ، N) + h\nu \qquad (8\text{-I})$$

وبالتالي إعادة التركيب الإشعاعي يتوافق مع العملية العكسية للتأين الضوئي، فإن طاقة الفوتون المنبعث وفقا لمبدأ الحفاظ على الطاقة يعطى بواسطة العلاقة التالية[12]:

$$h\,v = E - X_Z \qquad (9\text{-I})$$

حيث X_Z : يمثل طاقة التأين لأيون إعادة تركيب.



الشكل (I-5): عمليتي إعادة التشكيل الإشعاعي والتأين الضوئي [19].

I-5-2- إعادة تركيب ثنائي الإلكترون:

إن آلية إعادة تركيب ثنائي الإلكترون مهمة جدا في البلازما عالية درجة الحرارة، وله دور كبير في زيادة فعالية الإلكترونات والأيونات لإعادة تشكيل البلازما، وتحدث عملية إعادة التركيب ثنائي الإلكترون في مرحلتين هما[8،18]:

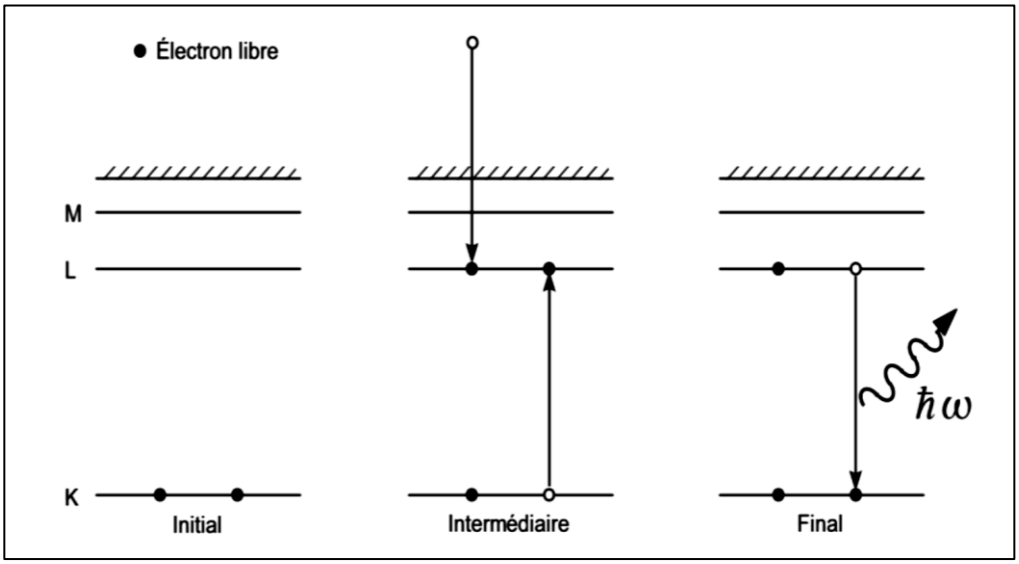
- التقاط (أسر) ويتصادم فيها الإلكترون الحر مع أيون طاقته الحركية أقل من طاقة الإثارة، وتتشكل الحالة المثارة على نحو مضاعف وهو عملية عكسية للتأين الذاتي التي يعود فيها النظام إلى حالته الأصلية أي تحدث إعادة التركيب كما يلي:

$$(Z ، N-1) + e^- \leftrightarrow (Z ، N)^{**} \qquad (10\text{-I})$$

حيث **(Z ، N) : هي حالة إثارة مضاعفة.

- الاستقرار الإشعاعي التي ينتقل فيها الأيون غير مستقر إلى حالة أكثر استقرارا إما بتأين تلقائي أو بانبعاث فوتون ويعبر عنه بالمعادلة التالية:

$$(Z ، N-1) + e^- \leftrightarrow (Z ، N)^{**} \rightarrow (Z ، N)^{*} + h\nu \qquad (11\text{-}I)$$



الشكل (I-6): عملية الإعادة تشكيل ثنائي إلكترون [11].

I-5-3- إعادة تركيب ثلاث أجسام:

تحدث هذه العملية عندما يتفاعل اثنين من الالكترونات الحرة في نفس الوقت مع الأيون، حيث يلتقط أحدهما من قبل الأيون أما الثاني ينتشر فيحمل الطاقة الإضافية، وهي العملية العكسية للتأين بالتصادم الإلكتروني ويعبر عنها وفق التفاعل التالي [20]:

$$(Z ، N-1) + e^- + e^- \leftrightarrow (Z ، N) + e^- \qquad (12\text{-}I)$$

إعادة تركيب ثلاث أجسام مهمة فقط في حالة البلازما الكثيفة (كثافة الإلكترون $n_e \geq 10^{19} cm^{-3}$) لأن احتمال كبير أن إلكترونات اثنين تقترب من أيون في نفس الوقت إذا كانت كثافة الإلكترونات كبيرة [20].

I-6- الطرق النظرية الرئيسية للتقريبات:

في دراسة نظام التصادم مشكل من الهدف الذري وقذيفة أيونية واردة، حيث تكمن المشكلة في تحديد دالة الموجة، تمثل هذه دالة موجة الانتشار لأنها تحتوي على جميع المعلومات حول حالة النظام، لحل هذه المشكلة قد تم تطوير تقنيات وأساليب مختلفة إلى الوصول لحلول تقريبية دقيقة.

التقريبات النظرية التي ستدرس في هذا الفصل باختصار ليست محددة فقط لدراسة عملية الإثارة بل استخدمت كذلك على نطاق واسع في السنوات الأخيرة لدراسة عملية التأين والالتقاط.

I-6-1- تقريب Born:

تقريب بورن هو في الاساس تصور من نوع الاضطراب في دالة الموجة أو سعة التشتت لطاقة كمون التفاعل، في هذه المقاربة نبدأ مع معادلة شرو د نجر مستقلة عن الزمن لاستخلاص المعادلات التكاملية لدالة الموجة، حيث يأخذ بعد ذلك اعتبار الشروط الحدية الملائمة النسبية على مسافات كبيرة، هذا يعني اختيار مناسبا لدالة Green من أجل الحل المتجانس للمعادلة التفاضلية الذي ينطوي على تعريف الشروط الحدية أيضا يمكن الحصول على نفس النتيجة إذا استخدمنا معادلة شرو د نجر التي تعتمد على الزمن ودالة Green [21].

في حالة تصادم الهدف الذري وأيون وارد، يعتبر انتقال الكترون من الحالة الابتدائية $|\alpha\rangle$ الواردة إلى الحالة النهائية $|\beta\rangle$ النافذة.

في هذا العلاج المضطرب يمكن التعبير عن عنصر المصفوفة لسعة الانتقال على النحو التالي :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|V_\beta|\Psi_\alpha^+\rangle \qquad (13\text{-I})$$

حيث $|\Psi_\alpha^+\rangle$ يمثل الشعاع الحالة لهاملتون H الكلي فإنه يحقق المعادلة Lippmann - Schwinger :

$$|\Psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G^+V_\alpha|\alpha\rangle \qquad (14\text{-I})$$

حيث: $G^+ = (E - H + i\varepsilon)^{-1}$

G^+ هو مؤثر Green، E يمثل طاقة الكلية للنظام، H هاملتون الكلي للنظام ويكتب كالتالي:

$$H = H_\alpha + V_\alpha = H_\beta + V_\beta \qquad (15\text{-I})$$

$|\alpha\rangle$ ، H_α وV_αهي على التوالي الشعاع الذاتي للحالة الابتدائية، هاملتون الجسيمات دون التفاعل وطاقة التفاعل في طريق الورود.

$|\beta\rangle$ ، H_β وV_β هي على التوالي الشعاع الذاتي للحالة النهائية، هاملتون الجسيمات دون التفاعل وطاقة التفاعل في طريق الخروج أو النفاذ.

باستخدام التعريف العام الذي يربط معكوسات لمؤثرين وكذلك التعبير في المعادلة (14-I) يمكن كتابة G^+ في الشكل:

$$G^+ = G_\alpha^+ + G_\alpha^+V_\alpha G^+ \qquad (16\text{-I})$$

مع:

$$G_\alpha^+ = (E - H_\alpha + i\varepsilon)^{-1} \qquad (17\text{-I})$$

من العلاقة (16-I)، نحصل بسهولة على السلسلة التالية :

$$G^+ = G_\alpha^+ \sum_{n=0}^{+\infty}(V_\alpha G_\alpha^+)^n \qquad (18\text{-I})$$

عن طريق استبدال التعبير لـ G^+ في العلاقة (I-14)، نحصل على:

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|V_\beta\left[1 + G_\alpha^+ \sum_{i=0}^{+\infty} V_\alpha (V_\alpha G_\alpha^+)^i\right]|\alpha\rangle \qquad (19\text{-I})$$

إذا احتفظنا بالحد الأول فقط من هذه السلسلة، فإننا نحصل على تقريب بورن من الدرجة الأولى (I-Born):

$$T_{\beta\alpha}^{BI} = \langle\beta|V_\beta|\alpha\rangle \qquad (20\text{-I})$$

في الغالب يتم استخدام تقريب بورن من الدرجة الأولى بسبب بساطته، وهو صالح فقط للتصادمات الذرية مع أيونات ذات الطاقة العالية، نفس شيء فإن تقريب بورن من الدرجة الثانية نحصل عليه بالاحتفاظ بالحدين الأوليين فقط من السلسلة :

$$T_{\beta\alpha}^{BII} = \langle\beta|V_\beta + V_\beta G_\alpha^+ V_\alpha|\alpha\rangle \qquad (21\text{-I})$$

يهيمن تقريب بورن من الدرجة الثانية على الانتشار عالي الطاقة في حالة التصادم غير مرن، حيث تقريب بورن يكون صالحا فقط عندما تكون الطاقة الحركية للأيون الوارد كبيرة جدا بالنسبة إلى طاقة التفاعل.

I-6-2- تقريب VPS (Vainshtein ، Presnyakov et Sobelman):

من أجل التغلب على بعض نقاط الضعف في تقريب بورن، تم تطوير تقريب جديد من قبل (Sobelman, Presnyakov et Vainshtein) تقريب "VPS" لمعالجة تشوهات دالة الموجة الصادرة التي تصف نظام التصادم.

في هذا التقريب يحاول التعامل تماما بين القذيفة والإلكترون النشط، يتم تقييم التفاعل بين القذيفة والنواة الهدف تقريبا بطريقة تفي بالشروط المحددة لعملية التصادم، حيث اقترح كل من Mc.Carroll و Gothers نسخة مختلفة قليلا عن التقريب الأولي الذي طبق في سنة 1966 من قبل Mc. Carroll, Salin لتصادم البروتون - ذرة الهيدروجين [22].

I-6-3- تقريب المسارات المقترنة (اقتران – قريب):

بديل قوي لتقريب بورن هو تقريب المسارات المقترنة، يتم تطوير دالة موجة الانتشار على أساس دوال الموجة التي تمثل مسارات التفاعل المختلفة، النتيجة هي نظام من المعادلات التفاضلية إلى جانب معاملات التطور، في هذا التقريب يتم التعامل مع دراسة عمليات التصادم في الشكلية لمعامل التأثير عند الطاقة العالية وزوايا التصادم الصغيرة، تتكون هذه الشكلية من افتراض أن قذيفة تتحرك في خط مستقيم وأن نقل كمية الحركة (الدفع الزاوي) للهدف هو عمودي على مسار القذيفة، يتم وصفها بالمعادلات التالية [23]:

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$$

$$\vec{z} = \vec{v}.\, t \qquad (22\text{-I})$$

$$\vec{\rho}\vec{v} = 0$$

حيث $\vec{R}$ هي المسافة بين القذيفة والهدف، $\vec{v}$ هي السرعة الواردة للقذيفة، $\vec{\rho}$ يشير إلى معامل التأثير و t هو الزمن المستغرق ويساوي الصفر عندما $\vec{R} = \vec{\rho}$. المعادلة يمكن أن تكون كما يلي:

$$\left\{-iv\frac{\partial}{\partial z} + H(z) + V\left(\vec{R}(z)\right)\right\}\left|\Psi^{+}\left(\vec{\rho}\,,\vec{z}\,\right)\right\rangle = 0 \qquad (23\text{-I})$$

حيث H هاملتون للنظام الإلكتروني دون طاقة التفاعل وهو مسؤول عن الانتقال الإلكتروني. يمكن تقريب دالة الموجة من خلال تطوير أساس بتبديله إلى الحالات كيفية $\{|\chi_i\rangle\}$ التي هي أشعة خاصة لـ H .

ثم يتم وضع:

$$\left|\Psi^{+}\left(\vec{\rho},\vec{z}\right)\right\rangle = \sum_{k=1}^{n} a_k\left(\vec{\rho}\,,\vec{z}\,\right)\Big|\,\chi_k\rangle\; e^{\frac{-i\varepsilon_k z}{v}} \qquad (24\text{-I})$$

حيث ε_k تعني الطاقة للحالة الخاصة $|\chi_k\rangle$. نعوض التعبير أعلاه لـ $\left|\Psi^{+}\left(\vec{\rho},\vec{z}\right)\right\rangle$ بما يساويه في المعادلة (23-I) نحصل على نظام من المعادلات التفاضلية إلى الجانب الدوال $a_j\left(\vec{\rho}\,,\vec{z}\right)$ بعد الإسقاط على $\langle\chi_j|$:

$$i\frac{\partial}{\partial z}a_j\left(\vec{\rho}\,,\vec{z}\right) = \sum_{k=1}^{n} V_{jk}\left(\vec{R}(z)\right)e^{\frac{iz\left(\varepsilon_j-\varepsilon_k\right)}{v}}a_k\left(\vec{\rho}\,,\vec{z}\right) \qquad (25\text{-I})$$

حيث عناصر المصفوفة $V_{jk}(z)$ تعطى من قبل:

$$V_{jk}\left(\vec{R}(z)\right) = \left\langle\chi_j\middle|V\left(\vec{R}(z)\right)|\chi_k\right\rangle \qquad (26\text{-I})$$

مع شروط تقارب:

$$a_j\left(\vec{\rho}\,,Z(t\to-\infty)\right) = \delta_{ij} \qquad (27\text{-I})$$

مؤشر i بالنسبة للحالة الابتدائية للنظام في حالة الورود.

$$a_j\left(\vec{\rho}\,,t\,\right) = \int_{-\infty}^{t} dt\sum_{k=1}^{n} V_{jk}\left(\vec{R}(t)\right)e^{\frac{\left(\varepsilon_j-\varepsilon_k\right)}{v}}a_k\left(\vec{\rho}\,,t\,\right) \qquad (28\text{-I})$$

يتم اعطاء احتمال الانتقال في مسار تفاعل معين f بواسطة معامل تطور الموجة في هذا المسار بالشكل:

$$P = \left|a_j\left(\rho\,,+\infty\,\right)\right|^2 \qquad (29\text{-I})$$

هناك مجموعة خيارات من الأسس المختلفة لهذا التقريب والتي تعتمد على السرعة وكذلك عدم التماثل في التصادم[24].

- **تقريب في المركز (توسع مركز واحد - SEC -):** تم تطوير دالة موجة الانتشارعلى أساس للحالات الذرية، وهي الأشعة الخاصة لهاملتون الهدف التي تدعى الأساس في المركز، هذا يعني أنه تم التركيزعلى الهدف، قد تم اجراء تطبيق على دراسة النظام التصادم من نوع ($P+Li^{2+}$) من خلال هذا التقريب.

- **تقريب في المركزين (مركزي المداري الذري -TCAO-):** في مجال السرعات المنخفضة المقاطع الفعالة لالتقاط تصبح كبيرة، لذلك فإن المسارات التي تنطوي على حالات قذيفة مفتوحة لا يمكن توسيع دالة الموجة إلا في حالات للهدف من خلال الإثارة بالمرورعبر الحالات المتوسطة التي تركزعليها القذيفة الطريقة المستخدمة تقليديا التي تتكون من التطوير على أساس ما يسمى في المركزين هو نفسه في نظام السرعة المتوسطة، في هذه الحالة يتطلب علاج الاقتران القوي بين الاثارة والالتقاط لتطويرعلى أساس في المركزين.

يكتب بعد ذلك:

$$\left|\Psi^{+}(\vec{\rho}\,,\vec{z})\right\rangle = \sum_{k=1}^{n} a_k(\vec{\rho}\,,\vec{z})\left|\chi_k^c\right\rangle e^{\frac{-iz\varepsilon_k}{v}} + \sum_{l=1}^{m} b_i(\vec{\rho}\,,\vec{z})\left|\chi_l^p\right\rangle e^{\frac{iz\varepsilon_l}{v}} \qquad (30\text{-I})$$

$\left|\chi_k^c\right\rangle$ و $\left|\chi_l^p\right\rangle$هي على التوالي الحالات الخاصة للهدف والقذيفة.

- **تقريب في المركز ونصف (تو سيع واحد ونصف -OHCE-):** حيث في هذه طريقة يحدث التأين للهدف بسبب الالتقاط للقذيفة من خلال تضمين بعض الدوال التي تركز على قذيفة في تطوير دالة موجة التوزيع على المدرات للهدف، عندما تتحرك القذيفة والهدف بعيدا عن بعضهما البعض من الإلكترون وادخال هذه الدوال يسمح بذلك ترك المنطقة في حالة مرتبطة من القذيفة، مع الأخذ بعين الاعتبار مسارات الالتقاط التي يمكن الوصول إليها بعد ذلك.

تم تطبيق هذا التقريب من قبل Reading ومجموعته في سنة 1981 لحسابات الإثارة على النظام P+H من خلال ادخال حالة 1S فقط الوحيدة التي تركز على القذيفة. قد تم تطبيقها أيضا من قبل Ford ومجموعته في سنة1982لحسابات التأين على النظام $P + Li^{2+}$.

I-6-4- تقريب Glauber:

تم تطوير هذا التقريب من قبل Glauber في اواخر الخمسينات، إنها واحدة من الصيغ eiconale كما أنه يجعل من الممكن ادخال تأثيرات طاقة التفاعل في دالة الموجة التي تصف الحالة النهائية للنظام، مع العلم أن التقريب eiconal هو تقريب حيث من المفترض أن يتحرك المقذوف في خط مستقيم كذلك يكون نقل كمية الحركة (العزم الزاوي المداري) للهدف عموديا على مسار المقذوف [25].

I-6-5- تقريب تغيري:

تحت صياغة عدة أساليب لتوفير نماذج مناسبة لدراسة عملية التصادم، منها نموذج Cheshire الذي أنشئ في سنة 1968حيث طور التفاعل ودالة الموجة في شكل تو فيقات كروية، النموذج المحتمل من الدرجة الثانية الذي اقترحه Bransden and Coleman في سنة 1972 استنادا إلى أسلوب المسارات المقترنة ونموذج الحالات الكيفية الذي استخدمه Reading و مجموعته في سنة 1976، ثم Fichard ومجموعته بإضافة إلى Swaford ومجموعته في سنة 1977.

غالبية التقريبات الموصوفة حتى الآن تتعلق أساسا بدراسة التصادمات عالية الطاقة ويمكن تمديد تطبيقها على مجال الطاقة المتوسطة.

برز بديل آخر في ظهور مقاربة جديدة :

المبدأ التغيري لـ Schwinger الذي قدمه بنفسه في سنة 1950، إنها أداة قوية وفعالة لدراسة تصادم البروتون - ذرة الهيدروجين، أو بشكل أعم لدراسة تصادم ذرة - أيون بسرعات متعددة.

I-7- خلاصة

تطرقنا في هذا الفصل لمعرفة مختلف العمليات الذرية الأساسية والمتمثلة في عمليات التصادم الإثارة التأين و إعادة التركيب بأنواعه، وتمتاز كل ألية بمعطيات ذرية خاصة متمثلة في المعاملات والمقاطع الفعالة لهذه الأليات، وهي مهمة جدا من أجل تحليل الأطياف ودراسة بلازما المخابر والفيزياء الفلكية، وكذلك معرفة مختلف الطرق النظرية المتطورة لدراسة عمليات التصادم من بينها الصيغة الجديدة لمقاربة التغيري لـ Schwinger لدراسة عملية الإثارة التي سنركز عليها في هذه الدراسة.

قائمة المراجع

[1]Mr. Abdelouhad Mohamed, " application du principe variationnel de Shwinger aux calculs des section efficaces de l' émission Balmer - α et de la fraction de polarisation dans une collision proton – atome d'hydrogéne", Thése de Master, université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen Algérie, P.4, 2013.

[2]Mr. Safi Kaddour, " application du principe variationnel de Schwinger à l'excitation des ions hydrogénoides Be^{3+}par impact de protons aux énergie allant de16Kev à 4Mev",Thése de Magister universite Abou - Bekr Belkaid,Tlemcen, P.1-2, 2012.

[3]M.K. Steven, E. Behar, A. Kinkhabwala et al, "X-ray spectroscope of astrophysique plasmas ", Phil. Trans. R. Soc . Land, Vol.360, P.1923, 2002.

[4]A.R. Foster, L.J, R.K. Smith and N.S, " brickhouse, update data and For-calculations x-Ray Spectroscopy ", "calculations Smithsonian astrophysical observatory", Cambridge, MAO 2144, 2012.

[5]محاضرات الأستاذ الدكتور سعد الله، في فيزياء البلازما، 1ماستر، 2016، جامعة شهيد حمه لخضر - الوادي.

[6]B.H. Bransden and C.J. Joachain, physics of atoms and molecules, New York, 1983.

[7]Chapitre10," Physique des collisions ", P.126-136, (https://femto physique.fr -/mécanique/ PDF /physique_des_collisions.pdf).

[8]موان احسان، "أثر التوزيع غير الماكسويلي على المعطيات الذرية: دراسة معدل التأين بالتصادم الإلكتروني وتطبيقه على بعض الذرات "، ماستر أكاديمي، جامعة الوادي، الجزائر، 2014، ص.22.

[9]Bassem Hmouda, "Etude détaillée du deuxième terme de l'approximation de Born: applications à l'ionisation de l'atome d'hydrogéne et à la double ionisation de l'atome d'hélium par impact d' électrons et de positrons ", université de lorraine Thése, docteur, 2014, Français , P.27-29.

[10]E.H. Guedda," contribution à l'étude des structures atomiques et processus élémentaires dans les plasmas: "Application aux hydrogénoides et aux heliumoides" Thése de doctorat université Badji Mokhtar, Annaba, P.66, 2006.

[11]صابر فاطمة الزهراء، " دراسة معامل إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون للأيونات الشبيهة بالهليوم الخفيفة : تطبيق على أيونات Li^{+}- Be^{+2}- C^{+4}"، الجامعة الشهيد حمه لخضر-الوادي، ص 34-35، 2016.

[12]Mr Abdel Karim Ferouani, "Effets d'électrons Suprathermiques directifs sur le diagnostic en température de plasmas chauds basé sur le rapport d'intensité des raies d'émission d'ions heliumoides", Thése docteur en physique, université Abou - Bekr Belkaid, de Tlemcen, 2013, P.35-36.

[13]J.V. Paradis and A.M. Bleaker, "X-Ray spectroscopy in astrophysics" springer, nether lands, 1997.

[14]Samia Dilmi, "Etude de quelques processus atomiques affectant la cinétiques atomique: application à l'hélium neutre et quelques ions heliumoides", Thése docteur en physique université Badji Mokhtar, Annaba 2014, P.30.

[15]S. Dilmi, E.H. Guedda and A.M. Boumali, "study of ionization raise of helium maxwellian plasma", journal of fundamental and applied sciences ISSN1112-9867,30June 2011, center universities d'el- oued, Algeria.

[16]M^{me} Belhadi Ghziel, "nouvelle approche du phénoméne de saturation des section efficaces totales d'excitation de Kr^{34+} à 33.9 $Mev.u^{-1}$ par impact de différent atomes", Thése Master,université Dr. Tahar Moulay, de Saida, 2013 P.6.

[17]D. Salzmann, "atomic physics in hot plasma, oxford university press, " New York, 1998.

[18]Mohamed Sadik Ben totoche & Karim El hadj Mera bte, "calcul de la distribution d'états de charge du néon dans un plasma coronal chaud en équilibre d'ionisation", université Abou – Bekr Belkaid, Tlemcen, Thése Master, P.12 25.26, 2011.

[19]Latifa Battade, "Recombinaison radiative des ions fortement charge dans des états existe polarisation des raies de florence X", Thése de doctorat, université Abou – Bekr Belkaid, Tlemcen, 2010, P.25-26.

[20]M^{me} Latifa Geuzen," diagnostic en température des plasma chaud à partir des raies Liman - α et des rais satellites de recombinaison d'électronique des ions hydrogénoides Ca^{19+},Thése de Magister, université Abou–Bekr Belkaid de Tlemcen, 2011, P.27 – 28.

[21]T. Kahan, G. Rideau et P. Roussoloulos, "Les méthodes d'approximation Variationnelle dans la théorie des collisions atomiques et dans la Physique des Piles Nucléaires ", mémorial des sciences mathématiques, fascicule 134, 1956.

[22]L. Vainshtein, L. Presnyakov and I. Sobelman, On the excitation of neutral atoms by electron impact ", Proc . Phys . Soc, Vol.89, 1966.

[23]Brenda M. Mc. Laughlin, Thmos G. Winter and James F. Mc Cann, "Ballmer - α emission-ion in proton-hydrogen collisions", J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys. Vol.30, P1043-1059, 1997.

[24]L .Errea, Charlee, C. Illescas, H. Join and al, "convergent malleolar close - coupling calculation for ion-atom collision from low to intermediate energies " J. Phys. B: At .Mol. Phys, Vol.31, 1998, 3199-3214.

[25]Rabina ayan Panda, Suresh Kumar Patras, J. Mod. Phys, Vol.1, P 312 - 318 2010.

الفصل الثاني

التقريب التغيري
لـ Schwinger في نظرية التصادم

II-1- مقدمة

في الآونة الأخيرة اثبتت اساليب التغيري فعاليتها كأداة في الفيزياء النظرية وخاصة بالنسبة لدراسة ظواهر التصادم الذري، وكذلك في الكيمياء على سبيل المثال لحل مشكلة الدوال الخاصة لعملية التصادم وهذا يمكن تصنيف طرق التغيري إلى فئتين: تلك التي تستند إلى معادلة شرود نجر وتلك القائمة على معادلاتSchwinger-Lippmann[1-4]. حيث تم إدراج طريقة Hulthén - Kohn التي تشتمل على الشروط الحدودية المعقدة خلال تطورها في المرحلة الأولى. حيث تم الاعلان عن تمديد حديث لهذا التقريب لدراسة التصادمات الإلكترون - جزيء في سنة 1995 من قبل Rescigno وآخرون، هذا الأخير خضع لتحسين بفضل طريقة التغيري تسمى R-matrice، وقد ناقش Schneider هذا مؤخرا على نطاق واسع[5،6].

طريقة التغيري التي قدمها Schwinger نفسه في محاضراته في جامعة هارفارد، تم تطبيق هذا التقريب على عمليات التصادمات من النوع جزيء- الالكترون، أيون - الذرة استمر في تطور خلال السنوات الأخيرة وذلك بفضل التقدم في تكنولوجيا المعلومات وأعمال مختلفة التي قامت بها عدة فرق بحثية حول العالم [5،6،7].

من خلال جميع الأعمال والدراسات التي تعتمد على المبدأ التغيري لـ Schwinger فقد تبين أن هذه المقاربة التغيرية هي ناجحة في دراسة عمليات الإثارة المباشرة للذرات بواسطة التأثير الأيوني في السرعات المتوسطة، الميزة الرئيسية لهذه المقاربة هي قدرتها على إعطاء دوال الموجة الاختبارية قريبة من دالة الموجة الحقيقية للنظام [6،8].

ومع ذلك على الرغم من هذه المزايا وتشجيع النتائج الاولية وحساب سعة الانتشار بواسطة طريقة Schwinger نفذت فقط في عدد قليل من الحالات، والسبب في ذلك هو أن هذه الطريقة تدخل عناصر المصفوفة من الدرجة الثانية مماثلة لتلك من تقريب بورن الثاني، غير أنه يبدو من المثير الاهتمام القيام بالدراسة النظرية لطريقة التغيري لـ Schwinger [9،10].

في هذا الفصل نقدم الأسس النظرية لمبدأ التغيري لـ Schwinger استنادا على المعادلات التكاملية لـSchwinger-Lippmann وبهدف الحصول على شكل ثابت للسعة الانتقالية فيما يتعلق بتغيرات صغيرة لحالات الانتشار حول قيمها الدقيقة [10،11].

II-2- التقريب التغيري لـ Schwinger في نظرية التصادم:

نعرف $\langle \Psi_\alpha^+|$ و $|\Psi_\beta^-\rangle$ بدوال الانتشار الخاصة بتصادم جسمين، هذه الدوال تتعلق بهاملتون النظام الكلي والحالة الابتدائية والنهائية للأمواج المنتشرة سواء كانت الواردة أو النافذة، حسب معادلات Lippmann -Schwinger فإن:

$$|\Psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G_c^+ V_c |\Psi_\alpha^+\rangle \qquad (1.II)$$

$$|\Psi_\beta^-\rangle = |\beta\rangle + G_c^- V_c |\Psi_\beta^-\rangle \qquad (2.II)$$

$|\alpha\rangle$ و$|\beta\rangle$ هي الحالة الابتدائية والنهائية للهدف على التوالي و G_c^+ هو مؤثر Green الذي يعطى بالعلاقة :

$$G_c^+ = (E - H_c + i\,\varepsilon)^{-1} \qquad (3.II)$$

E : الطاقة الكلية للنظام.

H_c : هاملتون الجسيمات دون تفاعل.

نرمز لـ V_c بطاقة التفاعل بين الجسيمات وعليه فإن هاملتون النظام الكلي يكتب بالعبارة :

$$H = H_c + V_c \qquad (4.II)$$

تعرف السعة الانتقالية بعنصر مصفوفة الانتقال تكتب من الشكل:

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|T|\alpha\rangle \qquad (5.II)$$

التعريف الأساسي للسعة الانتقالية بشكل:

$$\begin{cases} V_C|\Psi_\alpha^+\rangle = T|\alpha\rangle \\ \langle\Psi_\beta^-|V_C = \langle\beta|T \end{cases} \qquad (6.II)$$

باستخدام المعادلة لـ Schwinger-Lippmann (1.II) ومعادلة (6.II) يمكن أن نستنتج عبارة السعة الانتقالية (5.II) لكن بثلاث أشكال مختلفة:

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|V_c|\Psi_\alpha^+\rangle \qquad (7a.II)$$

$$= \langle\Psi_\beta^-|V_c|\alpha\rangle \qquad (7b.II)$$

$$= \langle\Psi_\beta^-|V_c - V_c G_c^+ V_c|\Psi_\alpha^+\rangle \qquad (7c.II)$$

حيث من خلال العبارات الثلاث السابقة (7-a. b. c -II)، يمكننا أن نستنتج عبارة جديدة لـ $T_{\beta\alpha}$ يسمى الشكل المترابط لمبدأ التغيري لـ Schwinger :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|V_c|\Psi_\alpha^+\rangle + \langle\Psi_\beta^-|V_c|\alpha\rangle - \langle\Psi_\beta^-|V_c - V_c G_c^+ V_c|\Psi_\alpha^+\rangle \qquad (8.II)$$

المعادلة (8.II) ثابتة بالنسبة لأي تغير صغير$|\delta\Psi_\alpha^+\rangle$ و $\langle\delta\Psi_\beta^-|$ للأشعة $|\Psi_\alpha^+\rangle$ و$\langle\Psi_\beta^-|$ وعليه يمكن أن نحصل على :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle\beta| - \langle\Psi_\beta^-| + \langle\Psi_\beta^-|V_c G_c^+\right]V_c|\delta\Psi_\alpha^+\rangle + \langle\delta\Psi_\beta^-|V_c[|\alpha\rangle - |\Psi_\alpha^+\rangle + G_c^+ V_c|\Psi_\alpha^+\rangle] \qquad (9.II)$$

بما أن $\langle\Psi_\alpha^+|$ و $|\Psi_\beta^-\rangle$ تحقق المعادلات التكاملية لـ Schwinger-Lippmann (1.2.II) فإن المعادلة (9.II) تكافئ :

$$\delta T_{\beta\alpha} = 0 \qquad (10.II)$$

يلاحظ أن المعادلات (7- a. b. c. II) هي تعبيرات دقيقة للسعة الانتقالية ومع ذلك يتم الحصول على السعة الدقيقة عندما تستخدم حالات الانتشار الدقيقة $\langle\Psi_\alpha^+|$ و $|\Psi_\beta^-\rangle$.

من جهة أخرى يمكن أن نستنتج عبارة أخرى ثابتة جديدة لـ $T_{\beta\alpha}$ باستخدام الطرق السابقة باعتماد على المعادلات (7- a. b. c .II) وهو ما يسمى الشكل الكسري لمبدأ التغيري لـ Schwinger.

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle\beta|V_c|\Psi_\alpha^+\rangle\langle\Psi_\beta^-|V_c|\alpha\rangle}{\langle\Psi_\beta^-|V_c - V_c G_c^+ V_c|\Psi_\alpha^+\rangle} \qquad (11.II)$$

مع الأخذ في الاعتبار تعبيرات مكافئة للمعادلات (7- a .b. c.II) للسعة الانتقالية، يمكننا دائما التحقق من أن $\delta T_{\beta\alpha} = 0$ حيث :

$$\delta T_{\beta\alpha} = [\langle\beta| - \langle\Psi_\beta^-| + \langle\Psi_\beta^-|V_c G_c^+]V_c|\delta\Psi_\alpha^+\rangle + \langle\delta\Psi_\beta^-|V_c[|\alpha\rangle - |\Psi_\alpha^+\rangle + G_c^+ V_c|\Psi_\alpha^+\rangle] \qquad (12.II)$$

هذا التعبير مطابق لمعادلة (9.II) مما يعني أن $T_{\beta\alpha}$هي أيضا ثابتة فيما يتعلق بالتغيرات الصغيرة لحالات الانتشار$\langle\Psi_\alpha^+|$ و$|\Psi_\beta^-\rangle$ حول قيمها الدقيقة.

حيث السعة الانتقالية معبر عليها في المعادلة (11.II) تدخل تلقائيا الشروط الحدودية الصحيحة وتستخدم دوال الموجة الوحيدة في المنطقة التي يحدث فيها التفاعل، كتوضيح يتكون تقريب Born- I باستبدال على التوالي في التعبير (11.II) الأشعة الدقيقة غير معروفة $\langle\Psi_\alpha^+|$ و $|\Psi_\beta^-\rangle$ بواسطة الأشعة $|\beta\rangle$ و$|\alpha\rangle$ فتصبح:

$$|\Psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle \qquad (13.II)$$

$$\langle\Psi_\beta^-| = \langle\beta| \qquad (14.II)$$

مع هذا الاختيار البسيط لدوال الاختبار فإن التعبير الكسري لسعة الانتقال يصبح:

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle\beta|V_c|\alpha\rangle\langle\beta|V_c|\alpha\rangle}{\langle\beta|V_c - V_c G_c^+ V_c|\alpha\rangle} \qquad (15.II)$$

حيث G^+ هو مؤثر Green يكتب بشكل:

$$G^+ = G_c^+ + G_c^+ V G^+ \qquad (16.II)$$

مع :

$$G^+ = (E - H + i\varepsilon)^{-1} \qquad (17.II)$$

H،E هي على التوالي الطاقة الكلية وهاملتون الكلي للنظام ويكتب هذا الاخير على شكل:

$$H = H_c + V_c = H_\alpha + V_\alpha = H_\beta + V_\beta \quad (18.II)$$

من خلال استغلال العلاقة (16.II) نحصل على السلسلة التالية:

$$G^+ = G_c^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_c G_c^+)^n \quad (19.II)$$

حيث يتم ادخال السلسلة معبر عنها في المعادلة (19.II) في المعادلة لـ Schwinger - Lippmann (1.II) وبالتالي العلاقة (7a.II) تعطينا:

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_c [1 + G_c^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_c G_c^+)^n V_c] | \alpha \rangle \quad (20.II)$$

إذا احتفظنا بالحد الأول من السلسلة فإننا نحصل على تقريب بورن من الرتبة الأولى في شكل:

$$T_{\beta\alpha}^{BI} = \langle \beta | V | \alpha \rangle \quad (21.II)$$

وبالمثل نحصل على تقريب بورن من الرتبة الثانية باحتفاظ على حدين من السلسلة في شكل:

$$T_{\beta\alpha}^{BII} = \langle \beta | V_c + V_c G_c^+ V_c | \alpha \rangle \quad (22.II)$$

فإن التقريب بورن هو مقاربة مضطربة يتألف من تطوير دالة الموجة أو سعة الانتشار في شكل سلسلة من طاقة التفاعل.

بالنسبة للطاقات الواردة الكبيرة بما فيها الكفاية، يعطى تقريب بورن من الدرجة الأولى تقديرا جيدا للمقطع الفعال الكلي للإثارة، نظرا لبساطته عادة ما يستخدم هذا الأخير. هذا التقريب صحيح بالفعل عندما تكون الطاقة الحركية لأيون الوارد كبيرة جدا مقارنة بكمون التفاعل.

العودة الآن إلى التعبير الكسري لسعة الانتقال (15.II)، باستخدام المعادلتين (21.II) و(22.II) نحصل على شكل آخر:

$$T_{\beta\alpha} = T^{\mathrm{BI}} \left[\frac{1}{1 - \frac{\bar{T}^{\mathrm{B\Pi}}}{T^{\mathrm{BI}}}} \right] \quad (23.II)$$

T^{BI} يمثل السعة الانتقالية لتقريب بورن من الدرجة الأولى وكذلك T^{BII} تقريب بورن من الدرجة الثانية ويكتب كما يلي:

$$T^{\mathrm{B\Pi}} = T^{\mathrm{BI}} + \bar{T}^{\mathrm{B\Pi}} \quad (24.II)$$

باعتبار أن هذه النسبة $\left|\frac{\bar{T}^{B\Pi}}{T^{\mathrm{BI}}}\right|$ هي صغيرة أمام الواحد وباستخدام التعبير المتطور في المعادلة (23.II) و $((1-\varepsilon)^{-1} \cong (1+\varepsilon)\ \varepsilon < 1)$ سيكون لدينا:

$$T_{\beta\alpha} = T^{\mathrm{BI}} + \bar{T}^{\mathrm{B\Pi}} + \cdots \quad (25.II)$$

نلاحظ أنه في هذا التطور أول مصطلحي تتوافق مع سلسلة الثانية من ترتيب Born.

لذلك يمكن استنتاج أنه في حالة الطاقات العالية نسبيا التي تتقارب فيها سلسلة Born، فإن مبدأ التغيري لـ Schwinger يمكن أن يوفر تقريب أفضل من ذلك في الترتيب الثاني من Born.

تقييم لسعة الانتقال في الشكل الكسري المعطاة بالمعادلة (11.II) وباستخدام التقريب (14.13.II) الذي أجرية من أجل الحالة $^3S_1$ أكثر تعقيدا في حالة تصادم بين النواة - النواة، تبين أن نتيجة التغيري تكون أكثر دقة من تقريب بورن الثاني.

في الواقع التقريب الأول لـ Born يعطي مقاطع فعالة أقل كفاءة بالنسبة لتغيري على أساس اختيار بسيط لدوال (13.14.II). ويوضح هذا المثال الصعوبات التي يمكن أن تنشأ عند اختيار خاطئ لدوال الاختبار التي تستخدم في مبدأ التغيري.

II-2-1 سعة التغيري التقريبية الشكلية لـ Schwinger:

حيث الحالات الانتشار $\langle\Psi_\beta^-|$ و$|\Psi_\alpha^+\rangle$ لا يمكن أن تعرف بالشكل الدقيق لذلك سوف نأخذ تقريب لأشعة الحالة $|\widetilde{\Psi}_\alpha^+\rangle$ و $\langle\widetilde{\Psi}_\beta^-|$ يكتب بالشكل:

$$|\widetilde{\Psi}_\alpha^+\rangle = |\Psi_\alpha^+\rangle + |\delta\Psi_\alpha^+\rangle \qquad (26.II)$$

$$\langle\widetilde{\Psi}_\beta^-| = \langle\Psi_\beta^-| + \langle\delta\Psi_\beta^-| \qquad (27.II)$$

من خلال تطوير $|\widetilde{\Psi}_\alpha^+\rangle$ و $\langle\widetilde{\Psi}_\beta^-|$ على حالات من الأساس$\{\langle i|\}$ و$\{|j\rangle\}$(المجموعتين ليست بالضرورة متطابقة ولكن لديهم نفس البعد المحدود N):

$$|\widetilde{\Psi}_\alpha^+\rangle = \sum_{i=1}^{N} \tilde{a}_i|i\rangle \qquad (28.II)$$

$$\langle\widetilde{\Psi}_\beta^-| = \sum_{j=1}^{N} \tilde{b}_j^*\langle j| \qquad (29.II)$$

حيث $\tilde{a}_i$ و $\tilde{b}_j$ هي مركبات خاصة بأشعة حالة وتستمد من حالات الانتشار التقريبية وذلك بحل المعادلة $\delta T_{\beta\alpha} = 0$.

وبالتعويض عن حالات الاختبار في المعادلة (11.II) نحصل على السعة الانتقالية التقريبية$\tilde{T}_{\beta\alpha}$ بالشكل التالي:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\langle\beta|V_c|\widetilde{\Psi}_\alpha^+\rangle\langle\widetilde{\Psi}_\beta^-|V_c|\alpha\rangle}{\langle\widetilde{\Psi}_\beta^-|V_c - V_c G_c^+ V_c|\widetilde{\Psi}_\alpha^+\rangle} \qquad (30.II)$$

يمكن استنتاج من المعادلات (9.II) و (27.26.II) المعادلة التالية:

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle\beta| - \langle\widetilde{\Psi}_\beta^- - \delta\Psi_\beta^-|(1 - V_c G_c^+)\right]V_c|\Psi_\alpha^+\rangle + \langle\delta\Psi_\beta^-|V_c\left[|\alpha\rangle - (1 - G_c^+ V_c)|\widetilde{\Psi}_\alpha^+ - \delta\Psi_\alpha^+\rangle\right] \qquad (31.II)$$

فمن السهل أن تظهر تغير على ترتيب لـ $\langle \delta\Psi^{+}{}_{\alpha} \,|\, \delta\Psi^{-}{}_{\beta} \rangle$ و $\delta T_{\beta\alpha} = 0$.

الآن باستخدام المعادلة $\delta T_{\beta\alpha} = 0$ واستبدال شعاع الحالة $|\widetilde{\Psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ و$\langle\widetilde{\Psi}_{\beta}^{-}|$ من خلال التطورات المذكورة سابقا من المعادلات (29.28.II)، نحصل على المعاملات $\tilde{a}_i$ و$\tilde{b}_j$ عناصر حالات الانتشار التقريبية من المعادلات التالية:

$$\begin{cases} \langle j|V_c|\alpha\rangle - \sum_{i=1}^{N} \tilde{a}_{i\alpha}\langle j|V_c - V_c G_c^{+} V_c|i\rangle = 0 \\ \langle \beta|V_c|i\rangle - \sum_{j=1}^{N} \tilde{b}_j^{*}\langle j|V_c - V_c G_c^{+} V_c|\, i\rangle = 0 \end{cases} \tag{32.II}$$

حيث نشير إلى مصفوفة مربعة البعد N التي عناصرها هي:

$$D_{ji} = \langle j|V_c - V_c G_c^{+} V_c|i\rangle \tag{33.II}$$

وبواسطة V_{α} و V_{β} الأشعة العمودية التي عناصرها على التوالي:

$$(V_{\alpha})_j = \langle j|V_c|\alpha\rangle \tag{34.II}$$

$$\left(V_{\beta}\right)_i = \langle i|V_c|\beta\rangle \tag{35.II}$$

من خلال الأشعة العمودية $\tilde{a}$ و $\tilde{b}$ التي عناصرها $\tilde{a}_i$ و$\tilde{b}_j$، وباستخدام المعادلات(35.34.33-II) ومنه يمكن التعبير عن المعادلتين المعطاة من قبل النظام بالمعادلة (32.II) في شكل مصفوفة أي:

$$V_{\alpha} = D\,.\,\tilde{a} \tag{36.II}$$

$$\left(V_{\beta}^{*}\right)^{t} = \tilde{b}^{*}.D \tag{37.II}$$

باستخدام الخصائص الجبرية للمصفوفات ومنه تصبح المعادلات سابقة بالشكل التالي:

$$\tilde{a} = D^{-1}.V_{\alpha} \tag{38.II}$$

$$\tilde{b}^{*} = \left(V_{\beta}^{*}\right)^{t}.D^{-1} \tag{39.II}$$

هذه المعادلات الاثنين تسمح بإعطاء حلول العناصر $\tilde{b}_i$ و$\tilde{a}_j$ لحالات الاختبار $|\widetilde{\Psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ و$\langle\widetilde{\Psi}_{\beta}^{-}|$.

ومنه ادخال هاتين دالتين الاختبار $\langle\widetilde{\Psi}_{\beta}^{-}|$ و$|\widetilde{\Psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ في العلاقة (30.II) للسعة الانتقالية التقريبية $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ نحصل على:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\langle\beta|V_c|i\rangle\tilde{a}_i\tilde{b}_j^{*}\,\langle j|V_c|\alpha\rangle}{\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\tilde{b}_j^{*}\langle j|V_c - V_c\, G_c^{+} V_c|i\rangle\tilde{a}_i} \tag{40.II}$$

أو في شكل مصفوفة:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\left[\tilde{a}.\left(V_{\beta}^{*}\right)^{t}\right][\tilde{b}^{*}.V_{\alpha}]}{\tilde{b}^{*}.D.\tilde{a}} \qquad (41.II)$$

يمكننا أيضا كتابة $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ بشكل مختلف وهذا باستخدام المعادلتين (39.38.II):

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \left(V_{\beta}^{*}\right)^{t}.\tilde{a} = \tilde{b}.V_{\alpha} = \left(V_{\beta}^{*}\right)^{t}.D^{-1}.V_{\alpha} \qquad (42.II)$$

أو في شكل أكثر وضوح:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \langle\beta|V_c|\tilde{\Psi}_{\alpha}^{+}\rangle = \langle\tilde{\Psi}_{\beta}^{-}|V_c|\alpha\rangle \qquad (43.II)$$

وهو يمثل اثنين من أشكال السعة الانتقالية التقريبية $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ اعتمادا على حالات اختبار الانتشار $\langle\tilde{\Psi}_{\beta}^{-}|$و$|\tilde{\Psi}_{\alpha}^{+}\rangle$.

إذن من خلال تفسير الشعاعين $\tilde{b}^{*}$ و$\tilde{a}$ وفقا لحلول المعادلة (38.39.II) تصبح المعادلة (42.II) بالشكل:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\langle\beta|V_c|i\rangle(D^{-1})_{ij}\langle j|V_c|\alpha\rangle \qquad (44.II)$$

حيث: $D_{ij} = \langle j|V - VG_T^{+}V|i\rangle$ ، $(D^{-1})_{ij}$ يدل على عنصر المصفوفة D^{-1} عكس المصفوفة D بالنسبة إلى الأشعة الأساس $\langle i|$ و $|j\rangle$.

II-3- خلاصة

في الأخير يمكننا القول بأننا قد توصلنا في هذا الفصل إلى السعة الانتقالية التقريبية $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ ثابتة فيما يتعلق بالتغيرات صغيرة للحالات الانتشار في نظرية التصادم بصفة عامة في حالة تصادم جسمين في شكلها الكسري كدالة لحالات الانتشار التقريبية التي تم تطويرها في فضاء أشعة جزئي ذو بعد محدود N التي تصف النظام التصادم، وذلك بعد قيام بعدة خطوات الحسابية.

قائمة المراجع

[1]Calos Maria Granados –Castro, " application of Generali zed Sturm Ain basis eunction to moléculaire system, Thése de doctorat, université de lorraine, France 2016, P.123-134.

[2]Mr. Safi Kaddour,"application du principe variationnel de Schwinger à l'excitation des ions hydrogénaides Be^{3+} par impact de protons aux énergies de16 Kev à 4 Mev", université Abou – Bekr Belkaid, Thése Magister, Tlemcen, 2012, P 12-20.

[3]Mr. Abdelouhad Mohamed, "application du principe variationnel de Schwinger aux calculs des section efficaces de l'émission Balmer -α et de la fraction de polarisation dans une collision proton-atom d'hydrogéne", Thése Master université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen Algérie, 2013, P.20.

[4]Mr. Marbouh Noredine, "excitation électronique des ions heliumoides $Si^{12+}(1S^2)$ par impact d'atomes de gaz rares aux énergies intermédiaires : effet de saturation des sections efficaces totales d'excitation ", Thése Master, université Dr. Tahar Moulay, Saida, 2014, P.14-20.

[5]Kazuo Takatsuki and Robert R.Luchese, Vincent Mckoy,"Relationship between the shwinger and kohn –type variational principles in scattering theory" Physical review a, volume 24, Number 4,1981.

[6]Robert K. Nesbit, "variational principle and methods in theoretical physics and chemistry, Cambridge university press, 2004, P.36-52.

[7]J. Schwinger, Phys. Rev.Vol.56, P.750, 1947.

[8]Thomas L. Gibson, Marco A.P. Lima and Vincent Mckoy, Winifred M. huo "application of the schwinger multichannel formulation to electron-impact excitation of the $B^1\sum_u^+$ state of H_2", physical Review A, volume35, Number 6,1986, P.(35).2473-2474.

[9]Sadh an K. Adhikari, "complex kohn variational principle for the solution of Lippmann – Schwinger equations", Universidad Estadual Paulist a, Rua pamptona 145, Brazil, July 1992, P.2-9.

[10]B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet ," applications du principe variationnel de schwinger a l' exitation directe du Fe^{24+} $(1S^2)$ a400 MEV par impact de different atomes: contribution des état du continuum", physical and chemical News Journal, université Dr. Tahar Moulay, de Saida, 2013, P.23.

[11]Bouserhane Adnane, " contribution du continuum dans les section efficaces d'excitation aux énegies intermédiaires", Thése docteur en physiques,université Aboubekr Belkaid, de Tlemcen, 2014, P.34 - 47.

الفصل الثالث

سعة الانتقال التغيري
لـ Schwinger للإثارة
المباشرة

III-1- مقدمة

إن فهم آليات التصادمات الذرية من خلال التأثير الأيوني هو الاهتمام الرئيسي للباحثين في اختيار الطرق والنماذج النظرية المصممة لدراسة واختبار عمليات التصادم، وهذا يتطلب نظرية موثوقة تصف بشكل صحيح التفاعل بين النواة مع الالكترونات عن طريق قوة كولوم بسبب تفاعل طويل المدى، خلال التصادم الذري تحدث أهم آليات التفاعل الأولية (التأين، الإثارة، إعادة التركيب بأنواعه)، على سبيل المثال بين الجسيمات المشحونة والذرة يعتمد أساسا على سرعة التصادم فيما يتعلق بسرعة الإلكترون في الهدف على وجه الخصوص، في حالة سرعة التصادم عالية فإن عمليات التأين والإثارة للهدف الذري هي المهيمنة.

دراسة عمليات الإثارة التي تحدث أثناء تصادمات الذرات بواسطة تأثير أيون قد حظيت باهتمام كبير خلال السنوات الماضية، وقد تم تصميم أساليب تقريب تقنية ونظرية لحساب النتائج مقارنة مع القياسات التي يمكن الوصول إليها من التجربة مباشرة، و كانت دائما دليلا على المصداقية والفعالية للنماذج المقترحة، ومن بين هذه التقنيات وأساليب التقريب فإن مبدأ التغيري لـ Schwinger وحده يشكل أداة قوية للغاية في تقدير المقاطع الفعالة [1-7].

في هذه الدراسة سوف نكون مهتمون في إثارة نظام الهيدروجين بواسطة تأثير أيون في السرعات المتوسطة، إن مجال السرعة مهم لوصف عملية الإثارة بشكل صحيح من حيث المرور عبر الحالات المتوسطة لمسافات صغيرة بين النوى، غير أنه تجدر الإشارة إلى أن المساهمة الرئيسية في عملية الانتقال سوف تحدث في زوايا صغيرة (أقل من 10^{-3} راديان) في مثل هذه الحالة يمكننا أن نعتبر أن القذيفة تصف مسارا مستقيما، وبالتالي علاج هذه المشكلة في سياق تقريب eiconale.

III-2- الأنظمة الهيدروجينية:

الأيونات الهيدروجينية هي أبسط البنيات الذرية لها الكترون واحد فقط، وبالتالي فإن أيون الهيدروجين يتكون من النواة N من شحنة Ze+ والالكترون كتلته me وشحنته e^- (Z هو العدد الذري أو عدد البروتونات الموجودة في نواة الذرة)، نتيجة لمعادلة شرو د نجر يجعل من الممكن وصف دقيق لحالات الكم لهذا الالكترون أي معرفة المدارات الذرية، إن استخدام المدارات الذرية هو اساس وصف الهيكل الالكتروني للذرات متعددة الالكترونات.

أنظمة الهيدروجين هي الوحيدة التي من الممكن أن تحدد الحلول الدقيقة لمعادلة شرو د نجرمن الأنظمة أكثر تعقيدا (أكثر من اثنين من الجسيمات المتفاعلة)، فإنه لا يمكن تحديد إلا دوال الموجة التقريبية.

ولذلك فإننا نبحث عن دالة الموجة الثابتة $\Psi_{el}(r،\theta،\varphi)$ للإلكترون في المرجع الذري، في الإحداثيات الكروية $(r،\theta،\varphi)$، وعليه يجب حل معادلة شرو د نجر لجسيمات متحركة خاضعة لطاقة جذب كمون كولومبية بسبب النواة[8]:

$$H_{el}\,\Psi_{el}(\theta، r ،\varphi) = E\,\Psi_{el}(\varphi، r ، \theta) \qquad (1\text{-III})$$

H_{el} هو مؤثر الطاقة الكلية للنظام وهو عبارة عن مجموع مؤثر الطاقة الحركية للإلكترونT و مؤثر طاقة التفاعل بين الجسيمات V(طاقة جذب النواة للإلكترون):

$$H_{el} = T + V \qquad (2\text{-III})$$

حيث :

$$T = -\hbar^2 / 2m \left(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2 \right) = (-\hbar^2 / 2m)\,\Delta$$

$$V = -Z e^2 / (4 \pi \varepsilon_0 r) \qquad (3\text{-III})$$

لتبسيط التعابير الرياضية وجعل الثوابت تختفي، ندخل الوحدات الذرية (u .a) من الطول والطاقة.

الوحدة الذرية للطول تقابل نصف قطر أول لمدار إلكتروني ويمثل نموذج بوهر لذرة الهيدروجين:

$$1\text{Bohr} = a_0 = 4 \pi \varepsilon_0 r \hbar^2 / m_e e^2 = 0.529\ A^0 \qquad (4\text{-III})$$

تم تسمية وحدة الطاقة الذرية بـ Hartree، التي ساهمت بشكل كبير في تقدم نظرية البنية الالكترونية للذرات:

$$1\text{Hartree} = e^2 / 4 \pi a_0 = 4.359.10^{-18}\ j = 27.21\ e\ v \qquad (5\text{-III})$$

وبالنظر إلى النظام في وحدة جديدة، يمكننا إعادة كتابة مؤثر هاميلتو ن بطريقة أبسط :

$$H_{el} = T + V = -(1 / 2)\Delta - (Z / r) \qquad (6\text{-III})$$

حيث رمز el: هو اختصار لكلمة إلكترون

III-3- سعة الانتقال التغيري لـ Schwinger للإثارة المباشرة:

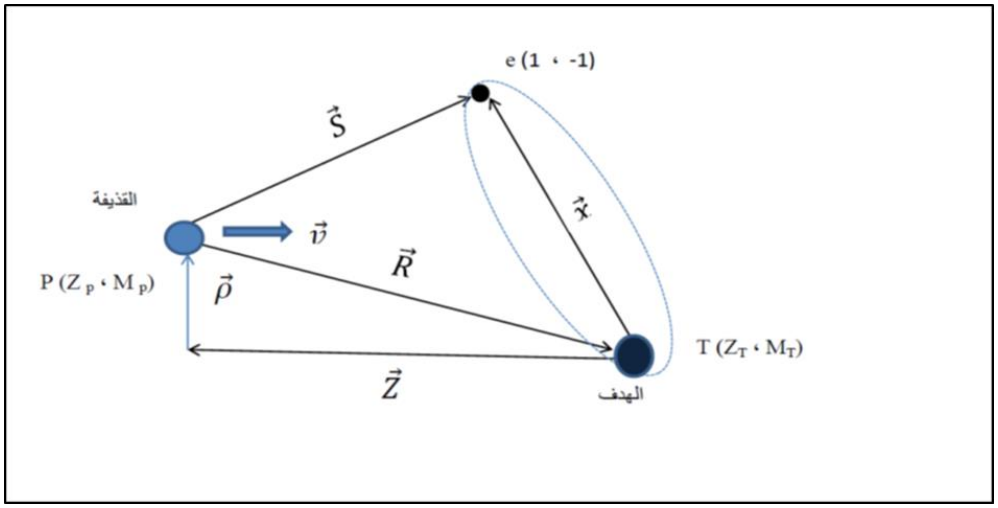
في شكلية لمعامل التأثيرالتي تم وضعها خصيصا للإثارة المباشرة، حيث تم وصفها سابقا من قبل M. Bouamoud (1988) و R. Gayet، M. Bouamoud (1989)، B. Lasri (1998)، ثم M. Bouamoud و B. Lasri و R. Gayet (1998) في حساب سعة الانتقال التغيري، وهكذا هدفنا الأساسي في هذا الجزء هو علاج هذا المبدأ التغيري لـ Schwinger لإثارة نظام الهيدروجين بواسطة تأثير أيون بسرعات متوسطة[13].

وبما أن المساهمة الرئيسية في عملية الانتقال تتم في زوايا صغيرة، يمكننا أن نعتبر القذيفة تصف مسارا مستقيما من قبل بيانات السرعة v ومعامل التأثير$\vec{\rho}$ للتصادم، وبالتالي التعامل مع هذه المشكلة كجزء من تقريب eiconale[13].

طريقة eiconal هو تقريب شبه كلاسيكي الذي يعتبر نواة تتحرك بطريقة كلاسيكية بينما يتم التعامل مع حركة الإلكترونات بطريقة كمومية، لهذا نعتبر التصادم يكون بين قذيفة من كتلة M_P و شحنة Z_P والهدف من الكتلة M_T والشحنة Z_T ، وفي هذه الحالة فمن الممكن فصل حركة القذيفة عن حركة الهدف، ولذلك يتم وصف النظام من قبل الاحداثيات التالية[15]:

$$\begin{cases} \vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \\ \vec{z} = \vec{v}.t \\ \vec{\rho}.\vec{v} = 0 \end{cases} \qquad (7\text{-III})$$

هندسيا نمثل نظام التصادم على النحو التالي:



الشكل (III-1): نظام التصادم في تقريبeiconale.

$\vec{R}$: المسافة بين النواة الهدف والقذيفة .

$\overrightarrow{\rho}$: المعامل تأثير .

$\vec{v}$: سرعة التأثير .

t : المدة المستغرقة يساوي صفر عندما $\vec{R} = \overrightarrow{\rho}$.

$\vec{Z}$: هو إسقاط على مسار القذيفة $\vec{R}$.

$\vec{x}$: موضع الالكترون بالنسبة الى الهدف T.

$\vec{S}$: موضع الالكترون بالنسبة للقذيفة P.

$$H_T = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{Z_T}{x} \qquad (8\text{-III})$$

H_T : هاملتون الذري يصف الحركة الهدف (في وحدة ذرية).

$$H_P = -\frac{\Delta_R}{2\mu} \qquad (9\text{-III})$$

H_P : هاملتون يصف الحركة النسبية للقذيفة بالنسبة لنواة الهدف.

في نظام مركز الكتلة الهدف و القذيفة يعطى هاملتون الكلي لنظام بدون تفاعل جسيمات H_C كما يلي:

$$H_C = H_T + H_P \qquad (10\text{-III})$$

حيث μ يمثل الكتلة المختزلة للنظام :

$$\mu = \frac{M_p\,(M_T+1)}{M_p+M_T+1} \qquad (11\text{-III})$$

$$V_c = \frac{Z_T Z_p}{R} - \frac{Z_p}{S} \qquad (12\text{-III})$$

V_c : هي الطاقة التفاعل بين الجسيمات التصادم.

ومنه نتيجة لذلك في معادلة شرو د نجرeiconale التي تتعلق بالزمن يصبح الاشتقاق بالنسبة لموضع يتعلق بالمركبة Z بدلا من اشتقاق بالنسبة لزمن ويعبر عليها كما يلي:

$$(-iV\ \frac{\partial}{\partial z}\ +\ V_c +\ \ H_T\ \ )|\Psi(z)\rangle = 0 \qquad (13\text{-III})$$

لحل المعادلة (6-III) والنظر في معادلة شرو د نجر eiconale للهدف (بدون تفاعل) تصبح:

$$(-iV\ \frac{\partial}{\partial z}\ +\ H_T\ \ )|\upsilon(z)\rangle = 0 \qquad (14\text{-III})$$

$\langle\ \upsilon(z)|$هو شعاع حالة خاصة لـ H_T، ويعبر عنه في تمثيل الاحداثيات لإلكترون الهدف $\{|\ \vec{x}\ ،\ z\ \rangle\}$ بواسطة:

$$\upsilon(z) = \langle\ \vec{x}،\ z|\ |\upsilon(z)\rangle =\ \ e^{-i\frac{\varepsilon_\upsilon z}{V}}\ \varphi_\upsilon\ (\vec{x}) \qquad (15\text{-III})$$

حيث : $\alpha،\ \beta = \upsilon$

حيث : ε_υ هي طاقة خاصة لحالة φ_υ ، $\vec{x}$ هي مسافة بين النواة والالكترون .

من خلال اضافة طاقة تفاعل (تفاعل الطويل المدى بين قذيفة والهدف) V_{int} في المعادلة (14-III) التي تكتب بالشكل:

$$V_{int}\ =\ \frac{Z_p(Z_T\ -1)}{R} \qquad (16\text{-III})$$

Z_T : شحنة القذيفة.

Z_P : شحنة الهدف.

تصبح المعادلة (14-III) كالتالي:

$$(-iV\ \frac{\partial}{\partial z}\ +\ V_{int} +\ \ H_T\ \ )|\upsilon(z)\rangle = 0 \qquad (17\text{-III})$$

حلول المعادلة (13-III) هي دوال eiconale $\{|\upsilon(z)\rangle\}$ التي هي حلول للمعادلة (14-III) مضروبة في عامل طور يسمى << كولومب >> $i\ (Z_p(Z_T-1)/\ \mathrm{V})\ \ \ln(VR-\mathrm{VZ})$ ، هذا يعني أن سعة الانتقال تتضاعف بواسطة عامل طور تبعا لمعامل التأثير $\vec{\rho}$، كما في الشكل $\rho^{\frac{2iZ_p(Z_T-1)}{V}}$ والتي يمكن اهمالها في حساب المقطع الفعال الكلي ويعاد ادخاله في حالة حساب المقطع الفعال التفاضلي.

هذا يؤدي إلى إهمال تأثير طاقة التفاعل بين شحنة Z_T للقذيفة والشحنة $(Z_P - 1)$ الفعلية للهدف عند حساب سعة الانتقال، بالتالي فإن تعريف طاقة التفاعل المسؤولة على الإثارة تكتب بالشكل:

$$V = V_c - V_{int}$$

$$= V_c - \frac{Z_p(Z_T-1)}{R} \qquad (18\text{-III})$$

$$= Z_p(\frac{1}{R} - \frac{1}{S})$$

معادلة شرود نجر في الشكلية لمعامل التأثير تصبح :

$$\left\{-i\nu \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V\right\} |\Psi_\alpha^+(z)\rangle = 0 \qquad (19\text{-III})$$

$$\left\{-i\nu \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V\right\} \langle\Psi_\beta^-(z)| = 0 \qquad (20\text{-III})$$

تجدر الإشارة إلى أن حالات الانتشار $|\Psi_\alpha^+(z)\rangle$ و $\langle\Psi_\beta^-(z)|$ كما أن الحالات $|\alpha\rangle$ و $\langle\beta|$ لا تعتمد فقط على الاحداثيات الالكترونية $\vec{x}$ لكن أيضا على مركبة z من $\vec{R}$.

مع العلم أن الدوال $|\alpha(z)\rangle$ و $\langle\beta(z)|$ هي على التوالي الحالات الابتدائية والنهائية للهدف، وهي أيضا حلول لمعادلة شرود نجر eiconale (14-III) مع الهاملتون الوحيد للهدف H_T.

$$\left\{-i\nu\frac{\partial}{\partial z} + H_T(z)\right\}|\alpha(z)\rangle = 0 \qquad (21\text{-III})$$

$$\left\{-i\nu\frac{\partial}{\partial z} + H_T(z)\right\}\langle\beta(z)| = 0 \qquad (22\text{-III})$$

يمكننا حل المعادلات التفاضلية (19-III،20) مع شروطها الابتدائية، مع وجود المؤثر Green للهدف وهو حلول المعادلات التالية:

$$(\pm i\nu \frac{\partial}{\partial z} + H_T)G_T^{\pm}(z - z') = -\delta(z-z') \qquad (23\text{-III})$$

حيث الدوال Green $G_T^-(z-z')$ و $G_T^+(z-z')$ تتوافق مع الدالة Green eiconale $G_c^{\pm}$ مرتبطة مع هاملتون H_C .

مع الشروط الابتدائية التالية:

$$G^+(z) = 0 \quad \text{إذا كان} \quad z < 0 \qquad (24\text{-III})$$

$$G^-(z) = 0 \quad \text{إذا كان} \quad z > 0 \qquad (25\text{-III})$$

حل المعادلة (23-III)هو:

$$\langle v(z')|G_T^+(z-z') = -\frac{i}{V}\langle v(z)|\theta(z-z') \qquad (26\text{-III})$$

$$G_T^-(z-z')|v(z')\rangle = \frac{i}{V}\theta(z-z')\,|v(z)\rangle \qquad (27\text{-III})$$

$\beta \cdot \alpha = \upsilon$

حيث $\theta(z - z')$ هي الدالة Heaviside.

$$\langle v(z')|G_T^+(z-z') = \begin{cases} -\frac{i}{\nu}\langle v(z)| & z > z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (28\text{-III})$$

$$G_T^-(z-z')|v(z')\rangle = \begin{cases} \frac{i}{\nu}|v(z)\rangle & z > z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (29\text{-III})$$

حالات الانتشار $\langle \Psi_\alpha^+(z)|$ و $\left|\Psi_\beta^-(z)\right\rangle$ هي حلول المعادلات (III- 19، 20) وتسمى << المعادلات eiconale de Lippmann - Schwinger >> وتعطى كما يلي [9،11]:

$$|\Psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz'\, G_T^+(z-z')\, V(z')\, |\Psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (30\text{-III})$$

$$\langle \Psi_\beta^-(z)| = \langle \beta(z)| + \int_{-\infty}^{+\infty} dz'\; G_T^-(z-z')V(z')\langle \Psi_\beta^-(z')| \quad (31\text{-III})$$

تكتب سعة الانتقال eiconale بدلالة $\vec{\rho}$ بثلاثة أشكال:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z\to+\infty} \langle \beta(z)|\ \Psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (32\text{-III})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z\to+\infty} \langle \Psi_\beta^-(z)|\ \alpha(z)\rangle \quad (33\text{-III})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z\to+\infty} \langle \Psi_\beta^-(z)|\ \Psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (34\text{-III})$$

أيضا بالشكل التالي:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z\to+\infty} \int_{+\infty}^{z} d\langle \beta(z)|\Psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (35\text{-III})$$

أو بالشكل:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z\to+\infty} \int_{+\infty}^{z} \frac{dz}{dz} d\langle \beta(z)|\Psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (36\text{-III})$$

ملاحظة: حيث الرمز $\langle\ |\ \rangle$ يشير إلى التكامل على الإحداثيات الإلكترونية.

من معادلات (III-19، 20) و (III-21،22) وتعويض $\upsilon(z)$ بالحالة الابتدائية والنهائية نحصل على:

$$\left\{-i\nu\frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V\right\}|\Psi_\alpha^+(z)\rangle = 0 \implies \frac{\partial}{\partial z}\left|\Psi_\alpha^+(z)\right\rangle = -\frac{i}{\nu}(H_T + V)|\Psi_\alpha^+(z)\rangle$$

(37-III)

$$\left\{-i\nu\frac{\partial}{\partial z} + H_T(z)\right\}\left|\beta(z)\right\rangle = 0 \implies \frac{\partial}{\partial z}\left|\beta(z)\right\rangle = -\frac{i}{\nu} H_T|\beta(z)\rangle \quad (38\text{-III})$$

بالتالي سعة الانتقال تصبح في شكل:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{\nu}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\beta(z)|H_T + V|\Psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (39\text{-III})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{V}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \ \langle\beta(z)\ |V|\ \Psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (40\text{-III})$$

من معادلات Lippman – Schwinger (31،30-III) وتعبير المعادلات (34،33،32-III) لسعة الانتقال يمكن لهذه الأخيرة أن تكتب بأشكال أخرى:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{\nu}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\beta(z)|V|\Psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (41\text{-III})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{\nu}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\langle\Psi_\beta^-(z)\middle|V\middle|\alpha(z)\right\rangle \quad (42\text{-III})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{\nu}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\langle\Psi_\beta^-(z)\middle|V - VG_T^+V\middle|\Psi_\alpha^+(z)\right\rangle \quad (43\text{-III})$$

بتعويض عبارة $|\alpha(z)\rangle$ من معادلة Lippman-Schwinger (31.30-III) في المعادلة (42-III) نحصل على:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{V}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\Psi_\beta^-(z)\ |\ V\left\{|\Psi_\alpha^+(z)\rangle - \int_{-\infty}^{z} dz' G_T^+(z-z')V|\Psi_\alpha^+(z')\rangle\right\} \quad (44.\text{III})$$

باستخدام المعادلات (41-III)،(42-III) و(44-III)، نتحصل على صيغة سعة الانتقال التغيري eiconale بدلالة $\vec{\rho}$ باستعمال الطريقة المماثلة في إنشاء التعبير الكمي لمعادلة (11-II)[16]:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{V}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} dz \ \langle\beta(z)\ |V|\ \Psi_\alpha^+(z)\rangle\left(-\frac{i}{V}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\langle\Psi_\beta^-(z)\middle|V\middle|\alpha(z)\right\rangle}{\left(-\frac{i}{V}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\Psi_\beta^-(z)\ |\ V\{|\Psi_\alpha^+(z)\rangle - \int_{-\infty}^{z} dz' G_T^+(z-z')V|\Psi_\alpha^+(z')\rangle\}} \quad (45.\text{III})$$

وعن طريق الكتابة :

$$(v|\Omega|v') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\langle v(z)\middle|\Omega\middle|v'^{(z)}\right\rangle \quad (46\text{-III})$$

حيث Ω مؤثر، يشير($|\ |$) إلى التكامل على الاحداثيات الالكترونية ومركبة Z .

من المعادلات (41-III، 42 ،43) و(45-III) يمكن كتابة سعة الانتقال في شكل أخر:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{\nu}\langle\beta|V|\Psi_\alpha^+\rangle \quad (47\text{-III})$$

$$= -\frac{i}{\nu}\left\langle\Psi_\beta^-\middle|V\middle|\beta\right\rangle \quad (48\text{-III})$$

$$= -\frac{i}{\nu}\left\langle\Psi_\beta^-\middle|V - VG_T^+V\middle|\Psi_\alpha^+\right\rangle \quad (49\text{-III})$$

ومن هذه الاشكال الثلاثة لـ $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$، وبطريقة مماثلة تماما لإنشاء الشكل التغيري (II-11) في حالة التصادم المباشر، نحصل على سعة الانتقال التغيري في شكلها يسمى شكل eiconale للمبدأ التغيري لـ Schwinger ويكتب بالشكل:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{\nu}\right)\langle\beta|V|\Psi_\alpha^+\rangle\left(-\frac{i}{\nu}\right)\langle\Psi_\beta^-|V|\alpha\rangle}{\left(-\frac{i}{\nu}\right)\langle\Psi_\beta^-|V-VG_T^+V|\Psi_\alpha^+\rangle} \qquad (50\text{-III})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{\nu}\frac{(\beta|V|\Psi_\alpha^+)(\Psi_\beta^-|V|\alpha)}{\left(\Psi_\beta^-|V-VG_T^+V|\Psi_\alpha^+\right)} \qquad (51\text{-III})$$

هذه المعادلة (51-III) لسعة الانتقال بدلالة معامل تأثير $\vec{\rho}$ ثابتة بالمقارنة مع التغيرات الصغيرة لحالات الانتشار حول قيمها الدقيقة.

بما أن هذه حالات الانتشار ليست معروفة بطريقة دقيقة، فبطريقة مماثلة للدراسة الكمية التي عرجنا عنها في الفصل الثاني نصل إلى شكل تقريبي لسعة الانتقال التغيري:

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{\nu}\right)\frac{\langle\beta|V|\tilde{\Psi}_\alpha^+\rangle\langle\tilde{\Psi}_\beta^-|V|\alpha\rangle}{\langle\tilde{\Psi}_\beta^-|V-VG_T^+V|\tilde{\Psi}_\alpha^+\rangle} \qquad (52\text{-III})$$

عند تطوير حالات الانتشار التقريبية $\langle\tilde{\Psi}_\beta^-|$ و$|\tilde{\Psi}_\alpha^+\rangle$ على مجموعتين من أساس $\{|i\rangle\}$ و $\{|j\rangle\}$، هاتين مجموعتين ليست بالضرورة متماثلتين ولكن يجب أن تكون لهما نفس البعد المحدد N.

في الأخير تستبدل حالات الانتشار $\langle\tilde{\Psi}_\beta^-|$ و$|\tilde{\Psi}_\alpha^+\rangle$ من خلال التعبيرات التقريبية في المعادلة (52-III) لنحصل على الشكل الأكثر ملائمة لسعة الانتقال.

يتم كتابة النموذج التقريبي بالشكل[16]:

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{V}\right)\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(\beta|V|i)\,(D^{-1})_{ij}\,(j|V|\alpha) \qquad (53\text{-III})$$

حيث $(D^{-1})_{ij}$ هو عنصر (i ، j) للمصفوفة D^{-1}، عكس المصفوفة D محددة بالعناصر التالية:

$$D_{ij} = (j|V - VG_T^+V|i) \qquad (54\text{-III})$$

لاحظنا أن كل حالات الهدف قد أخذت بعين الاعتبار في تمثيل مؤثر Green، كما وجدنا طريقة لتضمين كل حالات الطيف المنفصل و المستمر.

عند تطوير حالات الانتشار التقريبية $\langle\tilde{\Psi}_\beta^-|$ و$|\tilde{\Psi}_\alpha^+\rangle$ أخذنا أساس مكون فقط من خلال مجموعة الحالات للهدف (طيف منفصل) وتجاهلنا إدراج حالات الالتقاط للقذيفة، هذا يفترض أن التأثير للاقتران بين الالتقاط والإثارة الموجودة في مجال الطاقة الضعيفة من أجل المبدأ التغيري يظل صالحا، وهذا صحيح عندما تكون شحنة القذيفة أقل من شحنة النواة الهدف.

لتقييم سعة الانتقال التغيري يجب حساب نوعين من عناصر المصفوفة، كما هو موضح في الملحق كيفية عملية حساب:

- عنصر المصفوفة من النوع $\langle j|V|i\rangle$ يدعى Born - I.
- عنصر المصفوفة من النوع $\langle j|VG_T^+V|i\rangle$ يدعى Born - II.

III-4- سعة الانتقال eiconale و المقطع الفعال الكلي للإثارة:

لقد توصلنا إلى سعة الانتقال في الشكلية لمعامل التأثير، فيما بعد سيتم التعبير عن سعة انتقال eiconale والمقطع الفعال الكلي لعملية الإثارة الذرية بتأثير البروتون، مع تطوير حالات الانتشار التقريبية $\langle\widetilde{\Psi}_\beta^-|$ و$|\widetilde{\Psi}_\alpha^+\rangle$ على اساس يتكون فقط من الحالات الذاتية للهدف و اهمال ادخال حالات الالتقاط للقذيفة بين الحالات الانتقالية المتوسطة[10].

III-4-1- سعة الانتقال eiconale :

$\langle\alpha|$ و $\langle\beta|$هي الحالات الالكترونية الابتدائية والنهائية، الحالات الخاصة لـH_T. $|\vec{K}_\alpha\rangle$ و$|\vec{K}_\beta\rangle$ هي الحالات الخاصة الابتدائية والنهائية تصف الموجة المستوية المرتبطة بالقذيفة ($\vec{K}_\alpha$ و$\vec{K}_\beta$ هي اشعة كمية للحركة الابتدائية والنهائية للقذيفة)[12].

سعة الانتقال الكمية التي اتخذت بين الحالة الابتدائية والنهائية $|\alpha\rangle\otimes|\vec{k}_\alpha\rangle \rightarrow |\beta\rangle\otimes|\vec{k}_\beta\rangle$ تكتب بالشكل:

$$T_{\beta\alpha} = \langle\vec{k}_\beta| \otimes \langle\beta|V|\Psi_\alpha^+\rangle \qquad (55\text{-III})$$

$$= [\langle\vec{k}_\beta| \otimes \langle\beta|]\ V\ [|\Psi_\alpha^{+E}\rangle \otimes |\vec{k}_\alpha\rangle] \qquad (56\text{-III})$$

$$= \langle\vec{k}_\beta, \beta|V|\vec{k}_\alpha, \Psi_\alpha^{+E}\rangle \qquad (57\text{-III})$$

حيث $|\Psi_\alpha^{+E}\rangle$ تمثل دالة موجة الانتشارeiconale.

من الدرجة الأولى في $1/\mu$ و في تمثيل الإحداثيات $\{|\overrightarrow{R,x}\rangle\}$، فإن دالة الموجة الانتشار تكتب بالشكل:

$$\Psi_\alpha^+(\vec{R}, \vec{x}) \approx e^{i k_\alpha \vec{R}} \Psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \qquad (58\text{-III})$$

حيث μ الكتلة المختزلة لنظام التصادم.

نتيجة لذلك نعبر عن سعة الانتقال في شكله الكمي على النحو التالي:

$$T_{\beta\alpha} = \int d^3\vec{R}d^3\vec{x}\, e^{i\vec{q}.\vec{R}}\, \varphi_\beta^*(\vec{x}) V\left(\overrightarrow{R,\vec{x}}\right) \Psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \overrightarrow{z}, \vec{x}) \qquad (59\text{-III})$$

الشعاع $\vec{q}$ يمثل كمية الحركة المنقولة إلى الهدف، و للحفاظ على كمية الحركة يتطلب ذلك كتابة:

$$\vec{q} = \vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta \qquad (60\text{-III})$$

يمكن أن تكون مكتوبة باستخدام مركبات طولية وعرضية فيما يتعلق بالسرعة النسبية $\vec{V}$ مثل:

$$\vec{q} = q_V \vec{V} + \vec{\eta} \qquad (61\text{-III})$$

من أجل طاقة محفوظة نكتب:

$$\frac{k_\alpha^2}{2\mu} + \varepsilon_\alpha = \frac{k_\beta^2}{2\mu} + \varepsilon_\beta \qquad (62\text{-III})$$

ε_α , ε_β هي طاقات للحالات الابتدائية والنهائية مرتبطة بالهدف، علما أن تقريب eiconale صالح في حالة الطاقة العالية وزاوية تصادم صغيرة، فإن الزاوية θ (بين أشعة $\vec{k}_\alpha$ و $\vec{k}_\beta$) والطاقة المنقولة صغيرة بالمقارنة مع طاقة القذيفة، في حين يعبر عن المركبة الطولية لكمية الحركة المنقولة كما يلي:

$$q_V \approx \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{V} \qquad (63\text{-III})$$

وباستخدام العلاقة $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$ نحصل على :

$$\vec{q}.\vec{R} = \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{V} \mathrm{z} + \vec{\eta}.\vec{\rho} \qquad (64\text{-III})$$

استبدال التعبير التقريبي $\vec{q}.\vec{R}$ في المعادلة (59-III) بعبارتها.

مع الأخذ في الاعتبار $\mathrm{d}^3\vec{\mathrm{R}} = d^2\vec{\rho}\, dz$ في التعبير عن سعة الانتقال، نحصل على الشكل التالي:

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho} e^{i\,\vec{\eta}.\vec{\rho}} \int dz\, d^3\vec{x} \varphi_\beta^* e^{\frac{i\varepsilon_\beta z}{V}}(\vec{x}) V\left(\vec{R}, \vec{x}\right) e^{\frac{i\varepsilon_\alpha z}{V}} \Psi_\alpha^{+\mathrm{E}}\left(\vec{\rho},\vec{z},\vec{x}\right) \qquad (65\text{-III})$$

حيث: $$\left(\beta|V|\Psi_\alpha^+\right) = \int dz\, d^3\vec{x} \varphi_\beta^* e^{\frac{i\varepsilon_\beta z}{V}}(\vec{x}) V\left(\vec{R}, \vec{x}\right) e^{\frac{i\varepsilon_\alpha z}{V}} \Psi_\alpha^{+\mathrm{E}}\left(\vec{\rho},\vec{z},\vec{x}\right)$$

ومنه:

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}.\vec{\eta}.\vec{\rho}}\ (\beta|V|\Psi_\alpha^+) \qquad (66\text{-III})$$

أخيرا من أجل $\alpha \neq \beta$، يمكن كتابة سعة الانتقال الكمومية التقريبية كدالة لسعة الانتقال التغيري المعبر عليها في شكلية معامل التأثير على النحو التالي:

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \mathrm{i}\nu \int d^2\vec{\rho} e^{\,i\vec{\eta}\vec{\rho}}\, \rho^{\frac{2i\, z_P(z_T-1)}{V}} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \qquad (67\text{-III})$$

لوحظ أنه في هذا التعبير الاخير مساهمة الكمون معبر عليه في المعادلة (16-III) مما يؤدي إلى معامل طور $\rho^{\frac{2i\, z_P(z_T-1)}{V}}$ اعتمادا على معامل التأثير.

III-2-4- المقاطع الفعالة eiaconale للإثارة:

يعرف المقطع الفعال على أنه الاحتمال المستقل عن الزمن لحدوث عملية تصادم معينة، وهو يميز عملية الانتشار ويحدد بشكل جيد في تجارب التفاعل (e ، 2e)، حيث التفاعل الفعال بين الالكترون والهدف يعتمد بقوة على طاقة الالكترون الوارد، لأنه يعتمد على زاوية التشتت وطبيعة العملية.

ويعرف المقطع الفعال التفاضلي المنتشر $d\sigma/d\Omega$ بأنه عدد الجسيمات المنتشرة في عنصر الزاوية الصلبة $d\Omega$ خلال وحدة الزمن ولكل وحدة تدفق (" تدفق " جزيئات القذيفة).

وتعطى من قبل العلاقة[14]:

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2}\frac{\kappa_\alpha}{\kappa_\beta}\left|T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})\right|^2 \qquad (68\text{-III})$$

مع: $d\Omega = \sin(\theta)\, d\theta\, d\varphi$

في حالة الطاقة الواردة هي أكبر بكثير من فرق الطاقة $(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)$ بين دوال حالة الهدف $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ وفي حالة $\left(\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1\right)$، التعبير في المعادلة (68-III) للمقطع الفعال التفاضلي يصبح:

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \left|\frac{\mu\, T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi}\right|^2 \qquad (69\text{-III})$$

لتحديد المقطع الفعال التفاضلي في η وهي مركبة عرضية لكمية الحركة المنقولة، يتم كتابة المقطع الفعال التفاضلي كالتالي:

$$d\sigma_{\beta\alpha} = d\varphi_\beta\ \sin(\theta_\beta)\, d\theta_\beta \left|\frac{\mu\, T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi}\right|^2 \qquad (70\text{-III})$$

من حساب $\vec{q}^2$ معبر عليها في المعادلات (61.60-III) وفي حالة $\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$، يمكننا الكتابة:

$$\eta d\eta \approx \mu^2 \upsilon^2 \sin(\theta_\beta)\, d\theta_\beta \qquad (71\text{-III})$$

مع الأخذ في الاعتبار أن $\varphi_\beta \equiv \varphi_\eta$، يتم كتابة المقطع الفعال الكلي بشكل:

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_\eta \int_0^{+\infty} d\eta\eta \left|\frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi\upsilon}\right|^2 \qquad (72\text{-III})$$

الأن استبدال$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})$ من خلال تعبيره في المعادلة (67-III)، وبتطبيق تحويل Fourier إلى بعدين سيكون لدينا:

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2\rho \left|a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})\right|^2 \qquad (73\text{-III})$$

التكامل على زاوية φ_ρ يساوي 2π و $\left|a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})\right|^2$ التي تعتمد فقط على وحدة $\vec{\rho}$، وبالتالي يصبح المقطع الفعال الكلي:

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho\rho \left|a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})\right|^2 \qquad (74\text{-III})$$

المقطع الفعال الكلي للإثارة من الحالة الابتدائية $|\alpha\rangle$ نحو الحالة النهائية $|\beta\rangle$ يعتمد على سعة الانتقال التغيري $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$.

لقد رأينا أعلاه أن الشكل التقريبي لـ $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ يتم تحديده من خلال التعبير في العلاقة (III-53) عندما نطور حالات الانتشار التقريبية في فضاء جزئي للأشعة من البعد N.

لأن$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ لا يتطلب أي تكامل على معامل التأثير، تمكنا من التغلب على صعوبة كبيرة في الاختلاف الذي يظهر في تقييم عناصر المصفوفة من نوع $(i|V|j)$ و$(i|VG_T^+V|j)$، خلال القيام بحساب عن طريقة الكم تماما عندما نكامل على معامل التأثير.

III-5- خلاصة

لقد توصلنا في هذا الفصل إلى سعة الانتقال التغيري لـ Schwinger في تقريبeiconale بدلالة المعامل التأثير للإثارة المباشرة للأنظمة الهيدروجينية بواسطة تأثير بروتونات، بعدما تطرقنا إلى عدة مراحل لوصول إلى شكلها الكسري، وذلك بعد تعويض دالة الموجة متطورة التي تصف النظام التصادم ، في ما بعد تم التعبير عن سعة الانتقال بشكلها الكمي ومنه التعبير على المقطع الفعال الكلي بدلالة سعة الانتقال التغيري لعملية الإثارة الذرية بواسطة تأثير البروتونات.

قائمة المراجع

[1]R. Gayet et J. Hanssen J. Phys . B: At. Mol .Opt .Phys. 25825 – 37,1992.
[2]R. Gayet and J. Hanssen Nucl .Instrum, Melt . Phys .Res . B 8652, 1994.
[3]B. Brendlé, K. Wohrer, Phys. Rev. Lette. 54, 2007.
[4]M. Bouamoud, " Etude variationnelle de l'éxciation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitememt perturbatif ", Thése de doctorat d'état en Sciences, université de Bordeaux-I, 1988, Texte en Francais.
[5]R. Gayet et M. Bouamoud, Nuclear Intruments and Methods in Physics Research B 42, 1989, 515 – 522.
[6]B. Lasri, "Nouvelle approche du principe variationnel de Schwinger, application à l'excitation atomique aux énergies intermediaires ",Thése de doctorat, Institutde Physique université de Tlemcen, 2007,Texte en Francais.
[7]B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, "Application du principe variationnel de Shwinger à l'exitation directe du Fe^{24+} a 400 M eV par impact de different atomes contribution des etates du continuum ", Physical and Chemical News Journal, Vol. 20, Novembre2004, P. 12-17.
[8]M. Belhadi Ghziel," Nouvelle approche du phénoméne de Saturation des sections efficaces totales d'exciatation de Kr^{34+} à 33.9 M eV. u^{-1} par impact de différents atomes ", Thése Master, université Dr. Tahar Moulay, De Saida, 2013 P.34-35.
[9]M. Bouamoud, B. Lasri , J. Hanssen , " variational approach to in P+ Be^{3+} collisions at intermediate and high impact velocities", university of Tlemcen, N.01, 2007, P. 91.
[10]M. Marbouh Noredine, " Exitation electronique des ions heliumoides Si^{12+} ($1S^2$) par impact d'atomes de gaz rares…totales d'excitation", Thése Master universite Dr Tahar Moulay, Saida, 2014, P.20.
[11]Adnane Bouserhane, Mammar Bouamoud, "Excitation cross section within schwinger variational principal and pseudo state method in a set of slater type functions ", Interational Review of physics, Vol .7, N.2, April 2013.
[12]Bouserhane Adnane , " Contribution du continuum dans les sections efficaces d'excitation aux énergies intermédiaires ", Thése Docteur en Physiques, université Abou Belkaid, De Tlemcen, 2014, P.56-110 .
[13]Mr. Abdelouhad Mohamed, "Application du principe variationnel de Schwinger aux calculs des section efficaces de l'émission Balmer -α et de la fraction de polarisation dans une collision proton-atom d'hydrogéne ",Thése Master, université Abou Bekr Belkaid ,Tlemcen Algérie, 2013, P.41.

[14]M. Remdani Meriem, " Section efficaces totales d'exitation des ions hydrogénoides du Beryllium par impact de protons " , Thése Master, universite Dr Tahar Moulay, Saida, P.27, 2017.
[15]B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet, "Variational approach to excitation of atomic hydrogen atoms by impacts of protons at intermediate velocities", Nuclear Instruments and Methods in physics Research B.251 , P. 66-72 .
[16]A. Bouserhane , M. Bouamoud, B . Lasri, " continuum variational contribution in excitation cross sections of atomic hydrogen within pseudo – state method" , Journal of science research, N4 ,Vol .1, P. 3-6, 2013.

الفصل الرابع

تطبيق مبدأ التغيري لـ Schwinger في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة

IV-1- مقدمة

دراسة الإثارة للأنظمة الهيدروجينية عن طريق تأثير أيون يبقى دائما واحدة من أكثر المواضيع المثيرة للاهتمام، وذلك لفهم عدد كبير من العمليات في الفيزياء الذرية، الفيزياء الفلكية وفيزياء البلازما خاصة لاستخدام الأشعة المحايدة لتسخين البلازما في مفاعلات الاندماج، لأن عمليات الإثارة والتأين هي آليات مهمة لفقدان الطاقة العالية والمتوسطة، من المفيد والضروري لتحديد المقاطع الفعالة لهذه التفاعلات ما يستخدمه هذا النظام من التصادم لاختبار نماذج وتقديرات مختلفة للتصادمات الذرية.

إن حساب المقطع الفعال الكلي للانتشار هو محل اهتمام كبير للدراسات التي أجريت على عمليات التصادم، وقد تم تصميم هذه الظاهرة نظريا من قبل العديد من الباحثين، ذلك بتطبيق طريقة التغيري لـSchwinger والتي تعتبر أداة قوية جدا لتقييم المقاطع الفعالة للإثارة التي تعتمد على الشكل الكسري للمبدأ التغيري لـSchwinger.

IV-2- تطبيق مبدأ التغيري لـ Schwinger في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة:

من سنة 1998 وحتى يومنا هذا، يبدو أن التقريب المتطور لـ Schwinger الذي استخدمه B. Lasri وآخرون، هو أداة تحقيق قوية جدا التي تأخذ العلاجات المضطربة من أجل تقييم المقاطع الفعالة الكلية للإثارة ودراسة التصادمات الذرية في السرعات المتوسطة وتكييفها خصيصا لإثارة الأنظمة الهيدروجينية بتأثير البروتونات في مجموعة من الطاقات[2،1].

IV-2-1- إثارة شبيه بالهيدروجين Be^{3+} بواسطة تأثير بروتون عند الطاقات المتوسطة:

على أساس النموذج تم اختيار طريقة مبدأ التغيري الكسري لـ Schwinger وتطبيقه على إثارة أيون هيدروجين بواسطة تأثير البروتون في مجال من الطاقات من 16KeV إلى 4MeV، حيث يتم مقارنة نتائج نظرية التغيري المتحصل عليها من اعمال MS. Safi Kaddour[2] مع النتائج النظرية المتاحة من المراجع[3،1].

IV-2-1-1- الحساب النظري والعددي:

العملية التي تمت دراستها في مختلف الاعمال التي ركزنا عليها في هذه المذكرة[2،1]هي الاثارة المباشرة للحالة الاولية شبيه بالهيدروجين $Be^{+3}(1S)$ عن طريق تأثير البروتون في مجال الطاقات المتوسطة ($30 \leq E(KeV) \leq 4000$).

$$P + Be^{+3}(1S) \rightarrow P + Be^{+3}(n\,l) \qquad 2 \leq n \leq 5$$

النموذج في تقريب التغيري المعتمد عليه لدراسة عملية إثارة أيونات البريليوم Be^{3+} من تأثير البروتون هو الشكل الكسري لمبدأ التغيري لـ Schwinger.

وهكذا يمكن القول أنه لدراسة الإثارة لهدف الهيدروجين من شحنة النواة Z_T من تأثير قذيفة شحنة Z_P يكفي لإجراء عمليات حساب السعة الانتقالية $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ لتصادم البروتون - ذرة الهيدروجين، مع سرعة

منخفضة $u = \frac{v}{Z_T}$ ومعامل التأثير المنخفض $\gamma = Z_T\rho$ لعملية تصادم ($P \rightarrow Be^{+3}$) Z_P=1 وZ_T=4
وينقسم الحساب في لغة البرمجة Fortran إلى مرحلتين وهما:

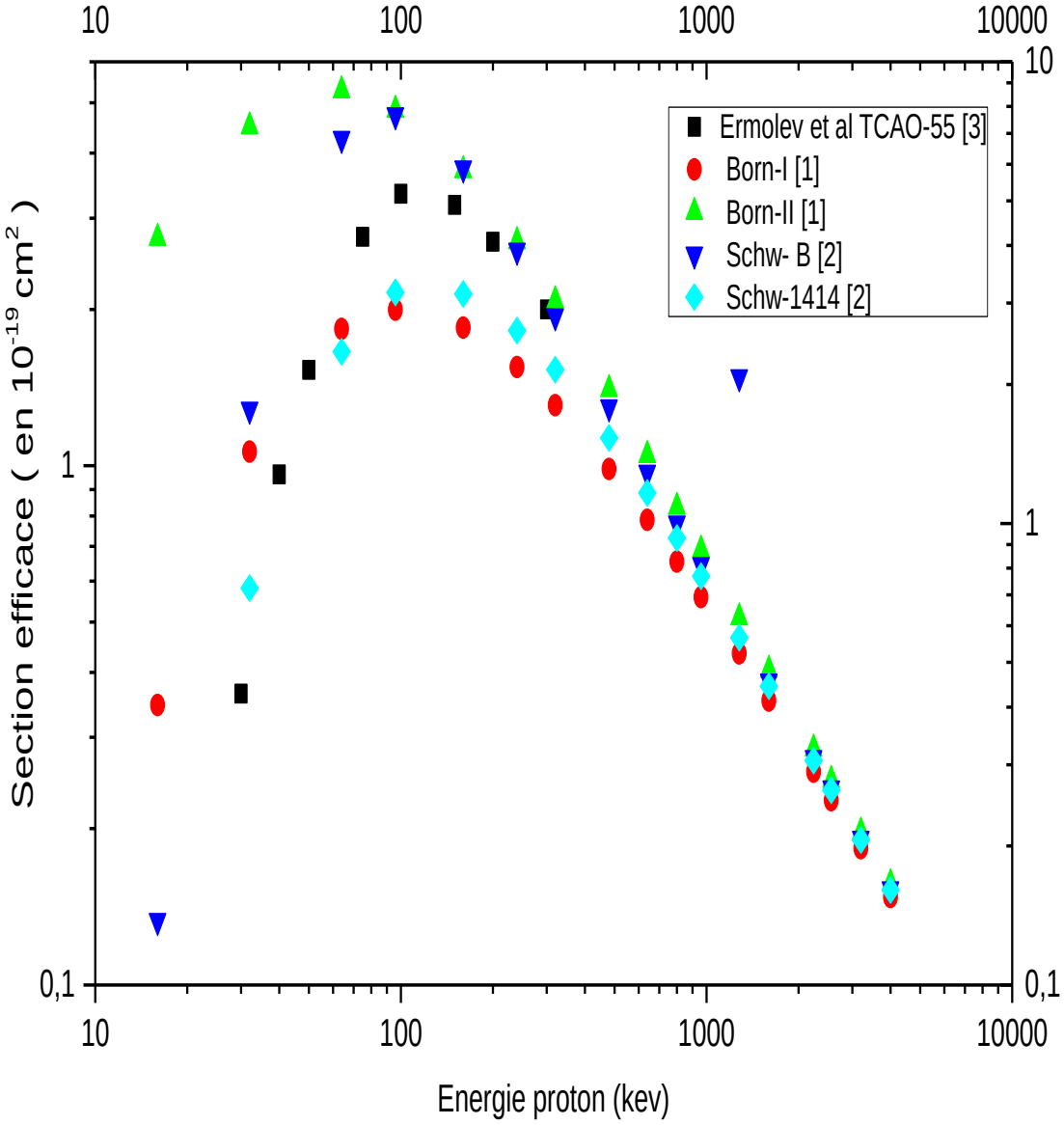
- الجزء الأول يسمح بتحديد العناصر $(i|V|j)$ ويسمى نوع بورن الأول فضلا عن العناصر من الدرجة الثانية $(i|VG_T^+V|j)$ ويسمى نوع بورن الثاني للحالات المختلفة $|i\rangle$ و$|j\rangle$ هذه العناصر سوف تخدمنا في وقت لاحق لتحديد العناصر D_{ij} من المصفوفة العكسية لـ D.
- الجزء الثاني يسمح بتحديد عناصر المصفوفة العكسية لـ D ، للحصول على قيم سعة الانتقال التغيري $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ وبالتالي الحصول على المقاطع الفعالة الكلية للإثارة بعد التكامل على معامل التأثير ρ.

IV-2-1-2- النتائج (المتحصل عليها من الاعمال المنشورة[1،2،3]): .

نظرا لضيق الوقت لتطبيق هذه النظرية لصعوبة حساب عناصر مصفوفة لتقييم سعة الانتقال ومنه المقاطع الفعالة وكذلك لعدم وجود نماذج عددية متاحة، ومنه قمنا باستعمال برنامج Origine9.1SR1 برسم المنحنيات الخاصة بالنتائج المتحصل عليها من الاعمال المنشورة في المراجع[1،2،3] والمدونة في الجداول (1-IV)، (2-IV) و(3-IV) الموافقة للأشكال على التوالي(1-IV) و(2- IV)، (3-IV).

الجدول (1-IV): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة (1S،2S) (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{+3} بواسطة تأثير بروتونات [1][2][3].

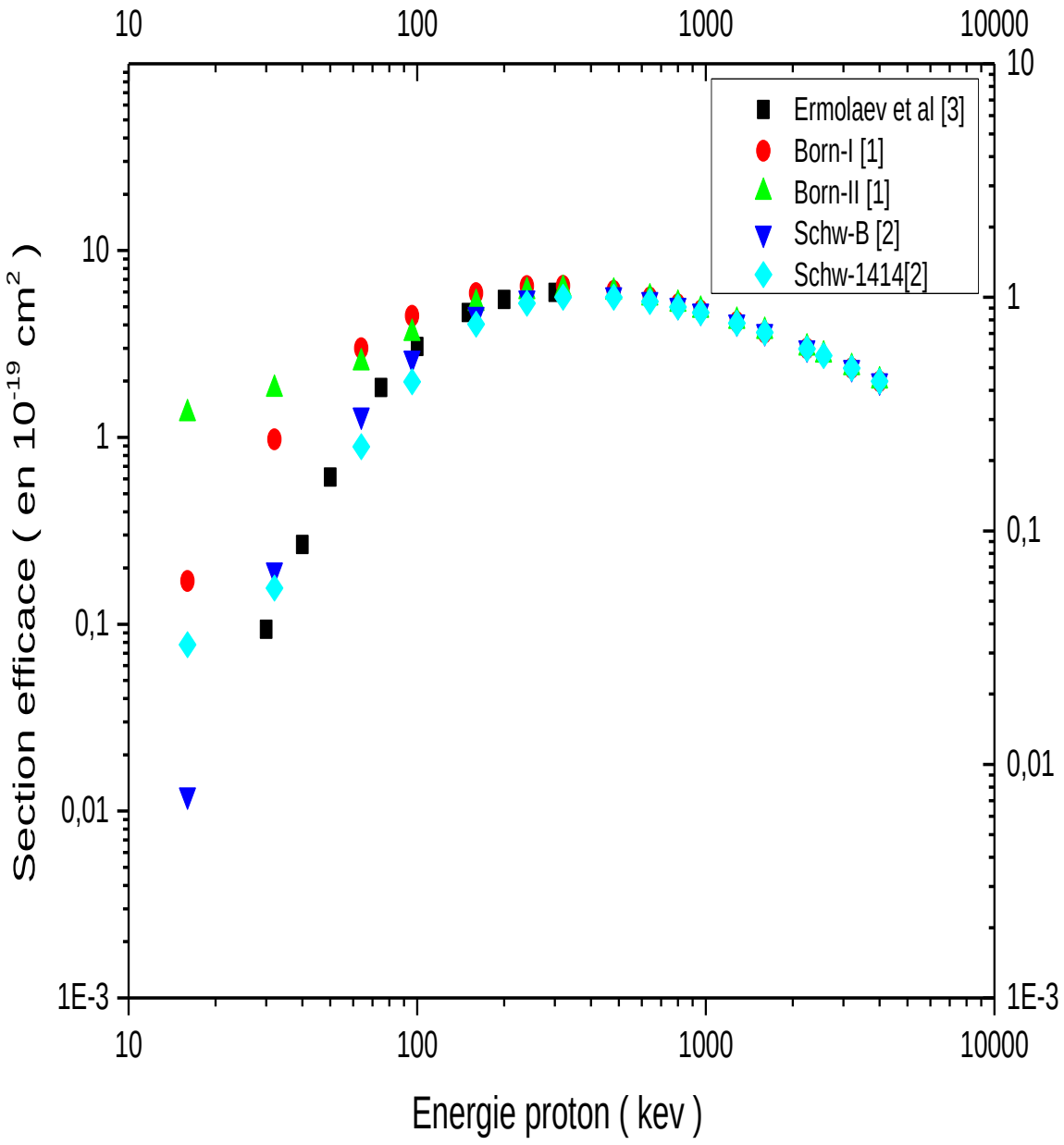
E(KeV)	Ermolaev et al TCAO-55[3]	Born - I[1]	Born - II	Schw-B[2]	Schw1414
16	—	0,346028	2,74827	0,132817	0,0791105
30	0,364	—	—	—	—
32	—	1,06491	4,50391	1,2833	0,581424
40	0,962	—	—	—	—
50	1,53	—	—	—	—
64	—	1,83446	5,28477	4,26526	1,65825
75	2,76	—	—	—	—
96	—	1,99832	4,8486	4,73572	2,15881
100	3,34	—	—	—	—
150	3,18	—	—	—	—
160	—	1,84569	3,70852	3,73906	2,14294
200	2,7	—	—	—	—
240	—	1,54894	2,7059	2,59549	1,82167
300	2	—	—	—	—
320	—	1,30877	2,08328	1,94007	1,53069
480	—	0,985821	1,40504	1,29547	1,13222
640	—	0,786795	1,04897	0,970315	0,887181
800	—	0,653603	0,833001	0,774397	0,726043
960	—	0,558611	0,6891	0,643981	0,613214
1280	—	0,43482	0,510448	1,481449	0,466692
1600	—	0,352678	0,4045	0,384308	0,37613
2240	—	0,257512	0,28519	0,27378	0,270625
2560	—	0,226881	0,248272	0,239144	0,237157
3200	—	0,183266	0,197318	0,191226	0,190276
4000	—	0,147753	0,156901	0,152833	0,152399



الشكل (1-IV): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة (1S،2S) (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{+3} بواسطة تأثير بروتونات [1][2][3].

الجدول (2-IV): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة (1S،2P) (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{+3} بواسطة تأثير بروتونات [1][2][3].

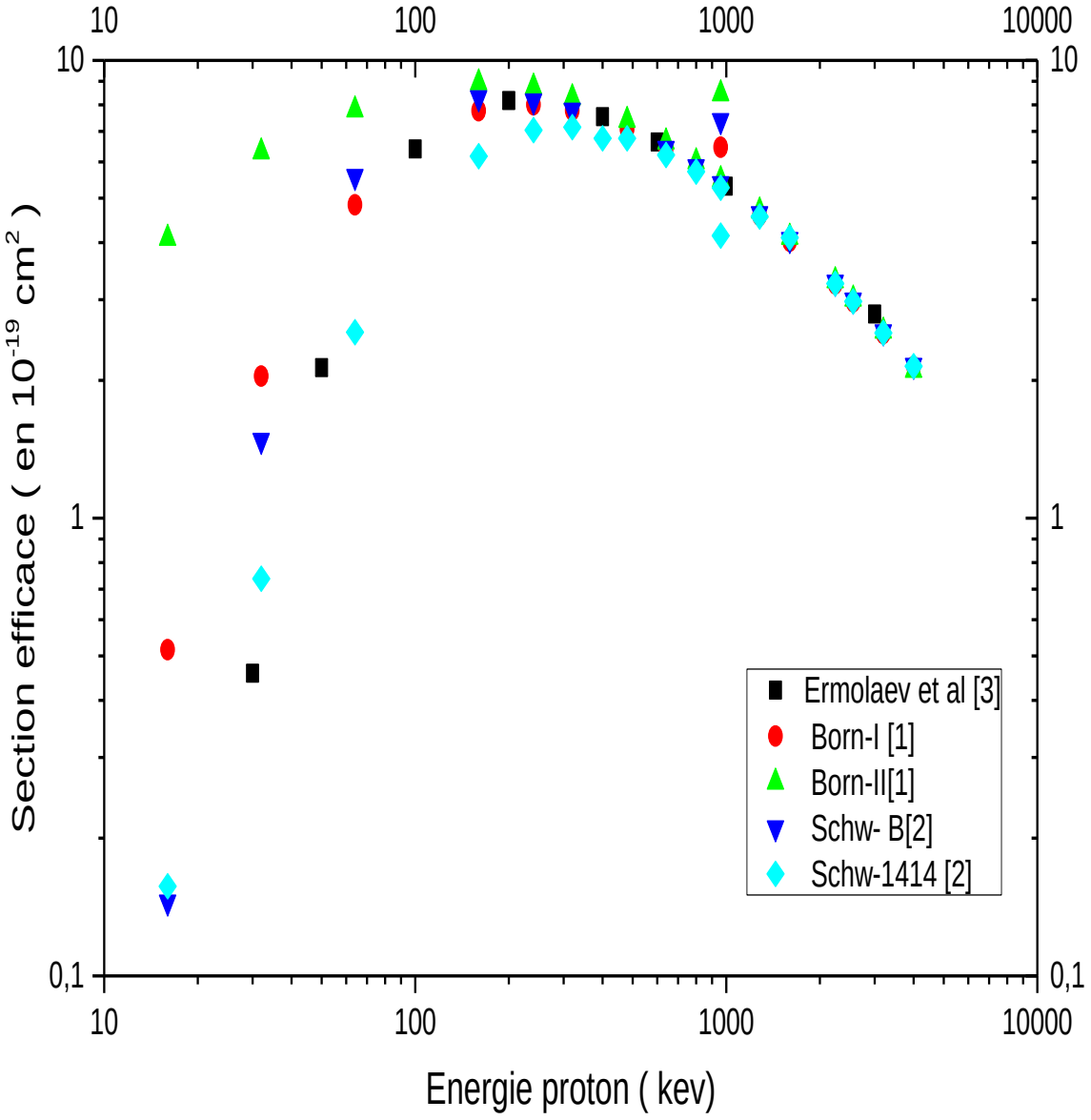
E(KeV)	Ermolaev et al TCAO-55[3]	Born-I[1]	Born-II	Schw-B[2]	Schw1414
16	—	0,170116	1,34373	0,0121531	0,07778362
30	0,094	—	—	—	—
32		0,976607	1,81532	0,1948188	0,1562234
40	0,267	—	—	—	—
50	0,613	—	—	—	—
64	—	3,000138	2,51405	1,312647	0,890496
75	1,85	—	—	—	—
96	—	4,463908	3,61034	2,644192	1,983638
100	3,06	—	—	—	—
150	4,66	—	—	—	—
160	—	5,91737	5,22731	4,539502	4,035838
200	5,47	—	—	—	—
240	—	6,4486	6,03906	5,55139	5,22187
300	5,96	—	—	—	—
320	—	6,46663	6,20598	5,84062	5,61729
480	—	6,08047	5,99615	5,77923	5,62474
640	—	5,60216	5,58664	5,44502	5,32989
800	—	5,16113	5,17486	5,07595	4,98708
960	—	4,77542	4,802	4,72944	4,65824
1280	—	4,15047	4,18418	4,14084	4,09235
1600	—	3,627	3,70478	3,67628	3,64117
2240	—	2,990406	3,0171	3,002338	2,98178
2560	—	20738774	2,76495	20753659	2,736514
3200	—	2,346735	2,36571	2,358561	2,347341
4000	—	1,99289	2,00759	2,00309	1,99543



الشكل (2-IV): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة (1S،2P) (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{3+} بواسطة تأثير بروتونات [1][2][3].

الجدول (IV-3): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوى n = 2 (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{3+} بواسطة تأثير بروتونات[1][2][3].

E(Kev)	Ermolaev et al TCAO-55[3]	Born-I[1]	Born-II	Schw-B[2]	Schw1414
16	—	0,5161444	4,092	0,14497	0,156894
30	0,458	—	—	—	—
32	—	2,041517	6,3192	1,478119	0,737647
50	2,13	—	—	—	—
64	—	4,834598	7,7988	5,577907	2,548746
75	—	—	—	—	—
960	—	6,462228	8,4589	7,379912	4,142448
100	6,4	—	—	—	—
160	—	7,76306	8,9358	8,278562	6,178778
200	8,17	—	—	—	—
240	—	7,99754	8,745	8,14688	7,04354
320	—	7,7754	8,2893	7,78069	7,14798
400	7,53	—	—	—	6,75696
480	—	7,066291	7,4012	7,0757	6,75696
600	6,63	—	—	—	—
640	—	6,388955	6,6356	6,415335	6,217071
800	—	5,814733	6,0079	5,850347	5,713123
960	—	5,334031	5,4911	5,373421	5,271454
1000	5,31	—	—	—	—
1280	—	4,582952	4,6946	4,622289	4,559042
1600	—	4,0247918	4,1093	4,060588	4,10173
2240	—	3,247918	3,3023	3,276118	3,252405
2560	—	2,965655	3,0132	2,992803	2,973671
3000	2,79	—	—	—	—
3200	—	2,530001	2,563	2,549787	2,537587
4000	—	2,140643	2,1045	2,155923	2,147829



الشكل (3-IV): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوى n = 2 (في $10^{-19}cm^2$) لأيون Be^{3+} بواسطة تأثير بروتونات [1][2][3].

IV-2-1-3- المناقشة:

نتائج المقاطع الفعالة للإثارة $\sigma_{exc}(nl)$، لـ Be^{3+} بتأثير البروتون لمجموعة الطاقات المحصورة بين 10KeV و 4MeV في الجداول (IV-1)، (IV-2) و(IV-3) الموافقة للأشكال على الترتيب (IV-1) (IV-2) و(IV-3).

هذه الجداول تمثل النتائج النظرية لطريقة الاقتران- قريب باستخدام تطوير تقريب في مركزينTCAO لـ Ermolaev وآخرون (1996) والحسابات التي قمنا بجمعها من الاعمال المنشورة في المراجع [1،2]:

Born - I(تقريب بورن من درجة الأولى) ، Born - II(تقريب بورن من درجة الثانية)، Schw- B (تقريب بورن و Schwinger) ، Schwinger خمسة حالات (Schw55) و Schwinger أربعة عشرة حالة (Schw1414).

بمقارنة المنحنيات في الأشكال (IV-1)، (IV-2) و(IV-3) التي تمثل على التوالي المقاطع الفعالة لإثارة في حالات 2S و2P و المستوى n=2 بدلالة طاقة بروتون للتقريبات Schw- B،Born-I،Born-II Schw1414، تقريب في مركزين TCAO لـ Ermolaev ومجموعته (1996) :

بالنسبة للحالة 2S نلاحظ أن نتائج المتوقعة لـ Schw1414 تقلل من قيم المقاطع الفعالة المتوقعة لـ TCAO-55حول حدها الأقصى عند طاقة 100KeV، أما بالنسبة لـ Born-I فهي في اتفاق مع جميع النتائج و نلاحظ اختلاف بالنسبة لـ Born-I، Schw-B في مجال طاقة اقل من حد اقصى للمقاطع الفعالة وتبقى في اتفاق جيد في بقية النتائج.

بالنسبة للحالة 2P نلاحظ أن قيم المقاطع الفعالة لـ Schw1414 في اتفاق جيد مع نتائج TCAO-55 حول حد الأقصى للمقاطع الفعالة موافقة لطاقة 300KeV، لكن نلاحظ اختلاف طفيف بالنسبة لبقية التقريبات في مجال طاقة أقل من حول حدها الاقصى، وتبقى في اتفاق جيد في بقية النتائج.

نلاحظ في حالة المستوى n=2، نجد من قيم المقاطع الفعالة الكلية للإثارة لـ Schw1414 أنها أقل بقليل من قيم لـ TCAO حول الحد الأقصى الموافق للطاقة 200KeV، أما في باقي طاقات تقريبا النتائج في اتفاق، من ناحية أخرى نلاحظ أن نتائج التي تنتج عن التقريب لـ Born-I، Schw-B وSchw1414 في اختلاف عن بعضها البعض في الطاقة القريبة حول الحد الأقصى من المقاطع الفعالة للإثارة، أما في بقية النتائج فهيا في اتفاق.

يمكن أن نفسر اختلاف طفيف في النتائج لـ Schw1414 عن تقريبات الأخرى لـ Ermolaev ومجموعته ، Born-I ، Born-II، Schw-B في مجال طاقة منخفضة قريبة من منطقة حد الأقصى لمقاطع الفعالة، حيث أن تقريب في مركزين TCAO لـErmolaev ومجموعته يتوقع أن في طاقات منخفضة يحدث التقاط إلى جانب الإثارة لذلك طور من دالة موجة الانتشار على حالات (أساس) القذيفة بإضافة إلى حالات الهدف، أما باقي تقريبات الأخرى فهي صالحة عند طاقات عالية ولهذا كلما زادت طاقة كلما كانت النتائج في اتفاق جيد في باقي المجال الطاقة.

IV-2-2- إثارة الذرة الهيدروجين H بواسطة تأثير بروتون عند طاقات متوسطة:

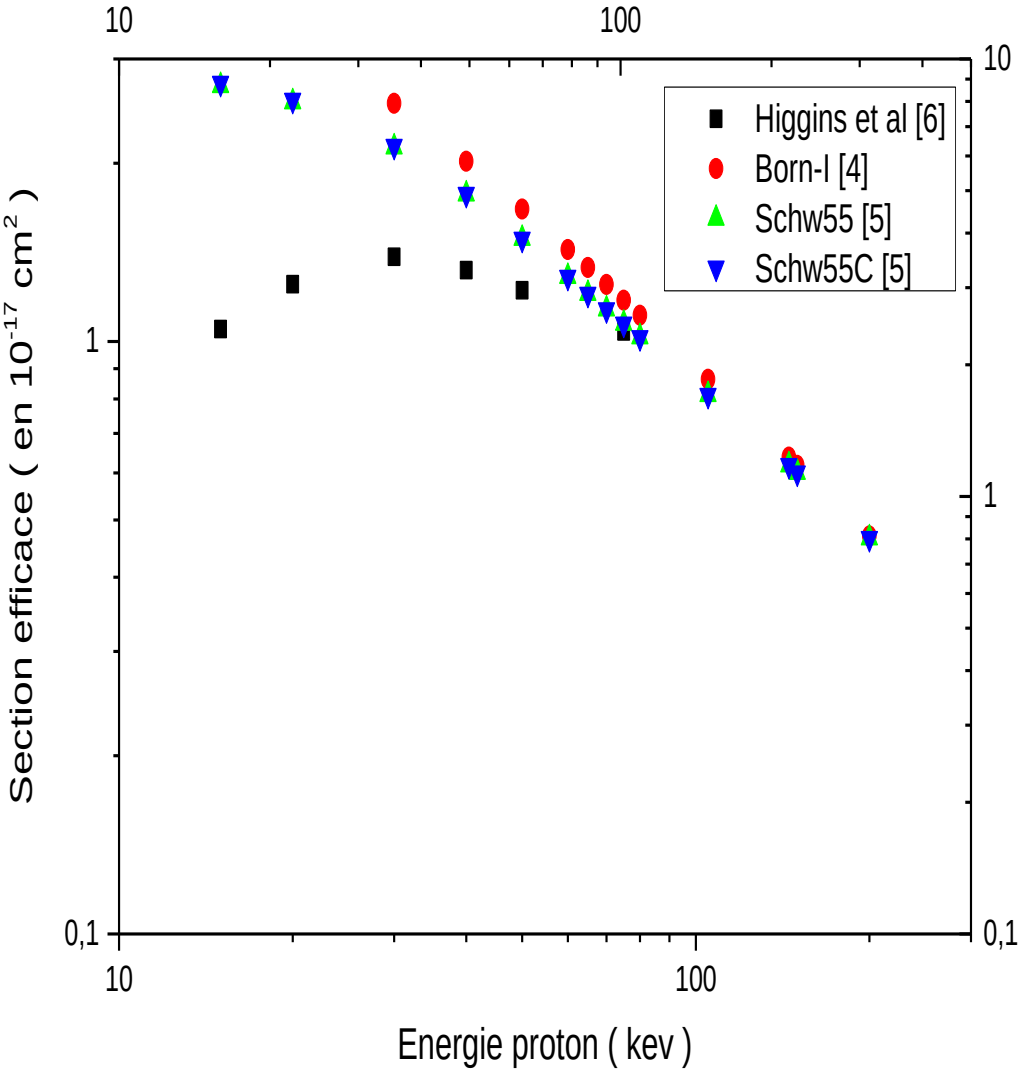
تتم المقارنة لردود الفعل لإثارة ذرة الهيدروجين بواسطة تأثير البروتون في مجموعة من الطاقات $H^+ + H\ (1S) \rightarrow H^+ + H\ (2S)$ و $H^+ + H\ (2P)$، والإثارة الكلية للمستوى n=2، تتم مقارنة نتائج نظرية التغيري من الأعمال المنشورة لـ B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet[5] مع البيانات التجريبية المتوفرة وغيرها من التنبؤات النظرية المسندة من المراجع [4][6-8].

IV-2-2-1- النتائج (المتحصل عليها من الأعمال المنشورة [4-8]):

قمنا بجمع البيانات المتحصل عليها من الأعمال المنشورة [4-8]، كما هو موضح في الجداول (IV-4) (IV-5) و(IV-6) التي تترجم باستعمال البرنامج Origine 9.1SR1 إلى منحنيات كماهي مبينة في الأشكال على التوالي (IV-4)(IV- 5)(IV -6).

الجدول (IV-4): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة 2S (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات[4،5،6].

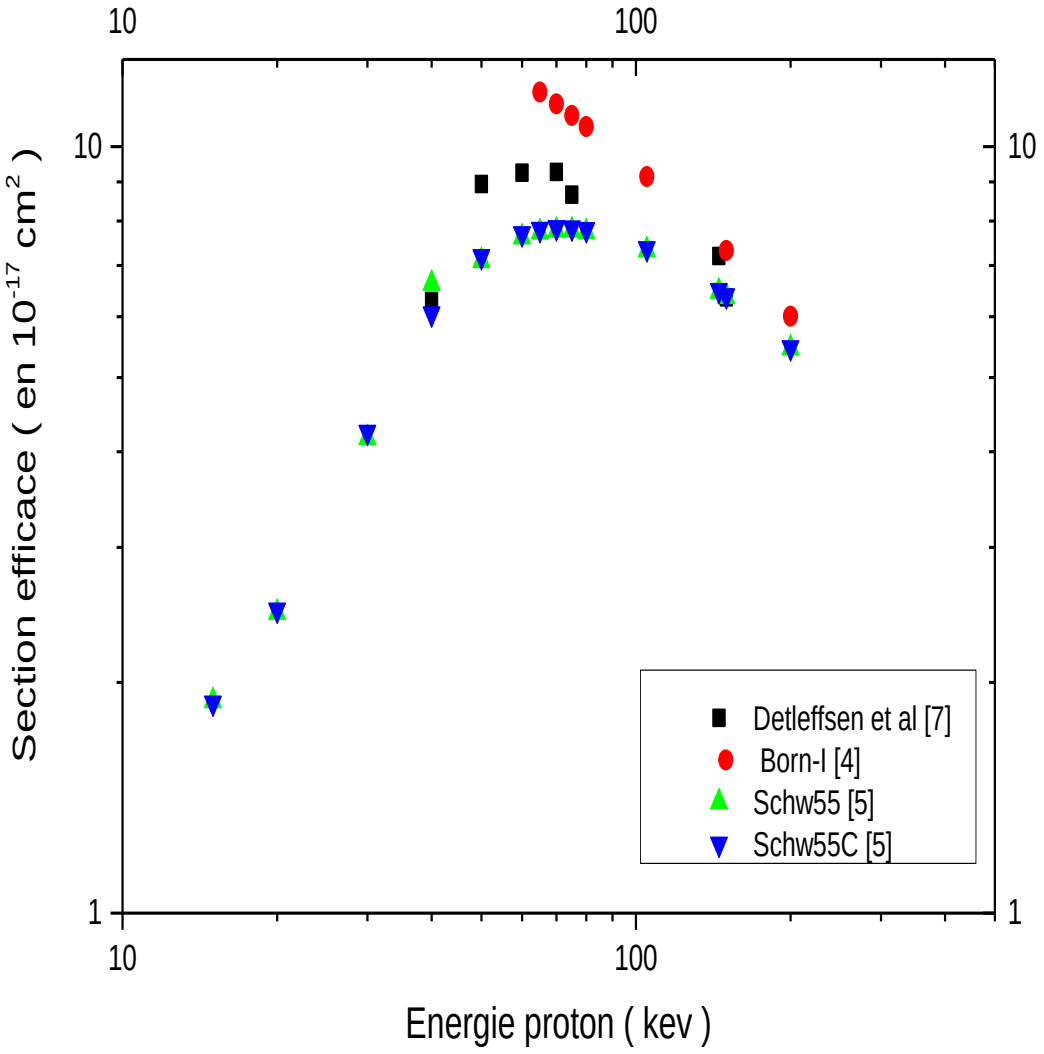
E(KeV)	Higgins et al [6]	Erreur	Born-I [4]	Schw55[5]	Schw55C [5]
15				2,70354	2,72963
20	1,05	0,0525		2,53897	2,55615
30	1,25	0,0625	2,5245	2,13105	2,13601
40	1,39	0,0695	2,0149	1,77441	1,77237
50	1,32	0,066	1,6738	1,49373	1,48857
60	1,22	0,061	1,4306	1,28768	1,28398
65			1,3335	1,2062	1,2025
70			1,2486	1,13517	1,13174
75			1,1739	1,07358	1,07061
80	1,04	0,052	1,1076	1,01831	1,01554
105			0,8635	0,813889	0,811575
145			0,63795	0,619136	0,617965
150			0,61778	0,601213	0,600138
200			0,46965	0,466182	0,465439



الشكل (IV-4): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة 2S (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات[4،5،6].

الجدول (IV-5): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة 2P (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات[7،5،4].

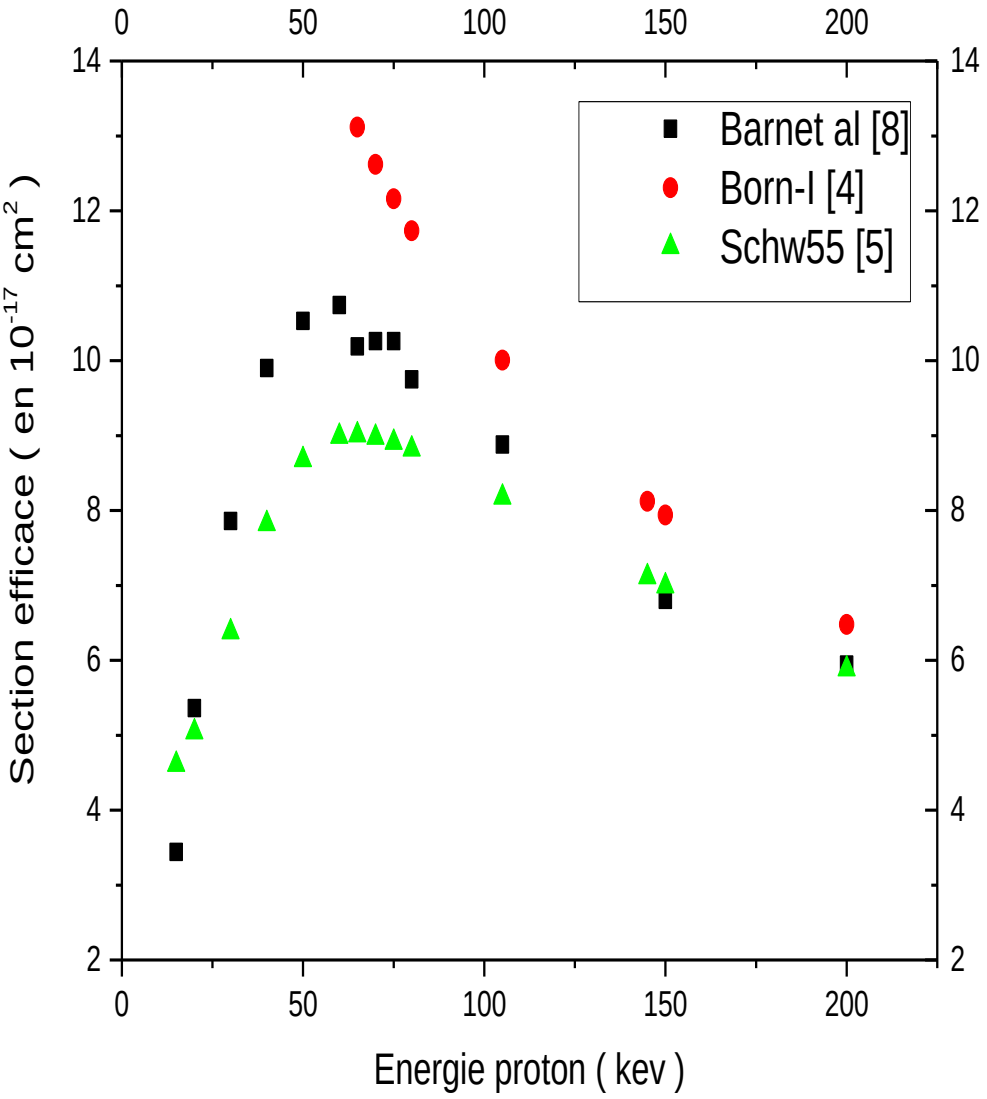
E(KeV)	Detleffsen et al [7]	Erreur	Born-I [4]	Schw55 [5]	Schw55C [5]
15				1,892752	1,88083
20				2,46938	2,487064
30				4,17066	4,24302
40	6,29	0,7548		6,63301	6,05254
50	8,94	1,0728		7,10102	7,18932
60	9,25	1,11		7,62541	7,70547
65			11,784	7,73464	7,80567
70	9,27	1,1124	11,371	7,78011	7,84369
75	8,66	1,039	10,986	7,77975	7,83652
80			10,627	7,74629	7,79843
105			9,1415	7,33177	7,36355
145	7,2	0,864		6,47489	6,49713
150	6,36	0,7632	7,3207	6,37206	6,39281
200			6,0094	5,45978	5,4688



الشكل (IV- 5): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة 2P (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات[4،5،7].

الجدول (IV-6): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوى n=2 (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات[8،5،4].

E(KeV)	Barnet et al [8]	Erreur	Born-I [4]	Schw55 [5]
15	3,44	0,4		4,61019
20	5,36	0,2		5,04321
30	7,86	0,5		6,37903
40	9,9	0,78		7,82491
50	10,53	0,83		8,67789
60	10,74	0,64		8,98945
65	10,19	0,25	13,11764	9,00817
70	10,26	0,64	12,62018	8,97543
75	10,26	0,6	12,16065	8,90713
80	9,75	0,84	11,735	8,8187
105	8,88	0,55	10,00498	8,17512
145			8,1231	7,1151
150	6,8068		7,93846	6,99295
200	5,9423	0,24	6,47874	5,88469



الشكل (6-IV): المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوى n=2 (في $10^{-17}cm^2$) لذرة الهيدروجين بواسطة تأثير بروتونات[4،5،8].

2-2-2-IV المناقشة:

نتائج المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوىn=2 لذرة الهيدروجين المبينة في الجداول(4-IV)، (5IV) و(6-IV) تتم مقارنة التقريبات النظرية لها مع البيانات التجريبية المتاحة اليها ايضا.

الحسابات التي تم تنفذيها في الأعمال المنشورة[5] تحتوي على خمس الحالات ($2P_{+1}$،$2P_{-1}$ $1S$، $2S$ ،$2P_0$) وتسمى هذه النتائج النظرية المتحصل عليها من مرجع سابق بطريقة التغيري مع مساهمة متوسطة للدالة المستمرة S55C وS55 دون هذه المساهمة (S يشير لشو ينغر و55 يشير إلى خمسة حالات).

بمقارنة المنحنيات في الأشكال (IV-4)، (IV-5) و(IV-6) التي تمثل على التوالي المقاطع الفعالة لإثارة في حالات 2P،2S والمستوىn=2 بدلالة طاقة بروتون المتمثلة في النتائج النظرية لـSchw55 - Schw55C Born-I مع البيانات التجريبية المتاحة:

الشكل (IV-4):

في الحالة 2S نلاحظ أن تقريب I-Born في توافق مع البيانات التجريبية لـ Higgins و مجموعته فوق 80KeV، ولكن توقعاته في الحصول على الحد الأقصى للمقاطع الفعالة للإثارة هي كبيرة جدا في حالة أقل من 70KeV، أما بالنسبة للمقاطع الفعالة لـ Schw55C وSchw55 نرى أنه لا يمكن تمييزه تقريبا على المجال الكامل من طاقات التأثير، كما هو الحال في جدول (IV-5) يشير إلى أن المساهمة المتوسطة لسلسلة مستمرة لعملية الإثارة كما يتنبأ بها التقريب التغيري ليس لها تأثير على النتائج للمقاطع الفعالة، نلاحظ عند طاقات تأثير أقل من 60KeV أن المقاطع الفعالة لـ Schw55 وSchw55C أكبر من توقعات التجربة وهي في اتفاق جيد مع تجربة فوق 60KeV (مع أخذ باعتبار نسبة خطأ التجربة).

الشكل (IV- 5):

في الحالة 2P نلاحظ أن تقريب I-Born يفوق نتائج التجربة لـ Detleffsen و مجموعته على مجال من طاقات التأثير، كما سبق القول أن المقاطع الفعالة لـ Schw55C وSchw55 لا تختلف كثيرا، أما المقاطع الفعالة لكل من Schw55C وSchw55 هي صغيرة جدا في حالة طاقات أقل من 30KeV، أما في بقية النتائج فهي في اتفاق معقول مع النتائج التجريبية(مع أخذ باعتبار نسبة خطأ التجربة).

التوقعات التي أدلى بها كل من Schw55C وSchw55 يمكن تفسيرها على أساس حدوث اقتران قوي بين الإثارة والالتقاط في مجال الطاقة المتوسطة، بالمقارنة مع الإثارة للهدف فإن الالتقاط في أي حالة للقذيفة هو ملحوظ في طاقات تأثير أصغر من50KeV أي أنه هناك التقاط الى جانب الاثارة وعليه فالمقاطع الفعالة في هذا المجال تختلف عن النتائج التجريبية، لهذا يتوقع من Schw55C وSchw55 توفير تنبؤات موثوقة بها للمقاطع الفعالة في أي مجال للطاقات.

الشكل (IV- 6):

المقاطع الفعالة للإثارة في حالة المستوىn=2 التي يتم الحصول عليها عن طريق جمع المقاطع الفعالة للإثارة في حالة2S و2P، بمقارنة البيانات التجريبية لـ Barnet ومجموعته مع الحسابات النظرية لـSchw55 وSchw55C، تظهر نتائج هذه الأخيرة انخفاض في مجال الطاقة من50 إلى80KeV بالنسبة للتجربة، لكن في المجال الذي يفوق 80KeV تكون في اتفاق جيد مع النتائج التجريبية، أما بالنسبة لنظرية Born-I فهي تفوق النتائج التجريبية(مع أخذ باعتبار نسبة خطأ التجربة).

IV-3- خلاصة

قمنا من خلال هذا الفصل بدراسة تطبيقية لهذا المبدأ التغيري لـ Schwinger بعد ما تطرقنا إلى الدراسة النظرية لهذا المبدأ التغيري في الفصول السابقة، ذلك من خلال جمع النتائج المتحصل عليها في الأعمال المنشورة التي قامت بتطبيق هذه الدراسة، قمنا بمقارنة هذه النتائج مع المعطيات النظرية والتجريبية وذلك بترجمتها إلى المنحنيات لاحظنا أن هذا المبدأ في توافق جيد مع هذه المعطيات مقارنة بتقريبات اخرى.

قائمة المراجع

[1]M. Remdani Meriem, " Section efficaces totales d'exitation des ions hydrogénoides du Beryllium par impact de protons ", Thése Master, universite Dr Tahar Moulay, Saida, 2017 P.27.

[2]Mr. Safi Kaddour,"Application du principe variationnel de schwinger à l'excitation des ions hydrogénaides Be^{3+} par impact de protons aux énergies de 16 Kev à 4 Mev ", université Abou – Bekr Belkaid, Thése Magister,Tlemcen, 2012 P.12-20.

[3]A.M. Ermolaev and AKorotkov," Close – Coupled calculation of $P+Be^{3+}$ ollisions at intermediate and high énegies,applications to JET plasmas " J. Phys. B: At. Mol. Opt . Phys. 29 , 1996 , P. 2797–2818(2803).

[4]Bouserhane Adnane," Contribution du continuum dans les sections efficaces d'excitation aux énergies intermédiaires" , Thése Docteur en Physiques, université Abou Belkaid, De Tlemcen, 2014, P. 56-110.

[5]B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet, "Variational approach to excitation of atomic hydrogen atoms by impacts of protons at intermediate velocities", Nuclear Instruments and Methods in physics Research .B. 251, P .66-72 .

[6]D P Higgins, J Geddes et H B Gilbody, Formation H(2S) atoms by excitation in 10-100 K eV of , J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29, 1996, P.1221.

[7]D. Detleffsen, M. Anton , A. Werner, et K-H Schartner ," Exitation of atomic hydrogen by protons and multiply charged ions at intermediate" , J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.27 ,1994, P.4207.

[8]C. F. Barnett , Oak Ridge, National Laboratory Report No 6086,1990.

خلاصة عامة

خلاصة عامة

تعتبر المعطيات الذرية الناتجة من حدوث احدى العمليات الذرية الأساسية في البلازما أدوات مهمة لتشخيص و نمذجة كل من الخصائص الإشعاعية للأيونات والذرات، وذلك من أجل دراسة وتحليل الأطياف ومعالجة انبعاثات البلازما، بلازما المخابر، الفيزياء الفلكية و تجارب الانصهار النووي الحراري.

من خلال هذه الدراسة قمنا بالتعرف على مختلف الآليات الذرية الأساسية التي تحدث في البلازما المتمثلة في التصادم، الإثارة، إعادة تركيب، التأين، وهي أهم العمليات التي تحدث في وسط البلازما، وتمتاز بمعطيات ذرية مهمة ومفيدة في تفسير و نمذجة العديد من مجالات فيزياء البلازما، وكذلك لفهم آليات التصادمات الذرية من خلال تأثير أيوني وهي تعتبر محل الاهتمام الرئيسي للباحثين في اختيار الطرق والنماذج النظرية المصممة لدراسة واختبار عمليات التصادم، تطرقنا لأهم الطرق التقريبية أو التنبؤات النظرية المختلفة لدراسة عمليات التصادم و المتمثلة في تقريب Born، تقريب VPS، تقريب CC، تقريب Glauber والتقريب التغيري، بسبب عدم كفاية وصعوبات تنفيذ التقريبات السابقة في حل العديد من المشاكل، ركزنا دراستنا على تقريب مبدأ التغيري لـSchwinger وهو ناجح في الحل العديد من المشاكل لدراسة عملية التصادم.

ولقد تمكنا ايضا من خلال هذه المذكرة للدراسة النظرية لمبدأ التغيري لـ Schwinger وذلك بالحصول على شكل السعة الانتقالية وعلاج هذه النظرية للإثارة المباشرة للذرات، مرتكزة أساسا في شكلها العام على الشكل الكسري للمبدأ التغيري لـ Schwinger في حساب المقاطع الفعالة الكلية للإثارة المباشرة للذرات، وذلك بتطبيق هذا التقريب بشكله الكسري لإثارة ذرة الهيدروجين وأيون الهيدروجين Be^{3+} في التصادم مع بروتونات بطاقات متوسطة، ولقد ابدت نتائج مقارنة هذا التقريب مع تقريبات اخرى توافق كبير مع النتائج التجريبية والمعطيات النظرية خاصة في مجال الطاقات المتوسطة.

وأخيرا يبدوا أن مبدأ التغيري لـ Schwinger أداة تحليلية قوية جدا لاختبار عملية الإثارة في التصادمات الذرية عند طاقات التأثير المتوسطة.

من كل ما سبق نأمل بأن تكون هناك دراسات أشمل في هذا الموضوع خاصة في تطبيقه على مختلف عمليات التصادم بين الجسيمات والعديد من الذرات، وكذلك دراسات اوسع لنماذج المحاكاة العددية .

الملحق

1. حساب سعة الانتقال التغيري:

لتحديد سعة الانتقال التغيري التقريبية $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ يتطلب تقييم فئتي عناصر المصفوفة[2،1]:

- عناصر مصفوفة من نوع $(i|V|j)$ يدعى I-Born.
- عناصر مصفوفة من نوع $(i|VG_T^+V|j)$ يدعى II-Born.

الأشعة $\langle i|$ و $|j\rangle$ هي حلول المعادلة Schrodinger eiconale مع هاملتون H_T للهدف.
حيث (| |) : يشير إلى أن التكامل يتم على المركبة Z والإحداثيات الإلكترونية.

1.1 حساب عناصر المصفوفةI-Born:

تم عرض عناصر المصفوفة I-Born في الفصل السابق كما يلي:

$$(i|V|j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle i|V|j\rangle \qquad (1.1)$$

وهكذا يمكننا التعبير عنها عن طريق إدخال علاقة تكامل تمثيل الاحداثيات في شكل :

$$(i|V|j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, e^{\frac{i\,\varepsilon_i-\varepsilon_j}{v}} w_{ij}(z\,،\vec{\rho}) \qquad (2.1)$$

حيث :

$$w_{ij}(z\,،\vec{\rho}) = \int d\vec{x}\,\varphi_i^*(\vec{x})\,V(\vec{R}،\vec{x})\varphi_j(\vec{x}) \qquad (3.1)$$

2.1 حساب عناصر المصفوفة II-Born:

الصعوبة الاساسية لـ Schwinger الشكلية تكون في تقييم عناصر المصفوفة $(i|VG_T^+V|j)$ التي تسمى العناصر من نوع بورن الثاني، حيث تمثيل غير صحيح لمؤثر G_T^+ يسبب خطأ في حساب عنصر المصفوفة هذا ومنه سعة الانتقال وبالتالي التنبؤات الفيزيائية، من أجل وصف مناسب للظواهر الفيزيائية يجب الحصول على التمثيل الكافي لـ G_T^+ لتقييم جيد لعناصر المصفوفة$(i|V\ G_T^+V|j)$.

يمكن لمؤثر G أن يكتب في شكل:

$$G_T^+(z\,،z') = -\frac{i}{V}\ exp\left(-\frac{i}{V}\int_{z'}^{z} H_T(\mu)\,d\mu\right)\theta(z-\ z') \qquad (4.1)$$

θ(z-z') دالة وحدة(Heaviside).

$$(j|V\ G_T^+V|i) = \left(-\frac{i}{V}\right)[\sum + \int\ ]_v H_{ji}^v \qquad (5.1)$$

حيث:

$$H_{ji}^v = \int_{-\infty}^{+\infty} dz\, exp\left(z\frac{i\varepsilon_j-\varepsilon_v}{V}\right) w_{jv}(\vec{\rho}،z\,)\int_{-\infty}^{z} dz'\, exp\left(z'\frac{i\,\varepsilon_v-\varepsilon_i}{V}\right) w_{vi}(\vec{\rho}\,،z'\,) \qquad (6.1)$$

الاشارة $\{\ \sum\ + \int\ \}$ يعني جمع على كامل طيف الهدف أي على جميع الحالات المنفصلة والمستمرة في تقييم $(i|V\ G_T^+V|j)$، كما تعطى من قبل العلاقة (5.1)، الجمع على مجموعة لا حصر لها من الدوال المتوسطة $|v\rangle$ خطوة أولى من أجل قيمة دقيقة لـ$(i|VG_T^+V|j)$ ، ولقد تم انجازها من خلال الاخذ بعين

الاعتبار مساهمة الطيف المنفصل الكامل للمجموعة $\{|v\rangle\}$، لحساب هذه المساهمة فان الشكل التقريبي لدالة الموجة الشعاعية $R_{vl}(x)$ يعطى كما يلي:

$$R_{vl}(x) \approx v^{-\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{2}{x}}J_{2l+1}(x\sqrt{8}) \qquad (7.1)$$

حيث v ، l و J_{2l+1} هي الكميات الرئيسية واعداد كمية على التوالي، بالنظر في العلاقة (4.1) فمن الواضح أنه بالنسبة للقيم العالية لـ v معظم المساهمات في $w_{jv}(\vec{\rho}\text{ ، }z)$ و$w_{vi}(\vec{\rho}\text{ ، }z)$ تأتي من قيم صغيرة لـ x لأن $\varphi_i(\vec{x})$ و $\varphi_j(\vec{x})$ تمثل الدوال المنخفضة، وعليه إن التعبير (7.1) يدل على أن $R_{vl}(x)$ يعتمد على v فقط ، و يجب أن تكون هناك قيمة لـ v_0 بحيث يمكن أن نكتب $v \geq v_0$.

$$H_{ji}^{(v.l)} \approx \left(\frac{v_0}{v}\right)^3 H_{ji}^{(v_0.l)} \qquad (8.1)$$

ويكتب التعبير (5.1) بطريقة أكثر وضوحا:

$$(j|\ V\ G_T^+ V\ |i) = \left(\frac{i}{v}\right)\sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\left[\sum_{v=l+1}^{+\infty}H_{ji}^{(v.l.m)} + \int_0^{+\infty}d\gamma\ \ H_{ji}^{(\gamma.l.m)}\right] \qquad (9.1)$$

حيث m هو العدد الكمي المغناطيسي و γ هو متغير مستمر في سلسلة متصلة، وفقا للـعلاقة (8.1) الجمع على v في العلاقة (9.1) تقريبا مساو لـ:

$$\sum_{v=l+1}^{+\infty}H_{ji}^{(v.l.m)} \approx \sum_{v=l+1}^{v_0}H_{ji}^{(v.l.m)} + v_0^3 H_{ji}^{(v_0.l.m)}\sum_{v=v_0+1}^{+\infty}\frac{1}{v^3} \qquad (10.1)$$

في أحدث تطبيقات طريقة التغيري وتقييم عناصر المصفوفة $(j|V\ G_T^+\ V|i)$ قد اقتصر على الطيف المنفصل بأكمله باستخدام العلاقة (9.1) مع v_0 عالية بما فيه الكفاية للحصول على نتيجة ممتازة، من المتوقع وجود مساهمات صغيرة من الطيف المستمر، يؤخذ بعين الاعتبار فاصلا من السلسلة المتصلة بالقرب من عتبة التأين، السلوك من H_{ji} أعلى قليل من هذه العتبة يمكن في الواقع تقييمه من خلال استمرار تحليلي لـ$H_{ji}^{(v.l)}$ الخاص بـ Rydberg، الاستمرار التحليلي يكون في استبدال v بـ $\frac{Z_T}{ik}$ في التعبير (8.1).

ومنه المساهمة في $(j|V\ G_T^+\ V|i)$ من السلسلة المتصلة سيتم تقييمها في مجال $[k_0\text{ ، }0]$ فوق العتبة التي يكون فيه استمرار التحليلي له معنى، القيمة من k_0 متعلقة بالقيمة v_0 التي تظهر في العلاقة (8.1)، يتم تحديد v_0 تلقائيا بواسطة التعليمات البرمجية $(v \geq v_0)$، في الواقع يتبين أن مساهمة السلسلة المستمرة أقل أهمية من مساهمتها في المجال$[k_0\text{ ، }0]$، ومنه الجمع على سلسلة مستمرة مقربة من التأين يمكن استخلاص عتبة من الجمع على الدوال Rydberg ، وعليه يمكن كتابة هذه الأخيرة كما يلي:

$$\sum_{v=v_0}^{+\infty}H_{ji}^{(v.l.m)} \approx \sum_{v=v_0}^{+\infty}H_{ji}^{(v_0.l.m)}\left(\frac{v_0}{v}\right)^3 \times\Delta\ v \approx H_{ji}^{(v_0.l.m)}\int_{v_0}^{+\infty}\left(\frac{v_0}{v}\right)^3 dv \qquad (11.1)$$

وباستخدام الاستمرار التحليلي المذكور أعلاه، يمكن أن نحدد العلاقة التالية:

$$H_{ji}^{(v_0.l.m)} \int_0^{+\infty} \left(\frac{v_0}{v}\right)^3 dv \;\rightarrow\; H_{ji}^{\left(\frac{Z_T}{ik_0}.l.m\right)} \int_{k_0}^{0} \left(\frac{k}{k_0}\right)^3 \left(\frac{-Z_T}{i}\frac{dk}{k^2}\right) \qquad (12.1)$$

$$\int_0^{\gamma_0} d\gamma\, H_{ji}^{(v_0'.l.m)} \int_{+\infty}^{v'_0} \left(\frac{v_0'}{v}\right)^3 \mathrm{d}v \approx -\frac{Z_T}{i} H_{ji}^{\left(\frac{Z_T}{ik_0}.l.m\right)} \int_0^{k_0} k\,\mathrm{d}k = \; iZ_T \frac{H_{ji}^{\left(\frac{Z_T}{ik_0}.l.m\right)}}{2k_0} \qquad (13.1)$$

حيث تكون مساهمة السلسلة مستمرة في مجال $[0، k_0]$.

قائمة المراجع

[1]M. Bouamoud, B. Lasri, J. Hanssen, " variational approach to in P+ Be^{3+} collisions at intermediate and high impact velocities", university of Tlemcen, B. P11, N 01, 2007, P. 91.

[2]B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet, "Variational approach to excitation of atomic hydrogen atoms by impacts of protons at intermediate velocities", Nuclear Instruments and Methods in physics Research B. 251, P.66 -72.

ملخص

إن الطرق النظرية المعتمد عليها في الدراسات الخاصة بالتصادمات الذرية والمرتكزة أساسا على المبدأ التغيري لشو ينغر من أهم الادوات الحديثة المعول عليها في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة للذرات عن طريق الأيونات في مجال الطاقة المتوسطة التي بإمكانها إعطاء نتائج جيدة خاصة فيما يتعلق بإثارة أيون الشبه هيدروجيني أو أيون الهيدروجين (Be^{3+} ، H...) في حالة تصادمه مع البروتون H^+ في المجال الطاقوي المتوسط المحدد. نعرض في هذه المذكرة الطريقة الجديدة المرتكزة على الشكل الكسري للمبدأ التغيري لشو ينغر النتائج المتحصل عليها بهذا المبدأ التغيري الحديث تتوافق مع النتائج النظرية والتجريبية في حال إثارة Be^{3+} و H إلى المستويات الجزئية (1S،2S) و (1S،2P) ثم الكلية (n=2).

كلمات مفتاحية: المبدأ التغيري لـ Schwinger، الإثارة الذرية، المقاطع الفعالة.

Résumé

Le formalisme de paramètre d'impact, les approches variationnelles basées sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger s'avèrent un outil d'investigation très puissant pour l'évaluation des sections efficaces totales d'excitation directe des ions hydrogénoides béryllium où hydrogène (Be^{3+}, H) par impact de protons H^+ aux énergies intermédiaires. Dans ce travail nous étudié une nouvelle approche basée principalement sur une forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger qui assure un bon accord entre les résultats théoriques et expérimentaux dans le cas d'excitation de Be^{3+} et H à des niveaux partiels (1S,2S) et (1S,2P) puis entières (n=2).

Mots clés: principe variationnel de Schwinger - excitation atomique - section efficace .