

طیف سنجی کوارکونیم به کمک معادله کلاین گوردن

منصور حقیقت^{*}، بهروز میرزا^{*} و علی دادخواه

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

^{*} پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانشهای بنیادی، فرمانیه، تهران

(دریافت مقاله: ۷۸/۱۲/۱۰ پذیرش: ۷۹/۲/۲)

چکیده

در این مقاله با استفاده از معادله تعمیم یافته کلاین - گوردن (KG) به بررسی طیف کوارکونیم‌ها پرداخته‌ایم. این مسئله با استفاده از پتانسیلهای مناسب و بکار بردن آنها در جمله جرمی معادله KG به صورت تحلیلی و عددی مورد بررسی قرار گرفته است. سادگی این مدل و دقت بالای نتایج به دست آمده در مقایسه با روشهای دیگر، برای محاسبه نسبیتهای طیف $q\bar{q}$ ، قابل توجه است.

واژه‌های کلیدی: کوارکونیم، معادله کلاین گوردن تعمیم یافته، مدل پتانسیل، طیف سنجی مزون

۱. مقدمه

بعد از کشف کوارک سنگین (۱۹۷۴) تاکنون مطالعات زیادی بر روی طیف کوارکونیم‌ها ($q\bar{q}$) انجام شده است. نظریه‌ای که برهمکنش کوارکها را توصیف می‌کند کرومودینامیک کوانتومی (QCD) نام دارد. به دلیل بزرگی ثابت جفت شدگی در QCD امکان محاسبات اختلالی در این نظریه وجود ندارد. خوشبختانه در انرژیهای بالا به دلیل غیرآبلی بودن گروه تقارن QCD ثابت جفت شدگی کوچکتر (آزادی مجانبی) و بنابراین امکان استفاده از روشهای اختلالی فراهم می‌شود. امروزه موفق‌ترین روش بررسی طیف هادرونی و محصورشدگی کوارکها استفاده از نظریه پیمانته‌ای شبکه‌ای است [۱].

مبنای این نظریه شبکه بندی فضا و زمان بوده و بنابراین روشی مناسب برای حل عددی QCD فراهم می‌آورد. اما زمان زیاد برای محاسبات عددی حتی برای مسایل نسبتاً ساده سبب کم شدن کارایی و جذابیت این نظریه شده است.

یکی از ساده‌ترین و شهودی‌ترین راههای بررسی طیف هادرونی استفاده از مدل پتانسیل غیر نسبیتهای است. در این چارچوب معادله شرودینگر برای پتانسیلهایی قابل انتظار در QCD همانند پتانسیل خطی به علاوه کولنی و یا پتانسیلهایی کاملاً پدیده شناختی مثل پتانسیل $T^{0.1}$ ، حل می‌گردد. توافق این گونه محاسبات با مقادیر تجربی خصوصاً در مورد کوارکونیم‌های سنگین ($c\bar{c}, b\bar{b}, \dots$) جالب توجه است [۲]. با این وجود نمی‌توان هادرونهاى مذکور را در حالات برانگیخته و همچنین هادرونهاى با اجزاء سبک (شامل کوارکهای سبک u, d, s) را غیر نسبیتهای فرض کرد. برای این منظور روش صحیح حل مسئله استفاده از معادله بت - سالپیتتر (BS) خواهد بود. اما این معادله دارای پیچیدگیهای بسیاری است و حل آن در اکثر موارد به صورت دقیق امکان پذیر نیست [۳]. برای دوری جستن از چنین مشکلاتی و در عین حال در نظر گرفتن تصحیحات نسبیتهای باید به روشهای دیگری متوسل شد. ما در این مقاله

معادله (۶) به صورت زیر تبدیل خواهد شد :

$$\left[\frac{E^2}{4} + \nabla_r^2 - m^2 \right] \phi(r) = 0, \quad (8)$$

که در آن $E^2 = \epsilon^2 - 2Q^2$. معادله (۸) بسیار شبیه به معادله KG برای یک ذره می باشد. در این مقاله ما این معادله را مبتنا قرار داده و طیف انرژی کوآرکونیم ها را با وارد کردن پتانسیل در آن به دست می آوریم. به طور کلی در حالت پایا، برای بررسی حالت مقید، معادله KG با پتانسیلهای اسکالر و برداری به صورت زیر نوشته می شود [۵]:

$$\left[\nabla_r^2 + \frac{(E - v(r))^2}{4} - (m + s(r))^2 \right] \phi(r) = 0 \quad (9)$$

که در آن $s(r)$ پتانسیل اسکالر و $v(r)$ مولفه چهارم یک پتانسیل برداری است.

معادله (۹) در سه حالت زیر قابل بررسی است :

$$v(r) \neq 0, \quad s(r) = 0 \quad -1$$

$$v(r) = 0, \quad s(r) \neq 0 \quad -2$$

$$v(r) \neq 0, \quad s(r) \neq 0 \quad -3$$

با توجه به اینکه حالت اول قبلاً مورد بررسی قرار گرفته [۶] در ادامه به دو حالت بعدی خواهیم پرداخت. در حالت دوم با توجه به اینکه پتانسیل به طور خالص اسکالر می باشد معادله (۹) به صورت زیر تبدیل خواهد شد :

$$\left[\nabla_r^2 - (m + s(r))^2 + \frac{E^2}{4} \right] \phi(r) = 0 \quad (10)$$

که برای سادگی با تعریف $u^2(r) = 2ms + s^2$ معادله (۱۰) به صورت زیر تبدیل می گردد :

$$\left[\nabla_r^2 - u^2(r) + \frac{E^2 - 4m^2}{4} \right] \phi(r) = 0 \quad (11)$$

اکنون با تعریف $\epsilon = \frac{E^2 - 4m^2}{4m}$ و انتخاب $\epsilon = kr + v_0$ معادله (۱۱) به صورت آشنای معادله شرودینگر برای یک ذره در پتانسیل خطی تبدیل می شود.

$$\left[-\frac{1}{2m} \nabla_r^2 + kr \right] \phi(r) = (\epsilon - v_0) \phi(r) \quad (12)$$

بدین ترتیب با توجه به جوابهای معادله (۱۲) مقادیر ویژه انرژی در $l=0$ به صورت زیر قابل محاسبه خواهند بود:

ضمن صرف نظر کردن از تصحیح اسپینی طیف کوآرکونیم های سبک و سنگین را با حل معادله تک زمان کلاین-گوردن (KG) برای دو ذره با بر همکنش اسکالر که با جرم جفت می شود محاسبه خواهیم کرد.

۲. معرفی مدل

در مورد دو ذره غیر نسبیتی معادله شرودینگر به کمک مفهوم دستگاه مرکز جرم تبدیل به معادله ای برای یک ذره با جرم کاهش یافته می شود. اما برای ذرات نسبیتی و معادله KG این مفهوم دارای پیچیدگیهای زیادی است. با این حال در مورد دو ذره با جرمهای مساوی می توان ساده سازیهایی را انجام داد [۴]. برای تعمیم معادله KG می توان از رابطه $P^2 = W^2$ ، که در آن W ناوردای جرم و P چهار بردار تکانه کل است، استفاده کنیم. بدین ترتیب معادله تعمیم یافته تک زمان KG برای دو ذره به صورت زیر خواهد بود :

$$\left(p^2 - W^2 \right) \phi(r_1, r_2) = 0, \quad (1)$$

که در آن

$$p^2 = (E_1 + E_2)^2 - (p_1 + p_2)^2, \quad (2)$$

و

$$W = \left(p_1^2 + m_1^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \left(p_2^2 + m_2^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3)$$

انرژی در دستگاه مرکز جرم می باشد. برای دو ذره با جرم برابر رابطه (۳) را می توان به صورت زیر نوشت :

$$W^2 = 2(p_1^2 + p_2^2 + m_1^2 + m_2^2), \quad (4)$$

اکنون با انتخاب

$$r = r_1 - r_2, \quad R = \alpha r_1 + \beta r_2, \quad (5)$$

به راحتی می توان نشان داد که

$$\begin{aligned} & \left(p^2 - W^2 \right) \phi(r_1, r_2) = \\ & \left[\epsilon^2 + \left[(\alpha + \beta)^2 + 2\alpha^2 + 2\beta^2 \right] \nabla_R^2 + 4\nabla_r^2 \right. \\ & \left. - 2(m_1^2 + m_2^2) + 4(\alpha - \beta) \nabla_r \nabla_R \right] \phi(r, R) \end{aligned} \quad (6)$$

که در آن $\epsilon_0 = E_1 + E_2$. اما برای $m_1 = m_2 = m$ و $\alpha = \beta$ با انتخاب

$$\phi(r, R) = \phi(r) e^{i \frac{Q \cdot R}{\alpha + \beta}} = \phi(r) e^{i \frac{Q \cdot R}{2\alpha}} \quad (7)$$

جدول ۱. مقادیر محاسبه شده برای $c\bar{c}$ به کمک معادله (۱۰) با پتانسیل $s + \frac{s^2}{2m} = kr + v$. جرم حالات مختلف با جایگذاری ویژه مقادیر به دست آمده از معادله (۱۲) در $\psi_n = E_n = \sqrt{\lambda m \epsilon_n + 2m^2 + \lambda m v}$ به دست آمده است.

$N^{2S+1}L_J$	$c\bar{c}$ Meson	$m_{exp.}$	Theo.
1^3S_1	J/Ψ	3097	3097
2^3S_1	$\Psi(2S)$	3686	3689
3^3S_1	$\Psi(3S)$	4040	4111
4^3S_1	$\Psi(4S)$	—	4450
1^3P_0	$\chi(1P)_{COG}$	3525	3454
1^3D_1	$\Psi(3770)$	3770	3738
2^3D_1	$\Psi(4160)$	4160	4205
3^3D_1	$\Psi(4415)$	4415	4626

جدول ۲. مقادیر محاسبه شده برای $b\bar{b}$ به کمک معادله (۱۰) با پتانسیل $s + \frac{s^2}{2m} = kr + v$. جرم حالات مختلف با جایگذاری ویژه مقادیر به دست آمده از معادله (۱۲) در $\psi_n = E_n = \sqrt{\lambda m \epsilon_n + 2m^2 + \lambda m v}$ به دست آمده است.

$N^{2S+1}L_J$	$b\bar{b}$ Meson	$m_{exp.}$	Theo.
1^3S_1	$\Upsilon(1S)$	9460	9509
1^3P_0	$\chi_b(1P)_{COG}$	9900	9760
2^3S_1	$\Upsilon(2S)$	10023	9938
2^3P_0	$\chi_b(2P)_{COG}$	10261	10224
3^3S_1	$\Upsilon(3S)$	10355	10275
4^3S_1	$\Upsilon(4S)$	10580	10565
5^3S_1	$\Upsilon(5S)$	10865	10823
6^3S_1	$\Upsilon(6S)$	11019	11058

$$E_n^2 = 2m^2 + \left(2m^2 k^2\right)^{\frac{1}{2}} (-x_n) + \lambda m v \quad (13)$$

که در آن x_n صفرهای منفی تابع Airy می باشند. در حالت $l \neq 0$ معادله (۱۲) جوابی به صورت تحلیلی ندارد و باید آن را به صورت عددی حل کرد ولی به طور تقریبی می توان مقادیر ویژه معادله (۱۲) را برای I های مخالف با صفر از رابطه زیر به دست آورد [۷]

$$\epsilon_{N,l} = v_0 + \left(\frac{1}{2m}\right)^{\frac{n}{n+2}} k^{\frac{2}{n+2}} \left(1 + \frac{n}{2}\right) \times \quad (14)$$

$$\left[\frac{\gamma l(l+1)}{n}\right]^{\frac{n}{n+2}} \left[1 + \frac{n(\gamma N + 1)}{\sqrt{l(l+1)(n+2)}}\right]$$

که در آن $N = 0, 1, 2, \dots$ و برای پتانسیل خطی داده شده در معادله (۱۲)، $n = 1$ می باشد.

بدین ترتیب اکنون قادر خواهیم بود که طیف کوارکونیم های مختلف را به کمک معادلات (۱۳) و (۱۴) به دست آوریم. برای این منظور $k = 0.13 \text{ GeV}^2$ و $m_b = 5 \text{ GeV}$ و $m_c = \frac{mb}{3} = 1.67 \text{ GeV}$ (انتخاب کرده با معلوم فرض کردن $\psi_{1s}(3097)$ و $\phi_{1s}(1020)$ مقدار $m_s = 0.4 \text{ GeV}$ و $v_0 = -0.518 \text{ GeV}$ قابل محاسبه خواهند بود. مقادیر محاسبه شده برای مجموعه های $c\bar{c}$ و $b\bar{b}$ در جدولهای (۳-۱) داده شده اند.

با مقایسه مقادیر به دست آمده و مقادیر تجربی می توان دید که با وجود سادگی پتانسیل انتخاب شده همخوانی نتایج با تجربه تقریباً خوب است.

در بخش بعد برای بهبود نتایج به دست آمده از پتانسیلهای پیچیده تری که به واقعیت نزدیکتر خواهند بود استفاده خواهیم کرد.

۳. محاسبه طیف $q\bar{q}$ با استفاده از پتانسیلهای پیچیده تر $(s(r) \neq 0, v(r) = 0)$

در بررسی طیف کوارکونیم به کمک معادله شرودینگر تاکنون پتانسیلهای بسیاری انتخاب شده اند. این گونه پتانسیلها یا کاملاً پدیده شناختی هستند مانند پتانسیل مارتین [۲] و یا اینکه بر مبنای استدلالهای سازگار با QCD ساخته شده اند همانند پتانسیل کرنل [۲]. در اینجا به بررسی دو پتانسیل پیچیده تر از آنچه در بخش قبل بررسی گردید، برای تولید طیف $q\bar{q}$ با استفاده از معادله KG خواهیم پرداخت:

جدول ۴. مقادیر محاسبه شده برای $c\bar{c}$ با پتانسیلهای (۱۵) و (۱۶).
جرم حالات مختلف در پتانسیل (۱۵) به کمک رابطه
 $E_n = \sqrt{\lambda m \epsilon_n + 4m^2}$ که در آن $\psi_n = E_n - 0.336 \text{ GeV}$
آمده است. (Theo 1.) و برای پتانسیل (۱۶) از
 $\psi_n = E_n = \sqrt{\lambda m \epsilon_n + 4m^2 + \lambda m v}$ که در آن
 $v_0 = -0.289 \text{ GeV}$ به دست آمده است (Theo 2.)

$N^{2S+1}L_J$	$b\bar{b}$ Meson	m_{exp}	Theo.1	Theo.2	Ref.9
1^3S_1	$\Upsilon(1S)$	9460	9460	9460	9444
1^3P_0	$\chi_b(1P)_{COG}$	9900	9895	9871	9894
2^3S_1	$\Upsilon(2S)$	10023	10025	10024	9995
2^3P_0	$\chi_b(2P)_{COG}$	10261	10264	10244	10270
3^3S_1	$\Upsilon(3S)$	10355	10360	10357	10366
4^3S_1	$\Upsilon(4S)$	10580	10615	10610	10610
5^3S_1	$\Upsilon(5S)$	10865	10827	10826	10850
6^3S_1	$\Upsilon(6S)$	11019	11012	11018	11066

جدول ۵. مقادیر محاسبه شده برای $b\bar{b}$ با پتانسیلهای (۱۵) و (۱۶).
جرم حالات مختلف در پتانسیل (۱۵) به کمک رابطه
 $E_n = \sqrt{\lambda m \epsilon_n + 4m^2}$ که در آن $\psi_n = E_n - 0.472 \text{ GeV}$
آمده است. (Theo 1.) و برای پتانسیل (۱۶) از
 $\psi_n = E_n = \sqrt{\lambda m \epsilon_n + 4m^2 + \lambda m v}$ که در آن
 $v_0 = -0.0869 \text{ GeV}$ به دست آمده است (Theo 2.)

$N^{2S+1}L_J$	$c\bar{c}$ Meson	m_{exp}	Theo.1	Theo.2	Ref.9
1^3S_1	J/Ψ	3097	3097	3097	3136
2^3S_1	$\Psi(2S)$	3686	3677	3685	3678
3^3S_1	$\Psi(3S)$	4040	4054	4067	4066
4^3S_1	$\Psi(4S)$	—	4351	4379	—
1^3P_0	$\chi(1P)_{COG}$	3525	3493	3501	3525
1^3D_1	$\Psi(3770)$	3770	3764	3773	3737
2^3D_1	$\Psi(4160)$	4160	4108	4120	4102
3^3D_1	$\Psi(4415)$	4415	4389	4415	4404

جدول ۳. مقادیر محاسبه شده برای $s\bar{s}$ به کمک معادله (۱۰) با
پتانسیل $s + \frac{s^2}{2m} = kr + v_0$ جرم حالات مختلف با جایگذاری
ویژه مقادیر به دست آمده از معادله (۱۲) در
 $\psi_n = E_n = \sqrt{\lambda m \epsilon_n + 4m^2 + \lambda m v}$ به دست آمده است.

($s\bar{s}$)-State

2233—

1976—

1857—

1655—

1613—

1396—

1020*—

$L = 0$

$L = 1$

$L = 2$

$L = 3$

*Input

الف - پتانسیل ایندیانا [۸]:

$$s(r) = \frac{4}{3} \frac{6\pi}{33-2n_f} \left(1 - \frac{r}{r_0}\right)^2 \frac{1}{r \text{Ln} \frac{r}{r_0}} \quad (15)$$

که در آن n_f تعداد طعم و r_0 عددی ثابت است.

ب -

$$s(r) = \frac{4}{3} \frac{\alpha_s}{r} + k \text{Ln} \frac{r}{r_0} + cr^2, \quad (16)$$

α_s , k و c اعداد ثابتی هستند.

رفتار پتانسیلهای فوق در شکلهای یک و دو آورده شده
است. اکنون با استفاده از معادله (۱۰) و با جایگذاری
پتانسیلهای (۱۵) و (۱۶) در آن می توان طیف کوآرکونیم ها را به
کمک محاسبات عددی محاسبه کرد. نتایج به دست آمده در
جداول (۴-۶) داده شده است. باید توجه داشت که طیف
محاسبه شده برای $s\bar{s}$ (آورده شده در جدول (۶) تنها توسط
پتانسیل (۱۶) انجام گرفته است. برنامه های مربوط به محاسبات
عددی در پیوست داده شده است.

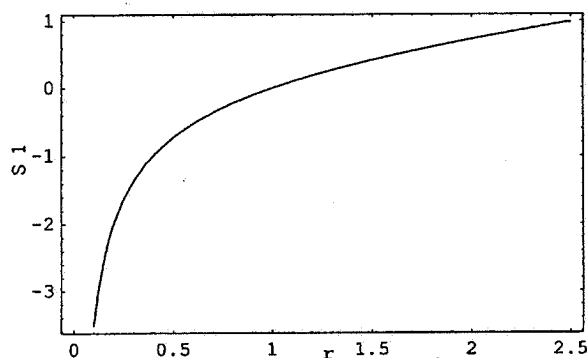
در محاسبات عددی انجام شده $m_b = 4/4 \text{ GeV}$
 $m_c = 1/5 \text{ GeV}$ و $m_s = 0/5 \text{ GeV}$ انتخاب گردیده است.
همچنین مقدار ثابت r_0 در پتانسیل (۱۵) برای $c\bar{c}$ برابر با
 $1/440 \text{ GeV}$ و برای $b\bar{b}$: $1/567 \text{ GeV}$ انتخاب شده است.

جدول ۶. مقادیر محاسبه شده برای $\bar{s}s$ با پتانسیل (۱۶). جرم حالات مختلف به کمک $\psi_n = E_n = \sqrt{\lambda m \varepsilon_n + 4m^2 + \lambda m v_0}$ که در آن $v_0 = -0.447 \text{ GeV}$ به دست آمده است.

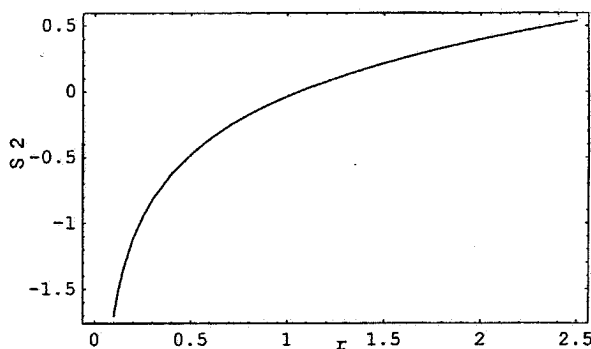
($\bar{s}s$)-State

	$L = 0$	$L = 1$	$L = 2$	$L = 3$
2412—				
2066—				1915—
1648—			1694—	
1020*—		1420—		

*Input



شکل ۱. منحنی تغییرات پتانسیل ایندیانا برحسب r



شکل ۲. منحنی تغییرات پتانسیل (۱۶) برحسب r

۴. نتیجه گیری

در این مقاله برای رهایی از مشکلات بسیار زیاد در حل معادله BS با معرفی یک مدل ساده به بررسی نسبیتی دستگاه $q\bar{q}$ بدون در نظر گرفتن اسپین کوارکها پرداختیم. نتیجه این مدل به صورت رابطه (۸) می باشد. این معادله دو ذره ای شبیه به معادله KG برای یک ذره آزاد می باشد. با در نظر گرفتن پتانسیل اسکالر برای دستگاه $q\bar{q}$ معادله ای به صورت (۱۰) خواهیم داشت که در حد غیرنسبیتی به معادله شرودینگر با پتانسیل $s(r)$ تبدیل می گردد. این معادله برای یک پتانسیل عام جواب تحلیلی نداشته و در اکثر موارد باید به صورت عددی حل گردد. با انتخاب $s(r) + \frac{s'(r)}{2m} = kr + v_0$ می توان ترازهای انرژی را به صورت تحلیلی در حالت $l=0$ به دست آورد (معادله (۱۳)). برای l های مخالف با صفر نیز می توان (هر چند با تقریب) مقادیر ویژه را به صورت تحلیلی محاسبه کرد (معادله (۱۴)). طیف به دست آمده به کمک مقادیر ویژه محاسبه شده خیلی به مقادیر تجربی نزدیک نیست (جداول ۱ و ۲). علت این امر سادگی پتانسیل انتخاب شده است. برای بهبود جوابها از دو پتانسیل دیگر (معادلات (۱۵) و (۱۶)) استفاده شد. این پتانسیلها که به صورت کیفی به هم شبیه هستند (اشکال ۱ و ۲) به جوابهای نسبتاً دقیقی منجر می شوند (جداول ۴ و ۵). در این دو حالت جوابهای محاسبه شده نسبت به تجربه در اکثر موارد خطایی کمتر از یک درصد دارند. جوابهای به دست آمده همچنین قابل قیاس با مدل QPE (که معادله ای نسبیتی برای دو ذره در فضای تکانه است [۹]) می باشد (جداول ۴ و ۵). در انتها ذکر این نکته لازم است که هر چند به کمک معادله شرودینگر نیز می توان جوابهای نسبتاً خوبی برای پتانسیلهای مختلفی از جمله ایندیانا به دست آورد ولی نکته مورد توجه در این مقاله این است که دستگاه کوارکونیم یک دستگاه نسبیتی است و باید تصحیحات نسبیتی را حتماً در نظر گرفت. این گونه تصحیحات در معادله (۱۰) در نظر گرفته شده است.

قدردانی

نویسندگان از پروفیسور شویرل به خاطر در اختیار گذاشتن برنامه حل معادله شرودینگر برای حالت مقید با استفاده از نرم افزار

مقادیر (α, k, c, r_0) در پتانسیل (۱۶) برای $\bar{c}c$ ، $\bar{b}b$ و $\bar{s}s$ به ترتیب برابر با $(0.03, 0.567, 0.0057, 1)$ ، $(0.03, 0.0057, 0.0057, 1)$ و $(0.03, 0.0057, 0.0057, 1)$

است. Mathematica تشکر می‌کنند. قسمتی از هزینه‌های طرح پژوهشی فوق توسط دانشگاه صنعتی اصفهان پرداخت شده

مراجع

- 1669.
5. W Greiner, Relativistic Quantum Mechanics, Springer- Verlag (1990).
F Dominguez- Adame, *Phys. Lett. A* **136** (1989) 175.
6. J S Kang and H J Schmitzer, *Phys. Rev. D* **12** (1975) 841.
7. M Fabre De La Ripeiie, *Phys. Lett.* **205D** (1988) 97.
8. D B Lichtemberg et al, *Z. Phys. C* **41** (1989) 615,
Z. Phys. C **46** (1990) 75.
9. A J Sommerer, J R Spence and J P Vary, *Phys. Rev. C* **49** (1994) 513.
10. W Lucha and F F Schoberl, *hep-ph/9811453 V29* Jan 1999.
1. F J Yandarain, The Theory of Quark and Gluon Interactions, 3rd edition, Springer- Verlag, (1998).
H J Rothe, Lattice Gauge Theories, 2nd edition, World Scientific, (1996).
2. W Lucha, F F Schoberl and D Gromes, *Phys. Rep.* **200** (1991) 127.
C Quigg, *hep-ph/9707493 v2* 14 Dec 1998.
G Bhonat and S Rudaz, *Phys. Lett.* **78B** (1978) 119.
E Eichten, *Phys. Rev. D* **22** (1980) 1819.
A Martin, *Phys. Lett.* **100B** (1981) 511.
3. N Nakanishi, ed. Behavior of the Solutions to the Bethe- Salpeter equation, *prog. Theor. Phys. Suppl.* **95** (1988)
4. D B Lichtenberg, *Int. J. Mod. Phys. A* **2** (1987)

پیوست ۱:

برنامه‌ای که در صفحات بعدی می‌آید. برنامه حل معادله شرودینگر برای حالت‌های مقید است که با استفاده از نرم‌افزار Mathematica نوشته شده است [۱۰]. معادله‌ای که برنامه حل می‌کند، معادله شعاعی شرودینگر می‌باشد. البته می‌توان با قرار دادن $l=0$ در برنامه آن را برای یک بعد نیز به کار برد.

طریقه استفاده از این برنامه به این صورت است که ابتدا باید پتانسیل را در جلو عبارت ۷۱ به صورت تابعی از x وارد کرده سپس مقادیر خواسته شده را در زیربرنامه Schore

[$el, eu, n_0, l, h, m_1, m_2$] قرار داد که در آن el حد پائین انرژی دستگاه eu حد بالای آن، n_0 تعداد گره‌های تابع موج که متناظر به شماره تراز انرژی می‌باشد، l تکانه زاویه‌ای، h گام انتگرال‌گیری و m_1, m_2 جرم ذرات تشکیل دهنده دستگاه می‌باشد. در اینجا فرض شده است که دستگاه متشکل از دو جسم می‌باشد.

به این طریق با اجرای زیربرنامه schore انرژی حالت‌های مقید و توابع موج متناظر به دست می‌آید.

v1[x_] :=

SOLVING THE SCHROEDINGER EQUATION FOR BOUND STATES WITH MATHEMATICA 3.0

This software is based on : Solving the Schrödinger Equation for Bound States by
P. Falkensteiner, H. Grosse, Franz F. Schberl, P. Hertel
Computer Physics Communication 34 (1985) 287 - 293

The energy and the reduced
radial wave function for a bound state with given number of
nodes n0 and angular momentum

l is calculated. The potential has to be spherical symmetric. *)

Print[StyleForm["Usage:

\nel lower bound of the energy,
\neu upper bound of the energy
\nn0 radial excitations, number of nodes
\nl orbital excitations,
\nfeh error on the energy, build in as FEH=0.00001
\nh integration stepsize, determines the number of the integration steps
\n and thus the accuracy of the determined energy
\nml, m2 constituent masses",

FontColor ->

RGBColor[0.0156252, 0.234379, 0.980484], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 14]]

Print[StyleForm["schroe[el,eu,n0,l,h,ml,m2] calling procedure",

FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0]]]

Print[

StyleForm["The output reduced wave function (not normalized) is called yschr[x].

\nThe plot of the wave function is called yschrplot.

\nExample, harmonic oscillator:

\n(1) Define potential: v1(x_) := x^2", FontColor ->

RGBColor[0.0156252, 0.234379, 0.980484], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 14]]

Print[StyleForm["Note: The name of the potential must be v1",

FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0]]]

Print[StyleForm[

"(2) Start solving the Schroedinger equation: schroe[-1,20,1,2,0.1,0.336,0.336]

\nThe above procedure will solve the equation for the first radial and second

\norbital excitation.", FontColor -> RGBColor[0.0156252, 0.234379, 0.980484],

FontWeight -> "Bold", FontSize -> 14]]

Print[StyleForm["The equation to be solved is (with $\hbar = c = 1$, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$):

$$\nabla \left[\frac{1}{2\mu} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] Y_{n,l}(r) = E_{n,l} Y_{n,l}(r), \quad \text{yschr}[x] \equiv Y_{n,l}(r),$$

$$\nabla \Psi_{n,l,m}(\vec{r}) = \frac{Y_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\Omega), \quad \int_0^\infty (Y_{n,l}(r))^2 dr = 1.,$$

FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0]]]

Print[StyleForm[

"The accuracy can be increased by decreasing h, this increases the number of
\nintegration steps. The higher the number of integration steps the more accurate

\nthe eigenvalues as well as the eigen functions. The reduced wave function will
\nbe plotted in addition.

A measure for the accuracy is also the shape of the wave

\nfunction. It should vanish for the largest numerical x, otherwise one has to

\ndecrease h.",


```

FontColor ->
  RGBColor[0.0156252, 0.234379, 0.980484], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 14]]
Print[StyleForm["If you run schroe[e1,eu,n0,l,h,m1,m2]
  you automatically will be asked if you like to plot the reduced
  \nwave function.", FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0]]];
(* xwmin1 calculates the
  minimum of the potential most to the right. The minimum is called
  xwmin. xrat is some guessed x-
  value most to the right (here xrat = 20). weil is the
  stepsize of the minimum search (here is xweil = 0.5). *)
xwmin1[l1_, h1_, weil_, xrat1_, ww1_] :=
Module[{l = l1, h = h1, weit = weil, xrat = xrat1, ww = ww1},
  del = h/10;
  xs = xrat;
  If[xs < del, Goto[11]];
  If[l < 1, Goto[3]];
  Label[1];
  If[xs < weit + del, xs = del; Goto[2]];
  ms = ww*vl[xs] + 1*(1+1)/xs^2;
  rs = ww*vl[xs + weit] + 1*(1+1)/(xs + weit)^2;
  ls = ww*vl[xs - weit] + 1*(1+1)/(xs - weit)^2;
  If[rs > ms && ms > ls, xs = xs - weit; Goto[1]];
  If[rs < ms && ls > ms, xs = xs + weit; Goto[1]];
  If[rs = ls, Goto[2]];
  If[rs > ms && ls > ms, If[weit < h, Goto[2]]; weit = weit/10; Goto[1]];
  Print["SOMETHING IS WRONG, ANALYZE POTENTIAL"];
  Goto[10];
  Label[3];
  Label[1 a];
  If[xs < weit + del, xs = del; Goto[2]]; *
  ms = ww*vl[xs];
  rs = ww*vl[xs + weit];
  ls = ww*vl[xs - weit];
  If[rs > ms && ms > ls, xs = xs - weit; Goto[1 a]];
  If[rs < ms && ls > ms, xs = xs + weit; Goto[1 a]];
  If[rs = ls, Goto[2]];
  If[rs > ms && ls > ms, If[weit < h, Goto[2]]; weit = weit/10; Goto[1 a]];
  Print["SOMETHING IS WRONG, ANALYZE POTENTIAL"];
  Goto[10];
  Label[11];
  Print["XMIN TOO SMALL"];
  Goto[10];
  Label[2];
  xwmin = xs;
  Label[10];
  Return["end"]]
(* The program schroe *)
schroe[e11_, eu1_, n01_, l1_, h1_, m1_, m2_] :=
Module[{e1 = e11*ww, eu = eu1*ww, n0 = n01, l = l1, h = h1, w1 = m1, w2 = m2},
  (* Determining the minimum of the potential most to the right *)
  ww = 2*w1*w2/(w1 + w2);
  xwmin1[l, h, 0.5, 20, ww];
  xwmin = xwmin + h;
  del = h/10;

```

```

feh = 0.00001*ww;
(* Defining diff1 = Veff - e, y'' = (Veff - e) y *)
diff1[xxx_, l_, een_] := ww*vl[xxx] + 1*(1+1)/xxx^2 - een;
Label[300];
    seh = eu - el;
    eps = (el + eu) / 2;
(* Starting the integration with the boundaries y(del) = del^(1+1),
y'(del) = (1+1) del^1
and with the energy eps
equal to the arithmetic mean of the preceding lower and upper
bounds of energy el and eu *)
    x = del;
    y = x^(1+1);
    yp = (1 + 1) * x^1;
    yold = 1;
    n0x = 0;
(* If the desired accuracy
(prescribed error feh) has been obtained, the bound state
energy is taken as the arithmetic mean of the last el and eu *)
    If[seh < feh, Goto[1]];
(* Integrating y'' =
(Veff - e) y one step h further with the Runge - Kutta method *)
Label[2];
    a1 = yp*h;
b1 = diff1[x, l, eps]*h*y; a2 = (yp + b1/2)*h; hh = diff1[x + h/2, l, eps]*h;
    b2 = hh*(y + a1/2); a3 = (yp + b2/2)*h; b3 = hh*(y + a2/2); a4 = (yp + b3)*h
    x = x + h; u2 = diff1[x, l, eps]; b4 = u2*h*(y + a3);
    y = y + (a1 + 2*a2 + 2*a3 + a4) / 6;
    yp = yp + (b1 + 2*b2 + 2*b3 + b4) / 6;
(* Counting the number of nodes by n0x until the prescribed n0 is reached *)
    If[y*yold > 0, Goto[3]];
    n0x = n0x + 1;
    If[n0x > n0, Goto[4]];
Label[3];
    yold = y;
(* If the following condition is not fulfilled,
x is greater then the classical turning
point (u2 has the value of Veff - eps at the point x). *)
    If[(u2 < 0 || x < xwmin), Goto[2]];
(* If (after stating that
x greater then the classical turning point) y*yp is greater
than 0 (i.e. y and yp have the same sign), one is sure that y goes to infinity
without having additional nodes. Otherwise one has to integrate further *)
    z = y*yp;
    If[z < 0, Goto[2]];
(* If y goes to infinity, a new el is established by eps. *)
    el = eps;
    Goto[300];
(* If nox exceeds n0, a new eu is established by eps *)
Label[4];
    eu = eps;
    Goto[300];
(* In the following lines the
wave function y is calculated using the above calculated bound
state energy (the last eps)

```

```

by the same method as above. In addition y is stored in feld1
at x which is stored in xcoord,
and the number of integration steps is counted by j. *)
Label[1];
  ep = eps;
  j = 0;
Label[20];
  j = j + 1;
  feld1[j] = y;
  xcoord[j] = del + (j - 1) * h;
  j1 = j;
  xmax = xcoord[j1];
(* Integrating y'' =
(Veff - e) y one step h further with the Runge - Kutta method *)
  a1 = yp * h;
b1 = diff1[x, 1, eps] * h * y; a2 = (yp + b1 / 2) * h; hh = diff1[x + h / 2, 1, eps] * h;
  b2 = hh * (y + a1 / 2); a3 = (yp + b2 / 2) * h; b3 = hh * (y + a2 / 2); a4 = (yp + b3) * h;
  x = x + h; u2 = diff1[x, 1, eps]; b4 = u2 * h * (y + a3);
  y = y + (a1 + 2 * a2 + 2 * a3 + a4) / 6;
  yp = yp + (b1 + 2 * b2 + 2 * b3 + b4) / 6;
  If[y * yold > 0, Goto[30]];
  n0x = n0x + 1;
  If[n0x > n0, Goto[40]];
Label[30];
  yold = y;
  If[(u2 < 0 || x < xmin), Goto[20]];
  z = y * yp;
  If[z < 0, Goto[20]];
Label[40];
(* The reduced radial wave
function yschr obtained from the interpolation of the data stored
in feld1 and in xcoord *)
  yschr = Interpolation[Table[{xcoord[j], feld1[j]}, {j, 1, j1}]];
  xmax = xcoord[j1];
(* Output of the resulting energy eigenvalue and the input data *)
Print[
  StyleForm["E = ",
  FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 16],
  StyleForm[N[ep / ww, 10], FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0],
  FontWeight -> "Bold", FontSize -> 16], ",",
  StyleForm["L = ",
  FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 16],
  StyleForm[l,
  FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 16], ",",
  StyleForm["N = ",
  FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 16],
  StyleForm[n0,
  FontColor -> RGBColor[0.996109, 0, 0], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 16], ",",
  "\nIntegrationsteps = ", j1, ",", " h = ",
  h, ",", " del = ", del, ",", " al = ", a1, ",", " eu = ", eul,
  ",",
  StyleForm["\nLargest x, upper integration limit, XMAX = ",
  FontColor -> RGBColor[0, 0, 0.996109], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 16],
  StyleForm[xmax,
  FontColor -> RGBColor[0, 0, 0.996109], FontWeight -> "Bold", FontSize -> 16], ",",

```

```

StyleForm["\nSmallest x, lower integration limit, XMIN = del = ",
FontColor->RGBColor[0, 0, 0.996109], FontWeight->"Bold", FontSize->16],
StyleForm[del,
FontColor->RGBColor[0, 0, 0.996109], FontWeight->"Bold", FontSize->16], ". ",
StyleForm["\nThe reduced not normalized wave function is yschr[x].
\nThe normalizationfactor is given by:
\n1/NIntegrate[yschr[x]^2,{x,del,xmax}]", FontColor->
RGBColor[0.996109, 0.500008, 0.250004], FontWeight->"Bold", FontSize->16] ];
(* Preparing the plot of the reduced wave function yschr *)
zz = InputString[ "You like to plot the (not normalized)reduced
wave function? Type yes and click OK, otherwise click just OK "];
If[zz == "yes",
yschrplot = Plot[yschr[x], {x, del, xmax}, PlotStyle->GrayLevel[0],
AxesLabel->{"x", "yschr"}, DefaultFont->{"Times-Bold", 12},
Background->RGBColor[0.996109, 0.996109, 0], PlotLabel->
FontForm["          Not normalized\t reduced\n          wave function",
{"Helvetica-Bold", 14}]],
Print[StyleForm["OK NO PLOT", FontWeight->"Bold",
FontSize->18, FontColor->RGBColor[0, 0.500008, 0]]];
Return[]]
schroe[0, 10, 1, 1, 0.01, 9, 9]

```

Usage:

```

el ..... lower bound of the energy,
eu ..... upper bound of the energy
n0 ..... radial excitations, number of nodes
l ..... orbital excitations,
feh .....
error on the energy, build in as FEH=0.00001
h ..... integration stepsize,
determines the number of the integration steps
and
thus the accuracy of the determined energy
m1, m2 ..... constituent masses

```

`schroe[el,eu,n0,l,h,m1,m2]` calling procedure

The output reduced wave function (not normalized) is called `yschr[x]`.
The plot of the wave function is called `yschrplot`.
Example, harmonic oscillator:

(1) Define potential: `vl(x_) := x^2`

Note: The name of the potential must be `vl`

(2) Start solving the Schroedinger equation: `schroe[-1,20,1,2,0.1,0.336,0.336]`
The above procedure will solve the equation for the first radial and second orbital excitation.

The equation to be solved is (with $\kappa = c = 1$, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$):

$$\left[\frac{1}{2\mu} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] Y_{n,\ell}(r) = E_{n,\ell} Y_{n,\ell}(r), \quad \text{yschr}[x] = Y_{n,\ell}(r),$$

$$\Phi_{n,\ell}(r) = \frac{Y_{n,\ell}(r)}{r} Y_{\ell,m}(\theta), \quad \int_0^\infty (Y_{n,\ell}(r))^2 dr = 1.$$

The accuracy can be increased by decreasing h , this increases the number of integration steps. The higher the number of integration steps the more accurate the eigenvalues as well as the eigenfunctions. The reduced wave function will be plotted in addition. A measure for the accuracy is also the shape of the wave function. It should vanish for the largest numerical x , otherwise one has to decrease h .

If you run `schroe[e1,eu,n0,l,h,ml,m2]` you automatically will be asked if you like to plot the reduced wave function.

E = 0.5709505081, L = 1, N = 1,

Integrationsteps = 799, h = 0.01, del = 0.001, e1 = 0, eu = 10,

Largest

x, upper integration limit, XMAX = 7.981.

Smallest x, lower

integration limit, XMIN = del = 0.001.

The reduced not normalized wave function is `yschr[x]`.

The normalizationfactor is given by:

`1/NIntegrate[yschr[x]^2, {x, del, xmax}]`

OK NO PLOT