



محاسبه انرژی بستگی دو-جسمی با استفاده از معادلات همگن و ناهمگن لیپمن - شوئینگر به روش سه بعدی

فرزانه تهامی پورزرندی و مریم حسنونند

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

پست الکترونیکی: f.tahamipourzarandi@ph.iut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۰۲/۰۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۰۵/۱۰)

چکیده

محاسبات حالت‌های مقید به‌طور سنتی در پایه امواج پاره‌ای انجام گرفته است. در محاسبات پاره‌موجی، نیاز است تعداد زیادی از مولفه‌های پاره‌موجی در نظر گرفته شود که باعث پیچیده شدن محاسبات می‌شود. در این مقاله، ما با استفاده از متغیرهای برداری سه‌بعدی به حل معادلات همگن و ناهمگن لیپمن - شوئینگر برای سیستم دو-جسمی پرداخته و انرژی بستگی سیستم‌های دو-جسمی دوترون و هیدروژن اتمی را بررسی می‌کنیم.

واژه‌های کلیدی: معادله همگن لیپمن - شوئینگر، معادله ناهمگن لیپمن - شوئینگر، روش سه‌بعدی، دوترون، هیدروژن اتمی

۱. مقدمه

روش‌های حالت جفت شده در پایه گوسی^۴ [۱۱] نیز برای انجام محاسبات مربوط به انرژی قیدی دستگاه‌های چند جسمی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. لازم به ذکر است، در محاسبات پاره‌موجی مربوط به انرژی‌های میانی و بالا، نیاز است تعداد زیادی از مؤلفه‌های پاره‌موجی در نظر گرفته شود که این مسئله باعث پیچیده شدن محاسبات خواهد شد. در عوض، کار با متغیرهای برداری باعث می‌شود که تمامی اعداد کوانتومی مربوط به تکانه زاویه‌ای، بدون هیچگونه تقریب و یا ایجاد پیچیدگی در معادلات وارد شوند. بنابراین، ما به‌طور کامل از نمایش پاره

محاسبه حالت‌های مقید به‌طور سنتی در پایه امواج پاره‌ای انجام شده است. این محاسبات در فضاها تکانه [۱-۳]، پیکربندی [۴ و ۵] و یا به کار بردن هر دو فضا [۶] انجام گرفته‌اند. روش‌های مرسوم برای حل معادلات حالت مقید دستگاه‌های چند نوکلئونی، استفاده از روش‌های وردشی^۱ [۷] و تابع گرین با استفاده از تکنیک مونت کارلو^۲ [۸] بوده است. روش‌های وردشی هارمونیک هایپرسفیری همبسته^۳ [۹ و ۱۰] و

۱. Variational methods

۲. Green's-function Monte Carlo (GFMC)

۳. Hyper spherical harmonic variational techniques

۴. Gaussian basis coupled channel methods

از هارمونیک‌های گروهی پیروی می‌کند:

$$\langle \vec{p} | \psi \rangle \equiv \psi(\vec{p}) = \psi^l(p) Y_{l,m}(\hat{p}), \quad (4)$$

تنها حالت s را در نظر می‌گیریم:

$$\psi(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \psi(p), \quad (5)$$

بنابراین معادله انتگرالی (۳) به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$\psi(p) = \int_0^\infty dp' p'^2 \int_{-1}^1 dx' \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2\mu}} V(p, p', y) \psi(p'), \quad (6)$$

$$y = \hat{p} \cdot \hat{p}'$$

که $y = \hat{p} \cdot \hat{p}'$ بیانگر زاویه بین تکانه‌های p و p' است.

باتوجه به این که $\psi(p)$ وابستگی فضایی ندارد، بنابراین می‌توانیم برای ساده‌تر شدن معادلات بردار p را در راستای محور z انتخاب کنیم [۱۲].

$$\psi(p) = \int_0^\infty dp' p'^2 \int_{-1}^1 dx' \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2\mu}} V(p, p', x') \psi(p'), \quad (7)$$

از آنجایی که $\psi(p')$ و $V(p, p', x')$ به زاویه سمتی ϕ' وابسته نیستند، انتگرال نسبت به زاویه سمتی به راحتی انجام می‌شود:

$$\psi(p) = \frac{2\pi}{E - \frac{p^2}{2\mu}} \int_0^\infty dp' p'^2 \int_{-1}^1 dx' V(p, p', x') \psi(p'), \quad (8)$$

در اینجا تنها وابستگی به زاویه قطبی در پتانسیل وجود دارد، با انجام انتگرال نسبت به متغیر x' ، می‌توان این معادله را به صورت کلی زیر نوشت:

$$\psi_j = \sum_{i=1}^N K_{ij} \psi_i, \quad (9)$$

این رابطه به صورت $\psi = K\psi$ است، که در آن k ماتریسی با ابعاد $N \times N$ و ψ نیز ماتریس ستونی به ابعاد $N \times 1$ است که در بخش چهارم به چگونگی حل عددی این روابط می‌پردازیم. در واقع، این معادله حالت خاصی از معادله ویژه مقدری $K\psi = \lambda\psi$ است، لذا در حل این معادله ویژه مقدری به دنبال انرژی‌هایی هستیم که به ازای آنها، یکی از ویژه مقادیر ماتریس

موجی پرهیز کرده و به طور مستقیم با متغیرهای برداری سه‌بعدی کار می‌کنیم. کلاش و گلوکل [۱۲]، اولین کسانی بودند که از این دیدگاه استفاده کرده و به حل معادله شرودینگر سیستم مقید سه بوزونی در فضای تکانه پرداختند. آقای هادی زاده در پایان نامه کارشناسی ارشد [۱۳] و رساله دکترای [۱۴] خود از دیدگاه سه بعدی در حل معادلات مقید چند جسمی استفاده کرده است. ما در کار حاضر، از دیدگاه سه‌بعدی برای حل معادلات همگن و ناهمگن لیپمن-شوئینگر استفاده کرده و به بررسی سیستم‌های دو-جسمی دوترون و هیدروژن اتمی می‌پردازیم.

۲. معادلات همگن و ناهمگن لیپمن-شوئینگر

معادله شرودینگر یک سیستم مقید با پتانسیل برهمکنشی V به صورت زیر است:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (1)$$

که در آن ψ تابع موج سیستم و E انرژی بستگی آن است. این معادله را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$|\psi\rangle = G_0 V |\psi\rangle, \quad (2)$$

که به معادله همگن لیپمن-شوئینگر معروف است و $G_0 = (E - H_0)^{-1}$ انتشارگر آزاد نام دارد. با اعمال $\langle \vec{p} |$ از سمت چپ و وارد کردن عملگر همانی، این معادله در فضای تکانه به صورت معادله انتگرالی زیر خواهد بود:

$$\langle \vec{p} | \psi \rangle = \langle \vec{p} | G_0 V | \psi \rangle = \int_0^\infty dp' p'^2 \int_{-1}^1 dx' \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2\mu}} \langle \vec{p} | V | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi \rangle, \quad (3)$$

p تکانه هر یک از نوکلئون‌ها در چارچوب مرکز جرم، μ جرم کاهش یافته، ϕ زاویه سمتی و $x = \cos(\theta)$ است که در آن θ بیانگر زاویه قطبی است. حالت‌های $\vec{p} >$ نیز در واقع بیانگر ویژه حالت‌های هامیلتونی آزاد سیستم دو-جسمی در چارچوب مرکز جرم هستند. لازم به ذکر است چارچوب مورد استفاده، چارچوب غیرنسبیتی بوده و همچنین اسپین ذرات را در معادلات در نظر نمی‌گیریم. می‌دانیم بخش زاویه‌ای تابع موج

در رابطه فوق، تنها وابستگی به زاویه سمتی در پتانسیل دیده می‌شود. بنابراین با تعریف زیر، رابطه کمی ساده‌تر خواهد شد:

$$v(p', p'', x', x'') = \int_0^{2\pi} V(p', p'', x', x'' + \sqrt{1-x'^2} \sqrt{1-x''^2} \cos \varphi) d\varphi, \quad (16)$$

در نتیجه رابطه (۱۵) را می‌توان به صورت زیر نوشت [۱۳]:

$$t(p', p, x') = \frac{1}{2\pi} v(p', p, x') + \int_0^{\infty} dp'' p'' \int_{-1}^1 dx'' v(p', p'', x', x'') - \frac{1}{E - \frac{p''^2}{2\mu}} t(p'', p, x''), \quad (17)$$

لازم به ذکر است، در حل رابطه (۱۷)، به دنبال انرژی‌هایی هستیم که منجر به ایجاد قطب در ماتریس گذار t می‌شوند.

۳. پتانسیل‌های مورد استفاده

پتانسیلی که در محاسبات دو- جسمی مربوط به دستگاه دوترون در این مقاله استفاده شده، پتانسیل موضعی مالفلیت- تیجن [۱۶] است. این پتانسیل، در واقع، برهم‌نهی دو برهمکنش یوکاواای جاذبه بلند برد و دافعه کوتاه برد بوده و در فضای مکان به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$V(r) = V_R \frac{e^{-\mu_R r}}{r} - V_A \frac{e^{-\mu_A r}}{r}, \quad (18)$$

که در آن V_R ، μ_R و V_A ، μ_A به ترتیب پارامترهای قدرت و برد قسمت جاذبه و دافعه هستند. با استفاده از تبدیل فوریه می‌توان این پتانسیل را در فضای تکانه به صورت زیر به دست آورد:

$$V\left(\begin{matrix} \vec{p}' \\ \vec{p} \end{matrix}\right) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{V_R}{(\vec{p} - \vec{p}')^2 + \mu_R^2} - \frac{V_A}{(\vec{p} - \vec{p}')^2 + \mu_A^2} \right), \quad (19)$$

ما از پارامترهای مربوط به پتانسیل III ارائه شده در جدول I مقاله [۱۶] استفاده می‌کنیم.

دستگاه دو- جسمی دیگری که در این مقاله به بررسی انرژی بستگی آن می‌پردازیم، دستگاه ساده هیدروژن اتمی و یا همان پروتون و الکترون با پتانسیل کولنی خالص است. همان

k ، یک شود. روش دیگر جهت تعیین انرژی بستگی دو- جسمی، استفاده از معادله ناهمگن لیپمن- شوئیگر [۱۵] است. این معادله به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$t = V + VG_G t, \quad (10)$$

که در آن t عملگر گذار است. لازم به ذکر است معادله ناهمگن لیپمن- شوئیگر در توصیف پراکندگی غیرنسبیتی کاربرد دارد، اما می‌توان عملگر گذار t را در انرژی‌های منفی نیز برآورد کرد. بنابراین می‌توانیم از این معادله جهت تعیین انرژی بستگی استفاده کنیم.

با اعمال کت $|\vec{p}\rangle$ از سمت راست و برای $|\vec{p}'\rangle$ از سمت چپ و وارد کردن عملگر همانی، معادله (۱۰)، به معادله انتگرالی زیر منجر می‌شود:

$$\left\langle \vec{p}' \left| t(E) \right| \vec{p} \right\rangle = \left\langle \vec{p}' \left| V \right| \vec{p} \right\rangle + \int d^3 p'' \left\langle \vec{p}' \left| V \right| \vec{p}'' \right\rangle G_c(E) \left\langle \vec{p}'' \left| t(E) \right| \vec{p} \right\rangle, \quad (11)$$

ماتریس گذار t و پتانسیل برهمکنش V به زاویه بین p' و p وابسته هستند. به منظور حل معادله (۱۱)، به دنبال دستگاه مختصاتی هستیم که حل معادلات در آن ساده‌تر شود. بنابراین p را در راستای محور z انتخاب می‌کنیم. در این صورت سمتگیری بردارهای \vec{p}' و \vec{p}'' نسبت به این بردار، به صورت زیر است:

$$x' = \hat{p}' \cdot \hat{p} = \cos \theta', \quad x'' = \hat{p}'' \cdot \hat{p} = \cos \theta'', \quad (12)$$

$$y = \hat{p}' \cdot \hat{p}'' = \cos \gamma$$

می‌توانیم بردار \vec{p}' را در صفحه x - z انتخاب کنیم. در نتیجه رابطه کسینوس‌های این زوایا به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\cos \gamma = \cos \theta' \cos \theta'' + \sin \theta' \sin \theta'' \cos(\varphi'' - \varphi'), \quad (13)$$

$$\varphi' = 0 \rightarrow y = x' x'' + \sqrt{1-x'^2} \sqrt{1-x''^2} \cos \varphi'', \quad (14)$$

بنابراین می‌توان رابطه (۱۱) را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$t(p', p, x') = V(p', p, x') + \int_0^{\infty} dp'' p'' \int_{-1}^1 dx'' v(p', p'', x', x'') - \frac{1}{E - \frac{p''^2}{2\mu}} t(p'', p, x''), \quad (15)$$

را ایجاد کند. با استفاده از روش گسسته‌سازی گوس-لژاندر، رابطه (۱۷) به صورت زیر خواهد بود:

$$t(p', p, x') = \frac{1}{\sqrt{\pi}} v(p', p, x') + \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_p} w_i w_j \frac{\pi b}{\sqrt{\pi}} \left(1 + \left(\frac{p_i}{b} \right)^2 \right) v(p', p_i, x', x_j) \frac{p_i}{E - \frac{p_i}{\sqrt{\mu}}} t(p_i, p, x_j), \quad (24)$$

با تعریف

$$k(p', p_i, x', x_j, E) = w_i w_j \frac{\pi b}{\sqrt{\pi}} \left(1 + \left(\frac{p_i}{b} \right)^2 \right) v(p', p_i, x', x_j) \frac{p_i}{E - \frac{p_i}{\sqrt{\mu}}}, \quad (25)$$

در نهایت می‌توان معادله (۲۴) را به صورت زیر نوشت:

$$t(p_k, x_l) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} v(p_k, x_l) + \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_p} k(p_k, p_i, x_l, x_j, E) t(p_i, x_j) \quad (26)$$

این رابطه را می‌توان به صورت $At = B$ نوشت که شامل دستگاهی با تعداد $N \times N$ معادله و $N \times N$ مجهول است و ماتریس گذار t با استفاده روابط ماتریسی قابل محاسبه است. همچنین لازم به ذکر است، به دلیل منفی بودن انرژی، در این معادلات تکنیکی اتفاق نخواهد افتاد. اما تعریف پتانسیل کولنی در فضای تکانه به گونه‌ای است که در $p = p'$ دچار تکنیکی خواهد بود که باید با استفاده از روش‌های ریاضی در رفع این تکنیکی اقدام کرد.

ما نقاط انتگرال‌گیری متغیر p و x را برای هر دو رابطه (۸) و (۲۶)، به ترتیب برابر با $N_p = 40, N_x = 33$ در نظر گرفتیم. لازم به ذکر است هر قدر تعداد نقاط شبکه بیشتر باشد، حجم محاسبات و دقت انتگرال بیشتر خواهد بود.

محاسبات و برنامه‌نویسی با استفاده از زبان برنامه‌نویسی پایتون^۲ و با استفاده از بسته‌های نامپای^۳ و سایپای^۴ انجام گرفت.

طور که می‌دانیم پتانسیل کولنی در فضای مکان به صورت زیر نمایش داده می‌شود:

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{r}, \quad (20)$$

با استفاده از تبدیل فوریه، می‌توان پتانسیل کولنی را در فضای تکانه به صورت زیر نوشت:

$$V\left(\vec{p}, \vec{p}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}^2} \left(-\frac{Ze^2}{(p-p')^2} \right), \quad (21)$$

که می‌توان این پتانسیل را حالت ساده شده‌ای از پتانسیل مالفت-تیجن در فضای تکانه در نظر گرفت.

۴. حل عددی

ما معادلات (۸) و (۱۷) را به روش مستقیم [۱۷] و نه تکرار و به صورت عددی حل کرده‌ایم. همچنین از روش گسسته‌سازی گوس-لژاندر^۱ [۱۸]، جهت گسسته‌سازی و حل عددی انتگرال‌ها بهره برده‌ایم. در این روش، انتگرال تابع بر روی بازه $[-1, +1]$ به صورت زیر برآورد می‌شود:

$$\int_{-1}^{+1} f(x) dx = \sum_{i=1}^N w_i f(x_i), \quad (22)$$

که x_i و w_i به ترتیب بیانگر ریشه‌های تابع لژاندر نوع اول و توابع وزن نقطه‌ای هستند و N مرتبه تابع لژاندر و در واقع تعداد ریشه‌ها را مشخص می‌کند.

به طور مثال، در حل عددی رابطه‌ای مانند رابطه (۱۷)، به راحتی می‌توان انتگرال‌گیری روی متغیر x را انجام داد. اما جهت استفاده از روش گوس-لژاندر برای انجام انتگرال بر روی متغیر p ، لازم است بازه انتگرال‌گیری را از $[0, \infty]$ به $[-1, +1]$ منتقل کنیم. به همین منظور می‌توان از تغییر متغیر زیر استفاده کرد [۱۳]:

$$p'' = b \cdot \tan\left(\frac{\pi}{4}(1+x)\right), \quad (23)$$

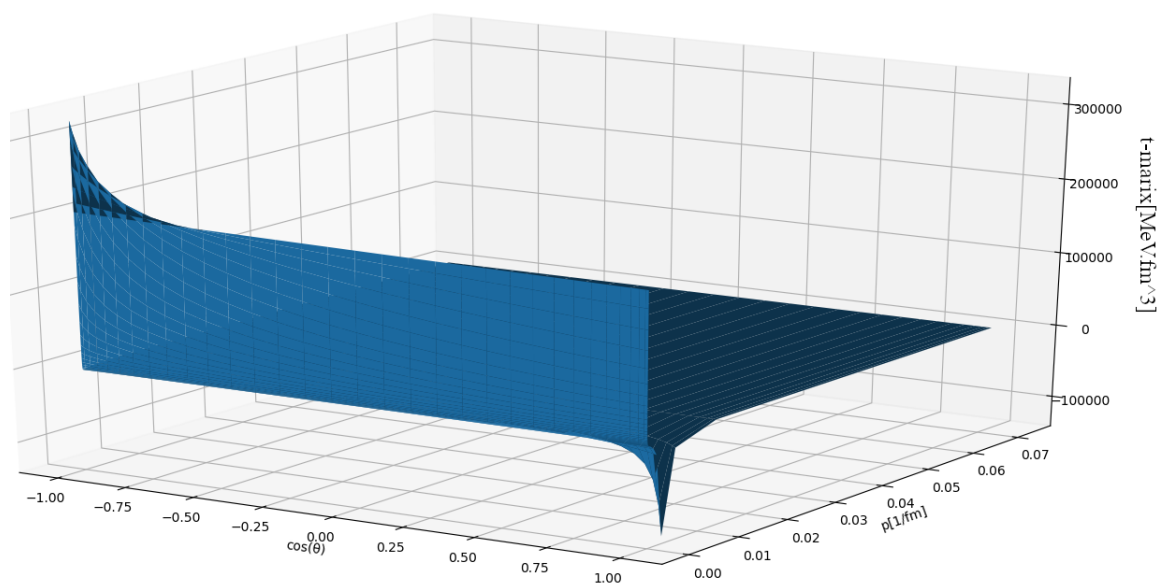
لازم به ذکر است، پارامتر b به گونه‌ای انتخاب می‌شود که انتگرال بر متغیر p'' بتواند مقدار $p_e = \sqrt{2\mu E}$ را به خوبی پوشش داده و همچنین بازه انتگرال‌گیری نسبتاً وسیع و مناسبی

۲. Python programming language

۳. Numpy

۴. Scipy

۱. Gauss-Legendre method



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) قطب ماتریس گذار t برای دستگاه پروتون-الکترون بر حسب تکانه و $\cos(\theta)$ در انرژی $E_{e-p} = -13/6eV$.

۵. نتایج

استفاده از روش پاره‌موجی انجام می‌شود که در این روش لازم است تعداد زیادی از مؤلفه‌های پاره‌موجی در محاسبات در نظر گرفته شوند. به طور مثال، در صورتی که می‌خواستیم از روش پاره‌موجی در حل معادلات استفاده کنیم، لازم بود پتانسیل و ماتریس گذار t بر حسب مؤلفه‌های اندازه حرکت زاویه‌ای بسط داده شوند. همچنین پتانسیل‌های جداناپذیر^۱ مالفلیت-تیجن و کولنی با استفاده از روش EST^۲ به بسطی از پتانسیل‌های جداناپذیر^۳ تقریب زده شوند. در این مقاله ما بدون استفاده از این تقریب‌ها و با استفاده از دیدگاه سه‌بعدی و کار با متغیرهای سه‌بعدی که روشی جدیدتر نسبت به روش پاره‌موجی است، توانستیم معادلات را با دقت بالایی حل کنیم. لازم به ذکر است تاکنون دستگاه مقید هیدروژن اتمی به روش سه‌بعدی در فضای تکانه مطالعه نشده بود. ما در مقاله حاضر نشان دادیم، می‌توان دستگاه‌های مقید کولنی را نیز به این به خوبی با استفاده از روش سه‌بعدی بررسی کرد.

با در نظر گرفتن نقاط شبکه $N_x = 33$ و $N_p = 40$ و پتانسیل مالفلیت-تیجن رابطه (۱۹) به عنوان پتانسیل برهم‌کنشی دوترون، با حل عددی معادله ویژه مقدار (۹)، انرژی بستگی $E_d = -2/23 MeV$ ، به ازای ویژه مقدار $\lambda = 1/0004$ و $b = 100$ به دست آمد. همچنین این محاسبات، برای دستگاه دو-جسمی هیدروژن به ازای پتانسیل کولنی به شکل رابطه (۲۲)، انرژی بستگی $E_{e-p} = -13/6eV$ را به ازای ویژه مقدار $\lambda = 1/0009$ و $b = 0/0001$ به دست داد.

همچنین، ما با حل عددی معادلات ناهمگن لیپمن-شوئینگر برای دستگاه‌های دو-جسمی دوترون و هیدروژن، ماتریس گذار t را به ازای این دستگاه‌ها به دست آوردیم. همان‌طور که مورد انتظار بود، این ماتریس‌های گذار t به ترتیب به ازای انرژی‌های بستگی $E_d = -2/23 MeV$ و $E_{e-p} = -13/6eV$ قطب دارند. قطب ماتریس گذار دستگاه دو-جسمی پروتون-الکترون به ازای انرژی $E_{e-p} = -13/6eV$ ، در شکل ۱ نمایش داده شده است. نتایج به دست آمده از حل ماتریس گذار تأییدی بر مقادیر به دست آمده در حل معادله همگن لیپمن-شوئینگر است.

همان‌طور که پیشتر ذکر شد، حل معادلات به‌طور سنتی با

۱. Non-separable potentials

۲. Ernst-Shakin-Thaler method

۳. Separable potentials

مراجع

12. O Kalusch, and W Glöckle, *Few- Body Syst.* **5** (1988) 79.
13. M R Hadizadeh, "Three Body Binding Energy Calculation Within Three Dimensional Scheme(Without Angular Momentum Decomposition)", Master thesis, University of Tehran, (2003).
14. M. R. Hadizadeh, "The Study and Investigation of the Three- and Four-Body Bound States in a Three-Dimensional Approach", Ph. D. thesis, University of Tehran, (2008).
15. B A Lippmann and J Schwinger, *Phys. Rev.* **79** (1950) 469.
16. R A Malfliet, and J A Tjon, *Nucl. Phys. A* **127** (1969) 161.
17. H W Wyld, W A Benjamin, *Mathematical Methods for Physics* (1976).
18. Sh Nakamura, *Applied Numerical Methods with Software, the Ohio State University, by Prentice-Hall. Inc.* (1991).
1. A Picklesimer, R A Rice, and R Brandenburg, *Phys. Rev. C* **45** (1992) 2045.
2. A Stadler, W Glöckle, P U Sauer, *Phys. Rev. C* **44** (1991)2319.
3. A Nogga, D. Hüber, H Kamada, W Glöckle, *Phys. Lett. B* **409** (1997)19.
4. J L Fariar, B F Gibson, and G L Payne, *Z Physik A* **301** (1981) 309.
5. N W Schellingerhout, L P Kok, and G D Bosveld, *Phys. Rev. A* **40** (1989) 5568.
6. Y Wu, S Ishikawa, T Sasakawa, *Few- Body Systems* **15** (1993) 145.
7. A Arriaga, V R pandharipande, R B Wiringa, *Phys. Rev. C* **52** (1995)2362.
8. J Carlson, *Phys. Rev. C* **36** (1987)2026.
9. M Viviani and A Kievsky, S Rosati, *Nuovo Cim.* **105** A (1992) 1473.
10. A Kievsky, L E Marcucci, S Rosati, and M Viviani, *Few- Body Syst.* **22** (1997)1.
11. H Kameyama, M Kamimura, and Y Fukushima, *Phys. Rev. C* **40** (1989) 974.