

# Гелийн Атомаас Протонд Цэнэг Дамжуулах

Г. Зоригт<sup>1\*</sup>, Л. Хэнмэдэх<sup>1</sup>, О. Лхагва<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

<sup>2</sup>Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Байгалийн Ухааны Салбар, Физикийн тэнхим

Энэхүү ажилд их энергитэй протон гелийн атомаас электрон шүүрэн сарних дифференциал огтлолыг хүчтэй потенциалын Борны хоёрдугаар эрэмбийн төхөлтөнд тооцооллоо. Сарнилын далайцыг тооцоолоход цөмүүдийн харилцан үйлчлэлийг нэмж оруулсанаар сарнилын дифференциал огтлол хэрхэн өөрчлөгдөж байгааг туршлагатай зэрэгцүүлэн авч үзэв. Тооцоолол тусч буй ион болох протоны энерги 1.3, 2.5, 5.0, 7.5 ба 12.5МэВ үед хийсэн туршилтын үр дүнтэй харьцуулахад минимумын байрлал урагшилж, Томас пик (хоёр дахь максимум)-ээс хойш хурдан буурч туршлагын утгаруу ойртож байна.

PACS number : 34.70e, 34.80.i, 34.50s, 31.30i, 71.15Ap

## I. ОРШИЛ

Хурдан ион атомыг мөргөж электроныг өөртөө шилжүүлэн авч сарних процесс нь фотосинтецийн болон химийн урвалд тохиолдоно. Химийн урвалын чухал үе шат болох цэнэг дамжуулах процессыг 100 гаруй жил судалж байгаа боловч зарим зүйл нь одоог хүртэл тодорхой бус хэвээр байна.

Орчин үед цэнэг дамжуулах процессын сарнилын дифференциал огтлол (СДО) -ыг хэмжсэн лабораторийн олон туршлагауд [1],[2] тавигдсан байна. Энэ ажилд протон гелийн атомтай мөргөлдөж цэнэг дамжуулах СДО-ыг хүчтэй потенциалын Борны II эрэмбийн ойролцоололд тооцооллоо. Цэнэг дамжуулах сарнилын далайцын тооцоололд протон электрон, цөм электроны харилцан үйлчлэл гол хандивыг өгөх боловч цөмүүдийн харилцан үйлчлэл нь тооцоолоход төвөгтэй ч сарнилын өнцөг ихсэхэд тодорхой хандив оруулдаг байна.

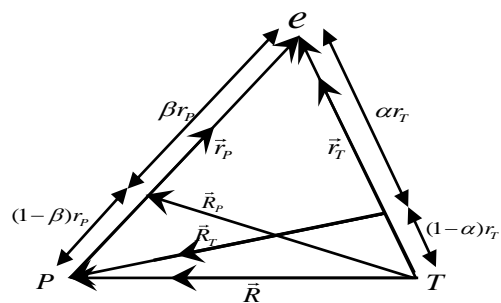
Өмнө хийгдсэн эрдэмтдийн тооцоололд хүчтэй потенциалын Борны ойролцоолол (ХПБО)-д бүрэн Гриний функцийг Кулоны Гриний функцээр авч тооцох нь сайн дөхөлт болох хэдий ч цөмүүдийн харилцан үйлчлэлийг Эйкнолын ойролцоололд бага гэж үзээд орхисон байна. Сум цөмийн цэнэг их үед К.Тоолберг, Р.О.Барачина, Ж.Масек [3] нар, бай цөмийн цэнэг их үед Ж.Масек, С.Алстон [4] нар тус тус сарнилын далайцын илэрхийллийг гаргасан байна. Эдгээр ажлуудад цөм цөмийн харилцан үйлчлэлийг тооцоогүй бөгөөд протон-устөрөгчийн хувьд адилхан үр дүнг өгч байна. Харин протон-гелийн хувьд бай цөмийн цэнэг их учир Ж.Масек, С.Алстоны сарнилын далайцын илэрхийллийг ашиглан тооцооллыг хийлээ. Тооцоололд цөмүүдийн харилцан үйлчлэлийг нэмж оруулсанаар СДО хэрхэн

өөрчлөгдөж байгааг тусч буй ион болох протоны энерги 1.3, 2.5, 5.0, 7.5 ба 12.5МэВ үед тооцоолон туршилтын үр дүнтэй харьцууллаа.

## II. ОНОЛ

Ион атомын мөргөлдөөний бодлого нь цөөн биеийн бодлого боловч харилцан үйлчлэгч бөөмийн тоо нэмэгдэхэд координатын тоо ихсэж олон давхар интегралуудыг бодох шаардлагатай болдог. Энэ асуудал нь процессийг бүрэн тооцоолох боломжыг хязгаарлах учир ойролцоолон тооцоолох аргыг эрэлхийлэхэд хүргэдэг байна.

Энэ ажилд тусч буй ион болох протон –P, Гелийн атомын нэг электрон-e, нэг электрон бүхий Гелийн ион буюу бай цөм-T гэсэн гурван биеийн бодлогыг авч үзнэ( зураг 1).



Зураг 1: Цэнэг дамжуулах процессийн [3,5] схем болон тэмдэглэгээ

Эхний ба эцсийн төлвийн харилцан үйлчлэлийн потенциалууд нь дараах байдлаар илэрхийлэгдэнэ.

$$\begin{aligned} V_i &\equiv V_{Pe}(r_p) + V_{PT}(R) \equiv -Z_p e^2 / r_p + Z_p Z_T e^2 / R \\ V_f &\equiv V_{Te}(r_T) + V_{PT}(R) \equiv -Z_T e^2 / r_T + Z_p Z_T e^2 / R \end{aligned} \quad (1)$$

\*Electronic address: g\_zorigt@yahoo.com

Цэнэг дамжуулах сарнилын далайц нь

$$A = \langle \psi_f | V_i + V_f G^+ V_i | \psi_i \rangle \quad (2)$$

$\psi_i, \psi_f$  нь анхны болон эцсийн төлвийн долгион функц

$$G^+ \equiv 1/(E - H + i\eta) \quad (3)$$

$G^+$  бүрэн грины оператор дахь Гамильтонианыг бичвэл

$$H = -\frac{1}{2\mu_i} \nabla_{R_i}^2 - \frac{1}{2m} \nabla_{r_i}^2 + V_{Te} + V_{Pe} + V_{PT} = H_0 + V_{Te} + V_{Pe} + V_{PT} \quad (4)$$

Энд  $\mu_i$  нь  $P$  ба  $Te$ -ийн мөргөлдөөний өмнөх эмхэтгэсэн масс,  $m$ -электроны масс.

Сарнилын далайцад анхны ба эцсийн төлөвт харгалзах потенциалуудыг орлуулбал

$$A_{if}^{B2} = \langle \psi_f | V_i + V_f G^+ V_i | \psi_i \rangle \quad (5)$$

$$A_{if}^{B2} = \langle \psi_f | V_{Pe} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{Te} G^+ V_{Pe} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{PT} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{Te} G^+ V_{PT} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{PT} G^+ V_{Pe} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{PT} G^+ V_{PT} | \psi_i \rangle \quad (6)$$

Дээрх илэрхийллээс харахад СДО нь Борны нэгдүгээр эрэмбийн 2, хоёрдугаар эрэмбийн 4 гишүүний нийлбэрээр тодорхойлогдож байна.

#### А. Хүчтэй потенциалын Борны II эрэмбийн ойролцоолол

Сарнилын далайцыг бодоход  $G^+$ -гриний функцийг бүрэн хэлбэрээр нь тооцоолоход хялбар биш учир  $T, e$ -ны харилцан үйлчлэл их үед  $V_{Te} \gg V_{Pe}$  буюу  $Z_T \gg Z_P$  байх хүчтэй потенциалын Борны ойролцооллын аргыг 1982 онд Ж.Масек, С.Алстон нар [4] боловсруулж цэнэг дамжуулах процессийн сарнилын бүрэн огтлол бодоход ашигласан байна. Энэ ажилд  $V_{PT}$  харилцан үйлчлэлийн потенциалыг Эйконалын ойролцоололд [6] долгион функцийн фазад тооцолж системийн Гамильтонианд орхиж тооцоолжээ. Энд үед  $G^+$  гриний функцийг

$$G_c^+ \equiv 1/(E - H_0 - V_{Te} + i\eta) \quad (7)$$

болон  $V_{Te}$  харилцан үйлчлэлийг тооцсон Кулоны гриний функцийг ашиглан  $G^+$ -г  $V_{Pe}$  потенциалаар Неиманы цуваанд задалж эхний гишүүнээр ойролцоолбол

$$G^+ \approx G_c^+ \quad (8)$$

Ж.Масек, С.Алстон [4] нарын ажилд (6) -ын  $V_{PT}$  харилцан үйлчлэл оролцоогүй эхний хоёр гишүүнийг тооцсон сарнилын далайцыг авч

$$A_{SPB} = \langle \psi_f | V_{Pe} + V_{Te} G_c^+ V_{Pe} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | (1 + V_{Te} G_c^+) V_{Pe} | \psi_i \rangle \quad (9)$$

Сарнилын далайцыг дараах байдлаар илэрхийлсэн байна.

$$A_{SPB} = -4\pi Z_p \int d^3 p \tilde{\phi}_f^*(\vec{p}) \frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2} \langle \psi_{\vec{p}+m\vec{v},c}^- (\vec{r}) | e^{i(\vec{p}-\vec{k})\vec{r}} | \phi_i(\vec{r}) \rangle \quad (10)$$

$\vec{K}$  нь сум ионд шилжүүлсэн импульс [5].

### III. ТООЦООЛОЛ БА ҮР ДҮН

Сарнилын далайцын (6) илэрхийлэл дэх цөмүүдийн харилцан үйлчлэл болох  $V_{PT}$  потенциал орсон 2, 3-р нэмэгдэхүүнийг авбал.

$$A_{SPB}^{PT} = \langle \psi_f | V_{PT} + V_{Te} G_c^+ V_{PT} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | (1 + V_{Te} G_c^+) V_{PT} | \psi_i \rangle \quad (11)$$

Дээрх илэрхийлэлийг Ж.Масек, С.Алстон нар [4] -тай адилхан хувиргалт хийн тооцоолоход

$$A_{SPB}^{PT} = +4\pi Z_p Z_T \int d^3 p \tilde{\phi}_f^*(\vec{p}) \frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2} \langle \psi_{\vec{p}+m\vec{v},c}^- (\vec{r}) | e^{-i(\vec{p}-\vec{k})\frac{1-\alpha}{\alpha}\vec{r}} | \phi_i(\vec{r}) \rangle \quad (12)$$

болон ба энд  $\alpha \approx 1$  гэж ойролцоолбол дараах илэрхийлэл гарна.

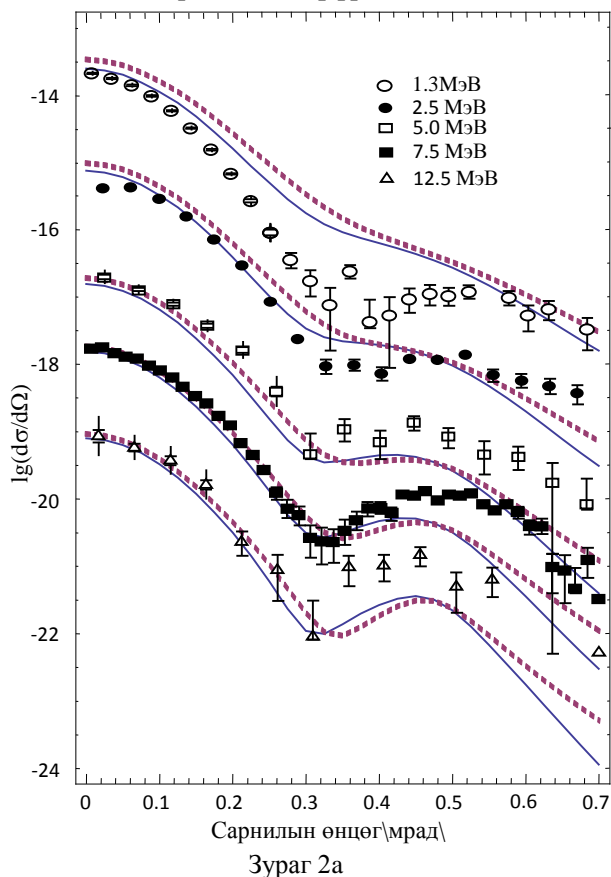
$$A_{SPB}^{PT} = +4\pi Z_p Z_T \int d^3 p \tilde{\phi}_f^*(\vec{p}) \frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2} \langle \psi_{\vec{p}+m\vec{v},c}^- (\vec{r}) | e^{0\vec{r}} | \phi_i(\vec{r}) \rangle \quad (13)$$

Сарнилын далайц (10), (13)-н координатын интегралыг нь А.Нордсекийн [9] интегралыг ашиглан аналитик шийдийг авч импульсээрх интегралыг тоон утгаар интегралчилан тооцооллоо. Гелийн атомаас протон электрон шилжүүлэн авах сарнилын далайц  $PT$  харилцан үйлчлэл тооцоогүй (10) ба  $PT$  харилцан үйлчлэл тооцсон далайцыг (10), (12)-н нийлбэрээр авч гелийн 1s төлвийн долгион функц  $\phi_i$ -ийг нэг экспоненттой (зураг 2a),  $\phi_i$ -ийг хоёр экспоненттой (зураг 2b) хэлбэрүүдэд тус тус тооцоолыг хийж [10] туршилтын үр дүнтэй харьцуулсан үр дүнг гаргалаа.

Зураг 2. Гелийн 1s төлвийн долгион функцийг а. нэг экспоненттой хэлбэрээр авахад б. хоёр экспоненттой хэлбэрээр авахад протоны энерги 1.3, 2.5, 5.0, 7.5, 12.5 Мэв байхад харгалзах графикууд дээрээс доошлох дарааллаар байрлаж байна. Гелийн үндсэн төлвөөс протон 1s төлөвт электрон шилжүүлэн авах СДО-г (атомын нэгжээр) сарнилын өнцгөөс хамааруулан үзүүлэв. Тэмдэгүүд нь туршлагын үр дүн ба алдааны хамт [10], тасархай шугам нь хүчтэй потенциалын Борны 2-р эрэмбийн дөхөлтөнд  $PT$  харилцан үйлчлэл тооцоогүй үед, нарийн шугамаар дүрслэсэн муруй нь хүчтэй

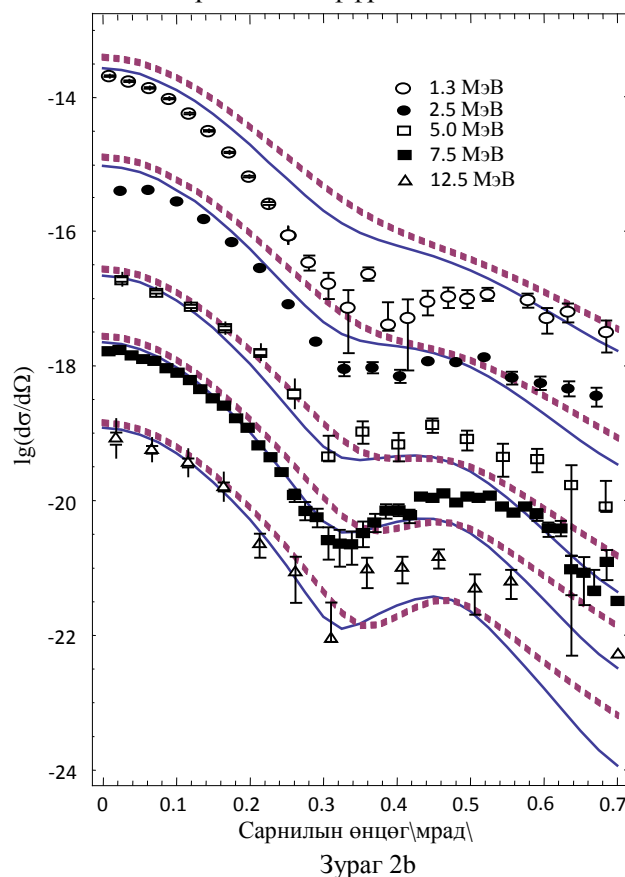
потенциалын Борны 2-р эрэмбийн дөхөлтөнд РТ харилцан үйлчлэл тооцсон үр дүн.

Сарнилын дифференциал огтлол



Зураг 2a

Сарнилын дифференциал огтлол



Зураг 2b

#### IV. ДҮГНЭЛТ

Зурагаас харахад протоны энерги ихсэхэд тооцоолол туршлагын үр дүнтэй илүү ойролцоо болж байна. Тооцоололын утга кинематик максимумын (хамгийн их утга) орчим туршлагаас арай их утга өгч байгаа ч гелийн 1s төлвийн долгион функцийг нэг экспоненттой

хэлбэрээр авахад протоны энерги их үед илүү дөхжээ. Харин Гелийн 1s төлвийн долгион функцийг хоёр экспоненттой хэлбэрээр авахад хоёрдугаар максимумын (Томас пикийн) байрлал туршлагын утгуудад сайн дөхсөн байна. Тооцоололд РТ харилцан үйлчлэлийг нэмж тооцоолоход минимумын байрлал урагшилж, Томас пикээс хойш илүү хурдан буурч туршлагын утгаруу ойртож байна.

[1] Eichler.J, Lectures on ion atom collisions 2005  
 [2] E. Ghanbari Adivi, M. J. Brunger, M. A. Bolorizadeh,, and L. Campbell Physical review A 75, 022704 2007  
 [3] K.Taulbjerg, R.O.Barrachina, J.Macek Physical review A, 1990  
 [4] J.Macek, S.Alston Physical review, 1982  
 [5] R.Shakeshaft, J.M.Wadehra, Physical review A, 1980  
 [6] Bransden, McDowell Charge exchenge and theory of ion atom collisions(335)  
 [7] McDowell M R C, Coleman J P. Introduction to the theory of ion-atom collisions,1970

[8] Gulyas L, Igarashi A, Fainstein P D and Kirchner T 2008 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 41 025202.  
 [9] A.Nordsieck . Physical review vol 93 4 1954  
 [10] Magnus Gudmundsson. Heavy particle Interference anddiffraction in fast electron transfercollisions 2011

