بررسی تاثیرمشخصه ی یونی بر شدت پرتوهای ایکس کائون متوقف شده در پلیمر آلی کاپتون($C_{22}H_{10}O_5N_2$)

رئیسی،مرتضی ; اسماعیلی،جعفر; عابدینی،سعیده

دانشگاه شهرکرد، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

چکیده:

در این مقاله با استفاده از مدل مولکول‌های بزرگ مزونی و شبیه سازی مونت کارلو دینامیک آبشاری نسبت بهره گذارهای ایکس ناشی از کائون های متوقف شده در پلیمر آلی کاپتون مطالعه شده است. مقادیر مشخصه‌های یونی هر پیوند از دو مدل پائولی و مولیکن تعمیم یافته به دست آمده است. نتایج مدل مولیکن نسبت به مدل پائولی به تجربه نزدیکتر است. عدم تطابق در بعضی نسبت ها ناشی از عدم قطعیت در پارامترهای مدل گیراندازی مانند مشخصه یونی و توزیع اندازه حرکت زاویه‌ای اولیه اتمهای کائونی در فرایند شبیه سازی است. در مورد دوم توزیع اولیه اندازه حرکت زاویه ای مداری به پیکربندی الکترونی بستگی دارد.

کلمات کلیدی: *پرتوهای ایکس، گیراندازی اتمی، اتم کائونی ، دینامیک آبشاری*

مقدمه :

هدف اصلی فیزیک هسته ای نظری مطالعه برهمکنش قوی هادرون – نوکلئون وهادرون- هسته می‌باشد. دو روش عمده برای انجام این کار وجود دارد. روش در پرواز[۱] و روش در توقف[۲]. در روش اول هادرون در انرژی های زیاد با هسته برخورد داده می‌شود. با تحلیل سطح مقطع های اندازه گیری می‌توان به مکانیسم های واکنش هادرون-هسته در انرژی های زیاد پی برد. اما در روش در توقف، باریکه هادرون فرودی در ماده کند می‌شود سپس تشکیل یک اتم هیدروژن گونه می‌دهد(که اتم هادرونی نامیده می شوند). با تحلیل طیف ایکس این اتمها در ترازهای پایینی (گذارهای پر شدت) می‌توان اطلاعاتی در مورد برهمکنش قوی در انرژی های پایین به دست آورد[۱]. در ترازهای میانی (گذارهای کم شدت) می‌توان در مورد مکانیسم گیراندازی اتمی و دینامیک آبشاری این سیستم ها به طور خاص پرداخت[۲و۳]. مورد دوم موضوع بحث در اینجا است.

---

[۱] In-flight
[۲] In-stopped

در روش در توقف، شدت طیف ایکس اتم های هادرونی وابسته به دو عامل با احتمال متفاوت می‌باشد. در مرحله اول احتمال تشکیل اتم هادرونی است که بستگی به نوع فاز ماده هدف و ساختار ملکولی آن دارد. مدلهای اتمی مختلفی برای محاسبه احتمال گیراندازی ارائه شده است اما از میان آنها مدل مولکول بزرگ مزونی[۳] است که با نتایج تجربی به دست آمده سازگاری بهتری دارد[۴]. در بخش ۲ به این مدل اشاره خواهد شد. پس از تشکیل اتم کائونی به دلیل ناپایدار بودن آن طی فرایندهای اتمی مختلفی شروع به گسیل کردن پرتوهای ایکس می‌کند که شدت آنها وابسته به رقابت بین این فرایندها است. برای تعیین یا پیش بینی بهره هر گذار تابشی ایکس باید از شبیه سازی مونت کارلو برای تعیین جمعیت هر تراز استفاده کرد. خلاصه ای از این شبیه سازی در بخش ۳ ارائه خواهد شد اما جزئیات بیشتر در مرجع [۵] بیان شده است.

در اینجا طیف ایکس اتمهای کائونیک کربن ، نیتروژن واکسیژن در پلیمر آلی کاپتون با ساختار مولکولی $C_{22}H_{10}O_5N_2$ که در کالیبره کردن آشکارساز پرتوهای x مربوط به سیستم های هادرونی به کار می‌رود، مورد بررسی قرار گرفته است. بهره گذارهای با n=۸ تا n=۵ پرتوهای x در اتم های کربن ، نیتروژن و اکسیژن که بیشتر از سایر گذارها بوده است استخراج شده است[۶]. به دلیل اینکه احتمال انتقال کائون از هیدروژن به سایر اتمها زیاد است بنابراین شدت پرتوهای ایکس بسیار کم و قابل آشکارسازی نیست. نسبت بهره ها می‌تواند محکی باشد برای درستی مدل های گیر اندازی و دینامیک آبشاری اتمی . هدف از این بررسی تعیین بهره نظری هر گذار به ازای یک کائون متوقف شده در یک مولکول کاپتون می‌باشد. که این کمیت خود حاصلضرب احتمال گیراندازی کائون در یک نوع اتم در بهره گسیل یک نوع گذار خاص به ازای یک کائون متوقف شده در همان اتم می‌باشد.

نسبت احتمال گیراندازی اتمی:

دینامیک گیراندازی هادرون‌ها در اتمهای محیط خود یکی از بحث های مهم در حوزه فیزیک اتمی است که بعضی از جنبه های آن هنوز روشن نیست، چرا که ساختار شیمیایی و فاز ماده بر روی احتمال گیراندازی هادرون با هر یک از اتمهای محیط به شدت تاثیر می گذارد. اگر این گیراندازی در یک ساختار مولکولی صورت گیرد مقدار احتمال گیراندازی در هرنوع اتم به نوع پیوند، تعداد الکترون های به اشتراک گذاری شده و توزیع فضایی آنها نیز وابسته خواهد شد[۷ و۸].

در مدل مولکولهای بزرگ مزونی یک ترکیب دوتایی به صورت $(Z_1)_k(Z_2)_l$ در نظر گرفته شده و گیراندازی می تواند به صورت تشکیل مستقیم یک مدار هادرونی به دور هسته توسط الکترون های مقید n یا به صورت

[۳] Mesonic Large Molecule Model

تشکیل یک مدار مولکولی توسط الکترون های ظرفیت V درناحیه ای بین دو اتم رخ دهد.نسبت احتمال گیراندازی در دو اتم به صورت:

$$A(Z_1/Z_2)=\frac{n_1+2\omega_1 v_1}{n_2+2\omega_2 v_2} \quad (1)$$

است که درآن ω_1 و ω_2 به ترتیب احتمال گذار کائون از مدار مولکولی به مدار اتمی اتم ۱ و اتم ۲ است. ($\omega_1+\omega_2=1$)اما این احتمال خود وابسته به کمیت دیگر p است:

$$\omega_1=\frac{p_1 Z_1^2}{p_1 Z_1^2+p_2 Z_2^2} \quad (2)$$

پس از گیراندازی در مدار مولکولی تفاوت الکترونگاتیوی اتم های پیوند باعث به وجود آمدن عدم تقارن در توزیع فضایی الکترون های ظرفیت بین دو اتم می‌شود. در نتیجه احتمال اینکه به لحاظ فضایی مدار مولکولی به اتم الکترونگاتیوتر نزدیک باشد بیشتر است.این احتمال برای اتم ۱ و ۲ به صورت:

$$p_1=(1-\sigma)/2 \quad \text{و} \quad p_2=(1+\sigma)/2 \quad (3)$$

بیان می شود. σ مقدار مشخصه ی یونی پیوند و معیاری از تفاوت الکترونگاتیوی دواتم است. یکی از مدلهای عمومی ، مدل پائولی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\sigma_P=c(x_1-x_2) \quad (4)$$

x_1 و x_2 الکترونگاتیوی اتم ۱ و۲ می‌باشد. این رابطه بر اساس میزان قطبی بودن یک پیوند در ملکول . این مدل بیشتر برای ملکولهای دو اتمی به کار می‌رود. اما برای مولکول های بیشتر از ۳ اتم و بیشتر دیگر معتبر نیست. چون درصد یونی بودن هر اتم در ملکول وابسته به میزان نزدیکی الکترونهای ظرفیت به آن اتم دارد. این نزدیکی مستقیما با کسر بار که به هر اتم وابسته است رابطه دارد.

جکسون از یک تعریف تعمیم یافته توسط مولیکن برای تعیین مشخصه یونی بعضی مولکولهای پیچیده آلی استفاده کرده است[۹]. که ما نیز از این تعریف برای ملکول کاپتون بهره می‌بریم . اگر Q_1 و Q_2 به ترتیب بار کسر اضافی در دو اتم ۱و ۲ و N_{12} تعداد پیوند بین این دو اتم باشد ، مشخصه یونی به صورت زیر خواهد بود

$$\sigma_M=\frac{1}{N_{12}}(\sum_1 Q_1-\sum_2 Q_2) \quad (5)$$

در اینجا جمع بر روی پیوندهای مشابه که یک طرف آن اتم ۱ و طرف دیگر اتم ۲ قرار دارد صورت می‌گیرد. برای تعیین میزان کسر بار هر ملکول می‌توان از محاسبات دینامیک ملکولی کلاسیکی یا کوانتومی استفاده کرد. در این روش مقدار بار هر اتم در ملکول به گونه ای تعیین می‌شود که انرژی سیستم کمینه شود وملکول از لحاظ بار خنثی باشد. با استفاده از نرم افزار گاوسین که محاسبات دینامیکی ملکولی انجام می دهد مقادیر

بار تعیین شده است. در جدول ۱ مقادیر σ که از معادله ۵ و ۶ به دست آمده است برای انواع پیوند آورده شده است. در مورد پیوند بین اتم های کربن نیازی به محاسبه ی مشخصه یونی پیوند نداریم چرا که گیراندازی درمدار مولکولی این پیوندها در هر صورت منجر به گیر اندازی در اتم C خواهد شد ($\omega=1$).

جدول :۱ مقادیرمشخصه های یونی پیوندهای مختلف در ترکیب کاپتون.

پیوند	C–H	C–N	C–O	C=O
σ_M	۰/۱۷۰	۰/۴۴۸	۰/۳۲۶	۰/۶۵۶
σ_P	۰/۰۴	۰/۰۶	۰/۲۲	۰/۲۲

با توجه به جدول ۱ و استفاده از معادلات ۱ و ۲ مقادیر نسبت احتمال محاسبه $A(\frac{Z_1}{Z_2})$ برای هر دو مدل پائولی و مولیکن در جدول ۲ نشان داده شده است.

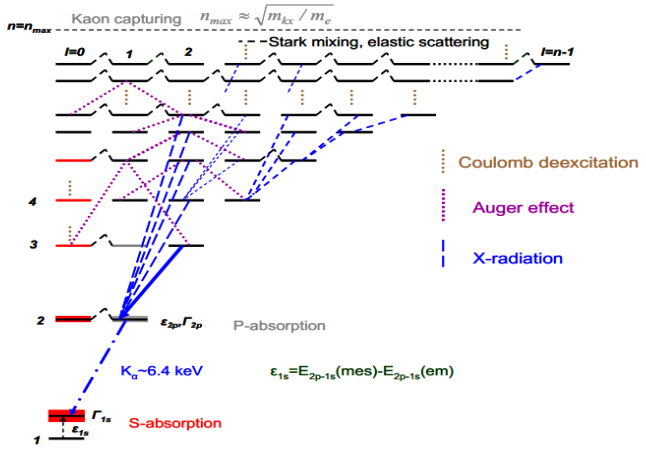
جدول :۲ مقادیرمحاسباتی نسبت های احتمال گیراندازی به ازای هر زوج اتم.

Z_1/Z_2	C/N	C/O	N/O
مدل پائولی	۰/۸۹۷	۰/۷۶۷	۰/۸۸۵
مدل مولیکن	۰/۶۷۵	۰/۶۱۲	۰/۹۰۶

دینامیک گذار های اتمی

پس از برهمکنش الکترومغناطیسی کائون با الکترونهای مولکول گیراندازی آن توسط یکی از اتم ها سرانجام اتم کائونیک تشکیل می‌شود که به شدت برانگیخته است. محتمل ترین ترازی که ذره اگزوتیک پس از گیر اندازی درآن قرار میگیرد برابر است با $n=\sqrt{\mu/m_e}$. این مقدار برای کائون برابر ۲۵ است. توزیع تکانه زاویه ای این ذرات پس از گیراندازی معمولا آماری و به صورت $p(l)=2l+1$ در نظر گرفته می شود. سپس ذره که اکنون در یک تراز به شدت برانگیخته قرار دارد توسط فرآیند های آبشاری همچون گذار اوژه و گذار تابشی انرژی‌اش را از دست داده و به ترازهای پایین واانگیخته می شود. گذارهای تابشی تمایل دارند تا جایی که ممکن است بیشترین انرژی ممکن را داشته باشند و تغییر Δn در عدد کوانتومی اصلی بیشینه است بنابراین گذارهای تابشی مدارها با بیشترین تکانه زاویه ای ممکن ($l=n-1$) را اشغال می‌کنند.گذارهای اوژه

برعکس Δn کمینه را ترجیح می‌دهند و در ترازهای برانگیخته ی بالا غالب تر هستند. علاوه بر این دو فرایند پدیده پر شدن الکترون ها در لایه های اتمی از باند ظرفیت یا رسانش نیز وجود دارد[۱۰]. هنگام وانگیختگی اتم کائونی هر یک از فرایند های آبشاری در رقابت با دیگر فرایند هاست و شدت پرتوهای x که در نهایت به دست می آید وابستگی شدیدی به این رقابت ها دارد(شکل ۱).



شکل ۱: نمایی از گذارهای آبشاری اتمی در اتم کائونی.

احتمال گذار هر فرایند را می‌توان با روش آماری مونت کارلو تعیین کرد.سپس بهره یک گذار خاص یعنی تعداد فوتونهای گسیل شده با انرژی یکسان به ازای یک کائون فرودی را محاسبه کرد . نتایج به دست آمده از این شبیه سازی درجدول ۳ نشان داده شده است.

جدول ۳ :مقادیر شبیه سازی شده نسبت بهره‌ها به ازای یک کائون متوقف شده در هر اتم کائونی.

نسبت	$\frac{y^{KC}_{۵\to۴}}{y^{KN}_{۵\to۴}}$	$\frac{y^{KC}_{۶\to۵}}{y^{KN}_{۶\to۵}}$	$\frac{y^{KC}_{۶\to۵}}{y^{KO}_{۶\to۵}}$	$\frac{y^{KC}_{۸\to۶}}{y^{KO}_{۸\to۶}}$
بهره	۰/۸۳۱	۰/۷۵۱	۰/۶۲۷	۰/۷۳۹

نسبت بهره های نهایی به ازای یک کائون دریک مولکول کاپتون به صورت ضرب مقادیر جدول ۲ درجدول ۳ به دست می آید .این مقادیردرجدول ۴ به همراه مقادیرتجربی نشان داده شده است.

جدول ۴ : مقادیرنسبت بهره های نهایی به ازای یک کائون متوقف شده دریک مولکول کاپتون

نسبت	$\frac{y_{۵\to۴}^{KC}}{y_{۵\to۴}^{KN}}$	$\frac{y_{۶\to۵}^{KC}}{y_{۶\to۵}^{KN}}$	$\frac{y_{۶\to۵}^{KC}}{y_{۶\to۵}^{KO}}$	$\frac{y_{۸\to۶}^{KC}}{y_{۸\to۶}^{KO}}$
بهره نظری (پائولی)	/۷۴۵	/۶۷۳	/۴۸۰	۰/۵۶۶
بهره نظری (مولیکن)	۰/۵۶۱	۰/۵۰۷	۰/۳۸۳	۰/۴۵۲
بهره تجربی	۱/۲۳±۰/۳۵	۰/۸۴±۰/۶	۰/۲۸±۰/۰۹	۰/۲۳۸±۰/۱۹۲

نتایج و جمع‌بندی:

دراین تحقیق نسبت بهره گذارهای ایکس در اتم های کائونیک کربن ، نیتروژن و اکسیژن در پلیمر آلی کاپتون در دو گام، اول با استفاده از مدل ملکولهای بزرگ مزونی و دوم شبیه سازی دینامیک آبشاری محاسبه شده است . مدل ملکولی بزرگ مزونی وابسته به مشخصه یونی هر پیوند در ترکیب میباشد. از دو مدل پائولی (معادله ۴)و مولیکن تعمیم یافته (معادله ۵) استفاده شده است . در مدل دوم در ابتدا مقادیر بار کسری هر اتم با استفاده از روش دینامیک ملکولی توسط نرم افزار گاوسین به دست آمده است. سپس احتمال گیراندازی در هر نوع اتم با توجه به تعداد الکترونهای موثر در مغز و ظرفیت اتم در پیوند به دست آمده است . در گام دوم با روش مونت کارلو شدت به ازای هر اتم و به ازای یک کائون متوقف شده برای گذارهای مورد نظر پیش بینی شده است. با ضرب مقادیر احتمال گیراندازی و بهره به ازای یک کائون به ازای یک اتم مقدار بهره نظری محاسبه و با مقادیر تجربی مقایسه شده است. نتایج مدل مولیکن نسبت به مدل پائولی به تجربه نزدیکتر است. عدم تطابق در بعضی موارد ناشی از عدم قطعیت در پارامترهای مدل گیراندازی مثلا مشخصه یونی و توزیع زاویه اولیه کائونها در فرایند شبیه سازی است. چون توزیع اولیه به پیکربندی الکترونی اتم شدیدا وابسته است. هنوز تئوری دقیقی که بتواند این ارتباط را نشان دهد وجود ندارد.

مراجع :

[1] C. J. Batty, *Physics E. Friedman and. A. Gal, Reports* **287**, 385(1997).
[2] D. Gotta , *Progress in particles and nuclear physics*, 52,133(2004).
[3] C. J. Batty ,*Sov. J. Part. Nucl.* **13**(1),71(1982).
[4] H. Schneuwly, et al,. *Nucl. Phys*. **A312**, 419 (1978).
[۵] رئیسی، مرتضی، مطالعه‌ی دینامیک آبشاری اتم کائونیک نیتروژن به روش مونت کارلو، مجله ی پژوهش فیزیک ایران ، جلد ۱۱ ، شماره ی ۴ ، زمستان ۱۳۹۰.
[6] M. Bazzi, et al., *Nucl. Phys.* **A 916**, 30(2013).
[7] F. J. Hartmann, *in Proceeding of Electromagnetic Cascade and Chemistry of Exotic atoms*, Plenium Press , New York (1990)127.
[8] H. Schneuwly ,*in proceeding of exotic atoms in condensed matter*, springer proceedings in physics **59**,3(1992).
[9] D. F. Jackson , *Phys. Lett.* A **105,** , 292 (1984).
[10] F. J. Hartmann ,*in proceeding of exotic atoms in condensed matter*, springer proceedings in physics, **59**, 13(1992).