Calculation of pHeμ and dHeμ energy levels using a numerical - analytical method

Fatemeh Khoshkhooy[1], Mohammad Mohammadi[1], Rouhollah Gheisari, [1, 2,*]

[1] Physics Department, Persian Gulf University, Bushehr, 75169, Iran

[2] Nuclear Energy Research Center, Persian Gulf University, Bushehr, 75169, Iran

Received: 19.07.2019 Final revised: 05.10.2019 Accepted: 28.10.2019

Doi: 10.22055/JRMBS.2019.14908

Abstract

In the present paper, three body dHeμ and pHeμ systems have been considered using a trial wave function in the variational method. The governing interaction for these ions is the Coulomb interaction and is considered in the hyper sphere coordinate system. In this method, firstly, the wave function is divided into hyper-angle and hyper-radius and then the Schrodinger equation has been solved. The energy eigen values have been calculated for the ions and finally the present results have been compared with available data. Using the given wave function and the energy we can obtain other structure parameters . The resulting energy levels in this study for pHeμ and dHeμ molecules are -73.021 and -76.728, respectively**.** The relative error percents in this study, compared with other studies, are less than %1.135 and %1 for pHeμ and dHeμ molecules, respectively.

Keywords: Energy level, Ion **dHe**μ, Ion $\boldsymbol{pHe}$μ, Analytical-numerical method, Nuclear size

*Corresponding author: gheisari@pgu.ac.ir

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

محاسبهٔ تراز انرژی یون‌های میونی $dHe\mu$ و $pHe\mu$ با استفاده از یک روش تحلیلی-عددی

فاطمه خوشخوی[1]، محمد محمدی[1]، روح‌اله قیصری*[1,2]

[1] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر 75169، ایران

[2] مرکز پژوهشی انرژی هسته‌ای، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر 75169، ایران

دریافت: 1397/04/28 ویرایش نهائی:1398/07/13 پذیرش: 1398/08/06

Doi: 10.22055/JRMBS.2019.14908

چکیده

در مقاله حاضر با استفاده از یک تابع موج آزمایشی به‌بررسی سیستم‌های سه جسمی dHeμ و pHeμ در روش وردشی پرداخته شده است. برهم‌کنش حاکم بر اجزاء یون‌ها کولنی بوده و در دستگاه مختصات فوق کروی بررسی شده‌اند. در این روش، ابتدا تابع موج سیستم، برحسب قسمت‌های فوق زاویه‌ای و فوق شعاعی جداسازی شده و سپس به‌حل معادله شرودینگر پرداخته شده است. ویژه‌مقادیر انرژی یون‌ها محاسبه شده و در نهایت نتایج حاضر با داده‌های در دسترس مقایسه شده‌اند. با استفاده از تابع موج به‌دست آمده و انرژی حاصل می توان سایر پارامترهای ساختاری همچون اندازه هسته را به‌دست آورد. در این کار، اندازهٔ هستهٔ یون‌ها نیز محاسبه شده‌اند. نتایج انرژی حاصل از این کار برای مولکول‌های pHeμ و dHeμ به‌ترتیب برابر با 73/021eV- و 76/728eV- می‌باشند. خطای نسبی نتایج کار حاضر در مقایسه با کارهای دیگران برای مولکول pHeμ کمتر از 1/135% و برای مولکول dHeμ کمتر از 1% می‌باشد.

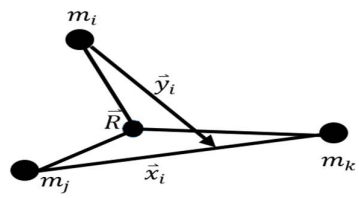
کلیدواژگان: تراز انرژی، یون dHeμ ، یون pHeμ، روش تحلیلی-عددی، اندازه هسته

مقدمه

یون‌های میونی (شامل دو هسته و یک میون منفی) از جمله شبه‌مولکول‌های اگزوتیک هستند که امکان هم‌جوشی در آنها وجود دارد. آزمایشات و محاسبات متعددی در این زمینه انجام پذیرفته که نشان می‌دهد آهنگ تشکیل و همجوشی آنها شدیداً به‌ترازهای انرژی بستگی دارد. روش‌های متفاوتی نظیر تقریب بورن-اپنهایمر [1]، نمایش آدیاباتیک [2]، روش چند جعبه [3] و ... وجود دارد که هرکدام به‌صورت تقریبی، به‌نتایج تقریباً یکسانی منتج می‌شوند [4]. بسته به‌روش، تعداد معادلات و جملات بسط تابع موج یون‌ها، محاسبات سنگین و در اغلب موارد با افزایش خطا همراه است. در این کار ابتدا فرم تابع موج را در دستگاه مختصات فوق کروی، به‌دست آورده و سپس به‌کمک روش وردشی، انرژی حالت پایه برای یون‌های $dHe\mu$ و $pHe\mu$ به‌دست می‌آید.

* نویسندهٔ مسئول: gheisari@pgu.ac.ir

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.
این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص 4,0 بین‌المللی می‌باشد



شکل1. شمایی از سیستم سه جسمی در دستگاه مختصات ژاکوبی

روش کار

مطابق شکل1، در دستگاه مختصات ژاکوبی مختصات سه جسم به‌جرم‌های m_i، m_j و m_k با بردارهای مکان ($\vec{r}_i$، $\vec{r}_j$ ، $\vec{r}_k$) به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\begin{cases} \vec{x}_i = d_i^{-1}(\vec{r}_j - \vec{r_k}) \\ \vec{y}_i = d_i\left(\vec{r}_i - \frac{m_j\vec{r}_j + m_k\vec{r}_k}{m_j+m_k}\right) \\ \vec{R} = \frac{1}{M}\left(m_i\vec{r}_i + m_j\vec{r}_j + m_k\vec{r}_k\right) \end{cases} \quad 1$$

d_i پارامتر نسبت و برابر $d_i = \sqrt{\frac{m_i}{\mu}\left(1-\frac{m_i}{M}\right)}$ می‌باشد. μ جرم کاهش یافته است و از رابطه $\mu = \sqrt{\frac{m_i m_j m_k}{M}}$ به‌دست می‌آید. در این کار تعیین جهت و علامت بردار $\vec{x}_i$ با شرط تشکیل تعویض چرخه‌ای (i,j,k) که سه عدد از مجموعه (۱،۲،۳) هستند، مشخص می‌شود. اندازه بردارهای ژاکوبی $(\vec{x}_i, \vec{y}_i)$ را می‌توان بر اساس پارامترهای فوق کروی (فوق شعاع ρ و فوق زاویه α_i) به‌صورت زیر نوشت:

$$\begin{cases} x_i = \rho\cos\alpha_i \\ y_i = \rho\sin\alpha_i \end{cases} \quad 2$$

از مزایای فوق شعاع ρ می‌توان به‌یکسان بودن این پارامتر در تمامی دستگاه‌های ژاکوبی و تغییر نکردن آن طی فرآیندهای انتقال، جایگشت و چرخش اشاره نمود. این پارامتر اطلاعاتی دربارهٔ اندازه سیستم می‌دهد.

برخلاف فوق شعاع، فوق زاویه α_i بسته به‌انتخاب دستگاه‌های ژاکوبی دارای مقادیر متفاوتی می‌باشد [5]. معادلهٔ شرودینگر هر یک از سیستم‌های سه جسمی در مختصات فوق کروی به‌شکل زیر می‌باشد:

$$\left[-\frac{\hbar}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{K}^2(\Omega_i)}{\rho^2}\right) - \frac{z(\Omega)}{\rho} - E\right]\Psi(\rho,\Omega_i) = 0 \quad 3$$

در این معادله $\Omega_i = (\alpha_i, \theta_{x_i}, \varphi_{x_i}, \theta_{y_i}, \varphi_{y_i})$ نمادی از پنج زاویه مستقل در دستگاه فوق کروی است و با پنج مختصه زاویه‌ای مستقل نشان داده می‌شود.

جملهٔ $z(\Omega) = z_{jk}(\Omega_i) + z_{ki}(\Omega_j) + z_{ij}(\Omega_k)$ پتانسیل کولنی کل و به‌صورت زیر است:

$$z(\Omega) = V_{ij} + V_{ik} + V_{jk} = \frac{z_j z_k e^2}{d_i\cos\alpha_i} + \frac{z_i z_k e^2}{d_j\cos\alpha_j} + \frac{z_j z_i e^2}{d_k\cos\alpha_k} \quad 4$$

و چون $\cos\alpha_{()}$ تنها قسمت متغیر آن است، پس برای محاسبه پتانسیل باید عبارت زیر را به‌دست آورد.

$$\langle K|\cos\alpha_{()}{}^p|\acute{K}\rangle = N_{K\acute{K}}^{l_{x()}l_{y()}}(-1)^{n+\acute{n}}2^{-\left(l_{x()}+l_{y()}+\frac{p}{2}+3\right)} \times C\left(l_{x()}+\frac{p}{2}+1/2; n, l_{x()}+\frac{1}{2}, l_{y()}+\frac{1}{2}; \acute{n}, l_{x()}+\frac{1}{2}, l_{y()}+\frac{1}{2}\right) \quad 5$$

که در آن $x = -\cos 2\alpha$ می‌باشد. عملگر $\hat{K}^2$ نیز معرف مربع عملگر تکانهٔ زاویه‌ای در مختصات فوق کروی می‌باشد:

$$\hat{K}^2(\Omega_i)y_{Kl_{x_i}l_{y_i}m_{x_i}m_{y_i}}(\Omega_i) = K(K+4)y_{Kl_{x_i}l_{y_i}m_{x_i}m_{y_i}}(\Omega_i) \quad 6$$

ویژه توابع $y_{Kl_{x_i}l_{y_i}m_{x_i}m_{y_i}}(\Omega_i)$، توابع بهنجار شده عملگر $\widehat{K}^2$ و هارمونیک فوق کروی نامیده می‌شوند و یک مجموعه کامل و متعامد را تشکیل می‌دهند:

$$y_{Kl_{x_i}l_{y_i}m_{x_i}m_{y_i}}(\Omega_i) = N_k^{1_{xi},1_{yi}}(\cos\alpha_i)^{1_{xi}}(\sin\alpha_i)^{1_{yi}}Y_{1_{xi}}^{m_{xi}}(\hat{X}_i)Y_{1_{yi}}^{m_{yi}}(\hat{y}_i) \times P_{n_i}^{1_{yi}+\frac{1}{2},1_{x_i}+\frac{1}{2}}(\cos(2\alpha_i)) \quad 7$$

در رابطهٔ5، $N_K^{l_{x_i},l_{y_i}}$ ضریب بهنجارش، $p_k^{(\alpha,\beta)}$ تابع ژاکوبی، $n_i = \frac{K-l_{x_i}-l_{y_i}}{2}$ و l_{x_i}, l_{y_i} به‌ترتیب ویژه مقادیر عملگرهای تکانه زاویه‌ای معمولی مربوط به‌بردارهای ژاکوبی $\vec{x}_i$ و $\vec{y}_i$ می‌باشند [6]. به‌منظور سهولت در کار از ویژه توابعی با تکانه زاویه‌ای کل L معین استفاده کرده و ضرایب کلبش گوردن به‌کار برده می‌شود:

$$Y_{K\mu_i}(\Omega_i) = \sum_{m_{x_i}m_{y_i}} \langle l_{x_i}m_{x_i}l_{y_i}m_{y_i}|LM\rangle y_{Kl_{x_i}l_{y_i}m_{x_i}m_{y_i}}(\Omega_i) \quad 8$$

μ_i یک مجموعه از اعداد کوانتومی $[l_{x_i}, l_{y_i}, L, M]$ است که در آن M, L به‌ترتیب تکانهٔ زاویه‌ای کل سیستم و تصویرش می‌باشند. توابع $Y_{K\mu_i}(\Omega_i)$ یک مجموعه کامل و بهنجار را تشکیل داده و می‌توان تابع موج را برحسب این توابع بسط داد:

$$\psi(\rho,\Omega_i) = \sum_{K\mu_i}\Phi_{K\mu_i}(\rho)Y(\Omega_i). \quad 9$$

با قرار دادن این عبارت در معادلهٔ3 و ضرب $Y_{K\mu_i}^*(\Omega_i)d\Omega_i$ در دو طرف معادله و سپس انتگرال‌گیری روی همهٔ زاوایای ممکن Ω_i معادلات زیر حاصل می‌شوند:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\bar{K}}{\rho^2}\right)-\frac{\bar{Z}}{\rho}-E\right]\bar{\Phi}(\rho) = 0 \quad 10$$

$\bar{\Phi}(\rho)$ یک ماتریس ستونی حاوی ضرایب بسط، $\bar{K}$ ماتریسی قطری با عناصر $K(K+4)$ و $\bar{Z}$ ماتریس متقارن پتانسیل است که عناصر آن با استفاده از ضرایب راینال-ریوای تعیین می‌گردد [7]. برای نوع خاصی از معادلات دیفرانسیل خطی درجهٔ دوم می‌توان ویژه‌توابع متعامد آنها را به‌عنوان حل عمومی با استفاده روش NU به‌دست آورد [9و8]. معادلهٔ دیفرانسیل استاندارد روش NU در حالت کلی به‌شکل زیر است:

$$\psi''(\rho)+\frac{\bar{\tau}(\rho)}{\sigma(\rho)}\psi'(\rho)+\frac{\bar{\sigma}(\rho)}{\sigma^2(\rho)}\psi(\rho) = 0 \quad 11$$

که در آن $\bar{\tau}(\rho)$ چند جمله‌ای درجهٔ یک، $\sigma(\rho)$ و $\bar{\sigma}(\rho)$ چند جمله‌ای درجه دو می‌باشند. با اعمال تغییرات مناسبی در معادلهٔ10 به‌صورت $Z = \frac{2\mu\bar{Z}}{\hbar^2}$ و $E' = \frac{2\mu}{\hbar^2}E$ و تابع موج به‌صورت $\psi(\rho) = \phi(\rho)y(\rho)$ ، می‌توان به‌فرم استاندارد معادلهٔ11 دست یافت:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{-K(K+4)+Z\rho-E'\rho}{\rho^2}\right]\psi(\rho) = 0 \quad 12$$

که در آن $\sigma(\rho) = \rho$ و $\bar{\sigma}(\rho) = -K(K+4)+Z\rho-E'$ و $\bar{\tau} = 5$ فرض می‌شود. با استفاده از این روش خواهیم داشت:

$$\phi(\rho) = \rho^K e^{-2\sqrt{E}\rho} \quad 13$$

$$y_n(\rho) = B_n\rho^{-2(K+2)}e^{2\sqrt{E'}\rho}\frac{d^n}{d\rho^n}\left(\rho^n\rho^{2(K+2)}e^{-2\sqrt{E'}\rho}\right) \quad 14$$

در این رابطه B_n ضریب بهنجار و $y_n(\rho)$ چند جمله‌ای وابسته لاگر است. در نهایت تابع موج پایه کلی حاصل از این روش به‌صورت زیر خواهد شد:

$$\psi(\rho) = \rho^K e^{-\sqrt{\acute{E}}\rho} L_n^{2(K+2)}\left(2\sqrt{\acute{E}}\rho\right) \qquad 15$$

توابع موج حاصل، مجموعه‌ای کامل و خوشرفتار در صفر و بی‌نهایت تشکیل می‌دهند که متناظر با شرایط مرزی قابل انتظار برای تابع موج شعاعی می‌باشد. پس می‌توان بخش شعاعی سیستم را برحسب این توابع بسط داد. با بسط تابع شعاعی، تابع موج کلی سیستم به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

16

$$\psi(\rho,\Omega_i) = \sum_{K\mu_i}^{K_{max}} \sum_{n=0}^{N_{max}} C_{K\mu_i}^n \rho^K e^{-b\rho} L_n^{2(K+2)}(2b\rho) Y_{K\mu_i}(\Omega_i)$$

در این رابطه، $b = \sqrt{\acute{E}}$ بوده و با محاسبهٔ ضرایب بسط $C_{K\mu}^n$ ویژه‌تابع سیستم مشخص می‌شود. در رابطهٔ16 پارامترهای N_{max} و K_{max} به‌ترتیب حداکثر درجهٔ چند جمله‌ای لاگر و حداکثر عدد تکانه زاویه‌ای کل می‌باشد [9]. در بررسی توابع پایه به‌ازای ρهای کوچک با افزایش K، مقدار ρ^K از بزرگ شدن تابع موج جلوگیری می‌کند. در واقع این سد رانشی مرکز گریز است که مانع از نزدیک شدن میون به‌هسته خواهد شد. در حالت کلی دستگاه‌های مختصات ژاکوبی (i,j,k) کاملاً معادل می‌باشند و برای هر کدام از آنها می‌توان یک مجموعهٔ کامل از هارمونیک‌های فوق کروی تصور نمود به‌نحوی که هر کدام از آنها به مجموعه‌ای از هماهنگ‌های کروی برای توصیف فضای پنج بعدی فوق کروی منتج می‌شود. هر یک از پایه‌های فضا را می‌توان برحسب مجموعه‌ای دیگر از پایه‌های فضا بسط داد. بنابراین، پایه‌های فضای iام (کانال iام) را برحسب پایه‌های فضای kام (کانال kام) بسط می‌دهند. ضرایب درست برای چنین تبدیلی را ضرائب راینال ریوای می‌نامند [7]:

$$y_{Kl_{x_i}l_{y_i}LM}(\Omega_i) = \sum_{l_{x_k}l_{y_k}} \left\langle l_{x_k}l_{y_k} \middle| l_{x_i}l_{y_i} \right\rangle_{KL} y_{Kl_{x_k}l_{y_k}LM}(\Omega_k) \qquad 17$$

اعداد $\left\langle l_{x_k}l_{y_k} \middle| l_{x_i}l_{y_i} \right\rangle_{KL}$ یا همان ضرایب راینال ریوای به‌صورت زیر حاصل خواهند شد [10]:

$$\left\langle l_{x_k}l_{y_k} \middle| l_{x_i}l_{y_i} \right\rangle_{KL} = \frac{\pi}{4}\left[C_{l_{x_i},l_{y_i}}^{n_i}, C_{l_{x_k},l_{y_k}}^{n_k}\right]^{-\frac{1}{2}} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} i^{\lambda_3+\lambda_4+l_{y_i}-l_{y_k}} (-1)^{\lambda_1+\lambda_2+K} \times f(\lambda_1,\lambda_3;l_{x_k}) f(\lambda_4,\lambda_2;l_{y_k}) f(\lambda_1,\lambda_4;l_{x_i}) f(\lambda_3,\lambda_2;l_{y_i}) \times \begin{Bmatrix} \lambda_1 & \lambda_3 & l_{x_k} \\ \lambda_4 & \lambda_2 & l_{y_k} \\ l_{x_i} & l_{y_i} & L \end{Bmatrix} \times \sum_{\mu\nu} (-1)^{\lambda_4} C_{\lambda_3,\lambda_4}^{\mu} C_{\lambda_1\lambda_2}^{\nu} \cos(\varphi_{ki})^{2\nu+\lambda_1+\lambda_2} \sin(\varphi_{ki})^{2\mu+\lambda_3+\lambda_4} \qquad 18$$

در این رابطه عبارت جمع به‌ازای برقراری شرایط زیر ادامه دارد؛ در غیر این صورت ضرایب راینال ریوای صفر خواهد شد.

$$\vec{L} = \vec{l}_{x_i} + \vec{l}_{y_i} = \vec{l}_{x_k} + \vec{l}_{y_k} \qquad 19$$

$$K = 2n_k + l_{x_k} + l_{y_k} = 2n_i + l_{x_i} + l_{y_i}$$

$$K = 2\mu + 2\upsilon + \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4$$

n_k و n_i اعداد صحیح زوج و این روابط نشان‌دهندهٔ آنست که اعداد کوانتومی M، L و K با رفتن از کانالی به‌کانال دیگر باید ثابت باقی بمانند. برای توصیف پایین‌ترین تراز انرژی یون‌های مورد نظر، به‌یک دسته از اعداد کوانتومی با اجزای اصلی $[l_{x_i}, l_{y_i}, L, M]$ نیاز است. l_{x_i} تکانه زاویه‌ای مربوط به x_i و l_{y_i} تکانه زاویه‌ای مربوط به y_i و

$\vec{L} = \vec{l}_{x_i} + \vec{l}_{y_i}$ می‌باشد. پارامتر K برابر با $K = l_{x_i} + l_{y_i} + 2n_i$ است به‌طوری‌که n_i باید عدد صحیح غیر منفی باشد. در جدول1 برخی از مجموعه اعداد کوانتومی مورد نیاز برای محاسبهٔ انرژی آمده است. ضرایب بسط غیر صفر L، یکسان است. در نتیجه تکانه زاویه‌ای سیستم ثابت بوده که دلیلی بر مرکزی بودن نیروی کولنی می‌باشد. در بررسی حالت پایه با توجه به‌محدودیت‌های حاکم بر اعداد کوانتومی، باید ترکیبی از اعداد را به‌نحوی انتخاب نمود که L کل صفر شود. با صفر شدن L و توجه به‌روابط بالا می‌توان دریافت $l_{x_i} = l_{y_i} \leq K/2$. از طرفی چون l_{y_i} و l_{x_i} باید از اعداد صحیح انتخاب نمود پس K نیز باید عددی زوج و صحیح باشد [11].

برای به‌دست آوردن تراز انرژی حالت پایه، تابع موج به‌دست آمده از محاسبات بالا را در فرمول روش وردشی $\varepsilon = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \geq E_1$ جایگذاری کرده و بدین ترتیب مقدار انرژی حالت پایه به‌دست می‌آید. در این روش، برای ساخت تابع موج آزمایشی $\psi(\rho,\Omega_i)$ تنها به‌تعداد معدودی از چند ویژه تابع شعاعی $\Phi_n(\rho)$ $(0 \leq n \leq \mathrm{N}_{max})$ و تعداد محدودی از ویژه توابع زاویه‌ای $y_{K\mu_i}(\Omega_i)$ $(0 \leq n \leq K_{max})$ بسنده می‌شود. نکتهٔ مهمی که در اینجا فرض می‌شود اینست که برای تمامی ویژه‌توابع بسط16، انرژی $E_n{}'$ ثابت فرض شده است. در واقع $E_n{}' = \frac{-2\mu}{\hbar^2}E$ برای تمامی جملات بسط یکسان فرض می‌شود. (E همان انرژی حالت پایه سیستم فرض می‌شود که قرار است از طریق روش وردش خطی حاصل شود) [9]. تابع موج آزمایشی16 را می‌توان به‌شکل ساده زیر بازنویسی نمود [9]:

$$\psi(\rho,\Omega_i) = \sum_{K\mu_i}^{K_{max}} \sum_{n=0}^{N_{max}} C_{K\mu_i}^{n} \Phi_n(\rho) y_{K\mu_i}(\Omega_i) = \sum_{s=1} C_s \,|\varphi_s\rangle \qquad 20$$

اندیس s بیانگر اعداد کوانتومی (K,μ_i,n) است [9]. با توجه به‌شرح روش وردشی خطی در مرجع [13و12] برای نیل به‌کمینهٔ ویژه‌مقدار انرژی باید ضرایب بسط (پارامترهای وردشی $C_{K\mu_i}^{n}$) را بهینه نمود به‌نحوی که دترمینان مربوطه صفر بشود:

$$\begin{vmatrix} \langle\varphi_1|H-E|\varphi_1\rangle & \langle\varphi_1|H-E|\varphi_2\rangle & \langle\varphi_1|H-E|\varphi_3\rangle \dots \\ \langle\varphi_2|H-E|\varphi_1\rangle & \langle\varphi_2|H-E|\varphi_2\rangle & \langle\varphi_2|H-E|\varphi_3\rangle \dots \\ \langle\varphi_3|H-E|\varphi_1\rangle & \langle\varphi_3|H-E|\varphi_2\rangle & \langle\varphi_3|H-E|\varphi_3\rangle \dots \\ & \dots & \end{vmatrix} = 0 \qquad 21$$

در این کار به‌صورت عددی به‌ازای مقادیر متفاوت $E' = -\frac{2\mu}{\hbar^2}E$، به‌طور معادل، ابتدا توابع $\varphi_s(\rho) \equiv \Phi_n(\rho) y_{K\mu_i}(\Omega_i)$ به‌عنوان پایه‌های فضای برداری محاسبه، سپس در دترمینان18 جای‌گذاری می‌شوند. با انجام این کار به‌جای حل مستقیم دترمینان (روش حل شده در مرجع9)، علاوه بر آنکه جواب‌های معادله با دقت و در زمانی کمتر به‌دست می‌آید، حجم زیادی از محاسبات را نیز می‌کاهد. به‌علاوه این روش در تعداد جملات بالاتر با خطا مواجه می‌شود. اما روش ذکر شده در کار حاضر، این مشکلات را برطرف کرده است. در واقع هدف این است که بازه‌ای کوچک برای انرژی E به‌نحوی پیدا نمود که نتیجه این دترمینان به‌ازای مقادیر ابتدا و انتهای این بازه تغییر علامت بدهد. با سعی و خطا و کوچک نمودن چنین بازه خاصی به‌بهترین جواب تقریبی مطلوب برای ویژه‌مقدار حاصل از روش وردشی معادلهٔ شرودینگر10 مربوط به‌سیستم سه جسمی، نزدیک می‌شویم. به‌عبارت دیگر ما دنبال یک E خاص هستیم که به‌ازای آن دترمینان مورد نظر صفر بشود ولی چون چنین خواستی به‌صورت تحلیلی امکان پذیر نیست، به‌ناچار، به‌صورت عددی محاسبه دترمینان فوق را در بازه‌های کوچک E مورد مطالعه قرار می‌دهیم. دقت کنید به‌ازای هر N_{max} و K_{max} خاص این فرآیند باید به‌صورت مستقل تکرار

شود. جدول‌های2 و 3 مقدار انرژی برای هر یک از N_{max} و K_{max} برای هر یک از یون‌های $dHe\mu$ و $pHe\mu$آورده شده است. نشان داده خواهد شد که با انتخاب مقادیر مناسبی از N_{max} و K_{max}، حاصل از روش وردشی معرفی شده، نتایج به‌دست آمده با نتایج دیگران با تقریب خوبی همسان خواهد بود. مقادیر حاصل حد بالایی از انرژی تابع موج بهنجار مورد نظر است.

با توجه به‌روابط1 و 2 می‌توان اندازه هسته را چنین نوشت:

$$\vec{r}_{jk} = d_i \rho \cos \alpha_i \qquad 22$$

$\vec{r}_{jk}$ با توجه به‌تابع موج20 به‌صورت زیر محاسبه می‌گردد.

$$\langle r_{jk}^m \rangle = d^m \qquad 23$$

$$\sum_{K'\mu_i}^{K_{max}} \sum_{\acute{n}=0}^{N_{max}} \sum_{K\mu_i}^{K_{max}} \sum_{n=0}^{N_{max}} C_{K'\mu_i}^{\acute{n}} C_{K\mu_i}^{n} \langle y_{K'\mu_i}(\Omega_i) | \cos^m \alpha_i | y_{K\mu_i}(\Omega_i) \rangle \langle \Phi_n(\rho) | \rho^m | \Phi_n(\rho) \rangle$$

که در آن، $m = 1$ می‌باشد. بدین ترتیب با توجه به‌مقدار انرژی به‌دست آمده، می‌توان اندازهٔ هسته را به‌دست آورد.

نتیجه‌گیری

در جدول1 ویژه‌مقادیر انرژی حاصل از کار حاضر با داده‌های دیگران مقایسه شده‌اند. در این جدول B-Oمعرف تقریب بورن- اپن‌هایمر و Ad معرف روش آدیاباتیک می‌باشند. اختلاف کم نتایج حاضر با داده‌های روش آدیاباتیک، بیانگر کارایی این روش می‌باشد. کاهش حجم محاسبات نسبت به‌دیگر روش‌ها از جمله [9] (روش به‌کار برده شده در ادامه و تصحیح و تکمیل کننده مرجع ذکر شده است). از مزیت‌های این روش می‌باشد. مقدار انرژی حالت L=0 (حالت پایه) برای مولکول $dHe\mu$ به‌ازای K_{max} =2 و N_{max} =5 و برای مولکول $pHe\mu$ به‌ازای K_{max} = 2 و N_{max} =6 به‌دست آمده است. همچنین با استفاده از تابع موج حاضر، برای اولین بار اندازهٔ هسته‌های دو یون $dHe\mu$ و $pHe\mu$ به‌دست آمده که نتایج آن در جدول2 می‌باشد.

جدول1. مقادیر انرژی حالت پایه (برحسب eV) یون‌های $dHe\mu$ و $pHe\mu$ و مقایسهٔ آنها با کار دیگران [14].

روش / یون	این کار	B-O	Ad	$(\Delta E/E)_{Ad}$%
$dHe\mu$	-76/728	-63/5	-77/5	1
$pHe\mu$	-73/021	-42/3	-73/85	1/135

جدول2. اندازهٔ هسته‌های دو یون $dHe\mu$ و $pHe\mu$ (برحسب 10^{-15} cm).

یون	اندازه هسته
$dHe\mu$	0/49
$pHe\mu$	1/096

تشکر و قدردانی

از شورای پژوهشی دانشگاه خلیج‌فارس و مرکز پژوهش انرژی هسته‌ای دانشگاه قدردانی می‌گردد.

مرجع‌ها

[1] V.I. Ochkur, The Born-Oppenheimer method in the theory of atomic collisions, *Soviet Physics JETP* **18** 2 (1964) 503-508.

[2] M.P. Faifman, L.I. Ponomarev, S.I. Vinitsky, Asymptotic form of effective potentials of the Coulomb three-body problem in the adiabatic representation, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular Physics* **9** 13 (1976) 2255-2268.

[13] J.P. Dahl, Introduction to the quantum world of atoms and molecules, World Scientific Publishing, Co. Pte. Ltd, (2001).

[14] J. Gronowski, W. Czaplinski, N. Popov, Elastic $(h\mu)_{1s}$ + He^{++} scattering and the influence of adiabatic corrections on $(He\mu h)^{++}$ bound states, *Acta Physica Polonica A* **6** (2004) 756-816.

[15] ه. خواجه‌آزاد، م.ر. اسکندری، محاسبهٔ تابع موج مولکول‌های نامتقارن سه جسمی در اولین حالت برانگیخته، *مجلهٔ علوم و فنون هسته‌ای*، 63 (1392)، 74-65.

جدول3. مجموعه اعداد کوانتومی مورد نیاز

K	n_i	l_{x_i}	l_{y_i}
0	0	0	0
2	0	1	1
2	1	0	0
4	0	2	2
4	1	1	2
4	2	0	0
6	0	3	3
6	1	2	2
6	2	1	1
6	3	0	0
8	0	4	4
8	1	3	3
8	2	2	2
8	3	1	1
8	4	0	0

[3] A.M. Frolov, Multibox strategy for constructing highly accurate bound-state wave functions for three-body systems, *Physics Review E* **64** 036704 (1998) 1-6.

[4] M. Decker, W. Sandhas, V.B. Belyaev, Muonic three-body Coulomb systems in the hyperspherical approach, *Physics Review* A **53** 2 (1996) 726-736.

[5] C.D. Lin, Hyperspherical coordinate approach to atomic and other Coulombic three-body systems, *Physics Reports* **257** (1995) 1-83.

[6] R. Krivec, Hyperspherical-Harmonics Methods for Few-Body Problems, *Few-Body Systems* **25** (1998) 199–238.

[7] J. Raynal, J. Revai, Transiormation Coeiticients in the Hyperspherical Approach to the Three-Body Problem, *Nuovo Cimento* **4** (1970) 612-622.

[8] A.V. Nikiforov, V.B. Uvarov, Special functions of mathematical physics, Birkhauser, Bassel, (1988).

[9] H. Fatehizadeh, R. Gheisari, H. Falinejad; Full calculation of μpd and μdt muonic bound levels: Combination of Nikiforov-Uvarov method and variational approach, *Annals of Physics* **385** (2017) 512-521.

[10] G. Youping, L. Fuqing, T.K. Lim, Program to calculate Raynal-Revai coefficients of a three-body system in two or three dimensions, *Computer Physics Communications* **47** (1987) 149-157.

[11] R. Chattopadhyay, T.K. Das, Adiabatic approximation in atomic three-body systems, *Physics Review* A **56** (1997) 1281-1299.

[12] Y. Suzuki, K. Varga, Stochastic variational approach to quantum mechanical few-body problems, Springer- Verlag, Berlin, Heidelberg, (1998).

جدول4. انرژی سیستم pHeμ در حالت پایه (L=M=0)

K_m	N_m	E(eV)
2	2	بدون جواب
2	3	بدون جواب
2	4	بدون جواب
2	5	بدون جواب
2	6	-73/021
2	7	-56/232
2	8	-44/704
2	9	-36/423
4	2	بدون جواب
4	3	بدون جواب
4	4	بدون جواب
4	5	بدون جواب
4	6	بدون جواب
4	7	بدون جواب
4	8	-35/14
6	2	بدون جواب

جدول5. انرژی سیستم dHeμ در حالت پایه (L=M=0)

K_m	N_m	E(eV)
2	2	بدون جواب
2	3	بدون جواب
2	4	بدون جواب
2	5	-76/728
2	6	-45/3
2	7	-28/43
2	8	-73/44
2	9	-53/04
4	2	بدون جواب
4	3	بدون جواب
4	4	بدون جواب
4	5	بدون جواب
4	6	بدون جواب
4	7	بدون جواب
4	8	-57/64