

روشی عددی برای حل معادله انتگرالی لیپمن - شوینگر با پتانسیل برهم کنشی شعاعی

ابراهیم قنبری عدیوی

گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان
پست الکترونیکی: ghanbari@phys.ui.ac.ir

(دریافت مقاله: ۸۵/۵/۱۵ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۶/۸/۲)

چکیده

در این مطالعه، روشی برای تبدیل معادله انتگرالی تکین دار لیپمن - شوینگر به یک معادله جبری ماتریسی ارائه شده است. این روش برای محاسبه عناصر ماتریسی عملگرهای واکنش و گذار به ترتیب بر روی محور حقیقی و صفحه مختلط به کار رفته است. با داشتن مقدار عناصر ماتریسهای واکنش و گذار در روی پوسته انرژی هم جابه جاییهای فاز و هم دامنه های جزئی پراکندگی و سطح مقطعهای جزئی قابل محاسبه اند. روش ارائه شده برای کوادراتورهای گوسی مبتنی بر چندجمله ایهای لزاندر، لاگور، هرمیت، ژاکوبی، چیشیف و عام چیشیف مناسب است و انتخاب نقاط گرهی و توابع وزنی به نوع مسئله و نظر کاربر بستگی دارد.

واژه های کلیدی: معادله لیپمن - شوینگر، ماتریس گذار، ماتریس واکنش، جابه جایی فاز، کوادراتور گوسی.

۱. مقدمه

مسائل فیزیک اتمی، هسته ای و ذرات بنیادی دانستن جابه جاییهای فاز الزامی است و این امر با دانستن پاسخ معادله انتگرالی لیپمن - شوینگر میسر می شود (به عنوان مثال [۵] را ببینید).

بنا به همین اهمیت در سالهای اخیر سعی شده است تا روشهای عددی مناسبی برای حل این معادله که دارای تکینگی ذاتی نیز می باشد، ارائه شود. به عنوان مثال کوادراتورهای تک نقطه ای و چند نقطه ای بر اساس خواص موجکهای دایوچی در مرجع [۷] برای حل معادلات انتگرالی ارائه شده است که ما آنها را برای حل معادله لیپمن - شوینگر با پتانسیل برهم کنشی یوکاوا به کار بردیم [۸]. در مرجع [۹] نیز روش مشابهی بر اساس خواص موجکها برای حل معادلات انتگرالی ارائه شده است. روشهای مبتنی بر نظریه تقریب و سایر روشهای عددی را می توان در [۱۰ و ۱۱] یافت. اخیراً نیز روشی عددی

معادله انتگرالی لیپمن - شوینگر یکی از معادلات اساسی در نظریه پراکندگی کوانتومی است. این اهمیت از آنجا ناشی می شود که از یک سو در بررسی کوانتومی فرایندهای برخورد، این معادله جایگزین معادله دیفرانسیلی شرودینگر و شرایط مرزی حاکم بر آن می شود و از سوی دیگر تمام فرمول بندیهایی که برای حل مسائل پراکندگی سه یا چند ذره ای ارائه شده اند به نحوی حاصل بازچینی معادله لیپمن - شوینگر هستند [۱]. به عنوان مثال سه معادله انتگرالی جفت شده فادیف در بررسی پراکندگیهای سه ذره ای حاصل شکستن تک معادله لیپمن - شوینگر حاکم بردینامیک کل سیستم سه ذره ای و بازچینی مناسب معادلات حاصل است. در واقع به دلیل تعدد شرایط مرزی و چند کانالی بودن برخوردهای سه ذره ای این تجزیه اجتناب ناپذیر است [۶-۲]. علاوه بر این در بسیاری از

$$V|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = T|\phi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (2)$$

و با اعمال (۲) در (۱) داریم:

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0 T |\phi_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (3)$$

با ضرب طرفین در V و استفاده مجدد از تعریف (۲) داریم:

$$T|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle + VG_0 T |\phi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (4)$$

چون رابطه (۴) برای هر $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$ دلخواهی که حالت مجانبی و آزاد سیستم دو جسمی را تعریف می‌کند برقرار است، بنابراین:

$$T = V + VG_0 T, \quad (5)$$

که به آن معادله لیپمن-شوینگر برای ماتریس گذار گفته می‌شود. با نوشتن معادله (۵) در فضای اندازه حرکت داریم:

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}'' \frac{\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k} \rangle}{E - (k''^2 / 2\mu) + i\epsilon} \quad (6)$$

که در آن از یکاهای اتمی استفاده کرده و تابع موج ذره آزاد را به صورت $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ بهنجار کرده‌ایم. μ جرم کاهش یافته سیستم دو ذره‌ای است. با تعریف $E = p^2 / 2\mu$ ، بسط قسمتهای شعاعی و زاویه‌ای، استفاده از خاصیت تقارن پتانسیل کروی، ویژگیها و شرط تعامد چندجمله‌ایهای لژاندر و هماهنگهای کروی، پس از انجام محاسبات ریاضی در نهایت به معادله انتگرالی زیر می‌رسیم، که آن را معادله لیپمن-شوینگر در یک بعد می‌نامند.

$$T_l(k, k') = V_l(k, k') + \frac{\mu}{2\pi^2} \int_0^\infty dk'' \frac{k''^2}{p^2 - k''^2 + i\epsilon} V_l(k, k'') T_l(k'', k'). \quad (7)$$

حل معادله در حالت کلی (به استثنای موارد خاص) به روش تحلیلی امکان پذیر نیست و باید از روشهای عددی برای حل آن استفاده کرد.

در اینجا لازم است که به رابطه میان دامنه‌های جزئی پراکندگی و مؤلفه‌های جزئی ماتریس گذار اشاره کنیم. دامنه پراکندگی بر حسب مؤلفه‌های جزئی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \quad (8)$$

که در آن $f_l(k)$ و $P_l(x)$ به ترتیب دامنه جزئی و چندجمله‌ای

برای حل مستقیم معادله لیپمن-شوینگر در سه بعد توسط کادیروف و همکاران گزارش شده است [۱۲].

در این مطالعه روشی برای تبدیل معادله انتگرالی لیپمن-شوینگر به معادله‌ای ماتریسی به صورت حاصل ضرب یک ماتریس معلوم $(N+1) \times (N+1)$ در یک ماتریس مجهول ستونی ارائه شده است. برای به دست آوردن این معادله از N نقطه گرهی کوادراتوری و یک نقطه مشاهده‌پذیر که مقدار عملگر واکنش یا عملگر گذار را روی پوسته انرژی تعیین می‌کند استفاده کرده‌ایم. با استفاده از روش وارون سازی ماتریسی و (یا) روش حذف گوسی به راحتی می‌توان پاسخ معادله را تعیین کرد.

طرح مقاله به این صورت است که در بخش دوم معادله انتگرالی لیپمن-شوینگر، برای عملگرهای گذار و واکنش در فضای اندازه حرکت و برای پتانسیلهای برهم‌کنش شعاعی به صورت یک‌بعدی استخراج گردیده و روشی برای حذف تکینگی معادله حاصل ارائه شده است. در بخش سوم روش عددی مورد نظر برای حل معادله توضیح داده شده است. در بخش چهارم نتایج به دست آمده تبیین و بررسی شده‌اند و بخش آخر را به نتیجه‌گیری اختصاص داده‌ایم.

۲. معادله لیپمن-شوینگر در یک بعد

در پراکندگی کشسان (الاستیک) دو جسمی، معادله لیپمن-شوینگر که هم ارز معادله شرودینگر به علاوه شرایط مرزی است به صورت زیر نوشته می‌شود [۱۳]:

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle = |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0^{(\pm)} V |\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle, \quad (1)$$

که در آن V پتانسیل برهم‌کنش دو جسمی، $|\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle$ تابع موج سیستم دو جسمی در چارچوب مرکز جرم، $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$ تابع موج مجانبی و عملگر گرین $G_0^{(\pm)} = \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}$ انتشار آزاد متناظر با هامیلتونی آزاد H_0 و مقدار بسیار کوچک ϵ را نشان می‌دهند. بدون آن که چیزی از کلیت بحث کاسته شود، در ادامه برای سادگی در نوشتار از آوردن علامت (\pm) خودداری می‌کنیم و فقط حالت + را مورد بحث قرار می‌دهیم. با تعریف ماتریس گذار دو جسمی به صورت:

$$T_l(k, k') = R_l(k, k') - \frac{i\pi\mu p R_l(k, p) R_l(p, k')}{(\pi\pi)^2 + i\pi\mu p R_l(p, p)} \quad (15)$$

مشاهده پذیرهای تجربی و نتایج نظری که از حل معادله (۷) یا (۱۳) یا (۱۴) به دست می آید، توسط جابه جاییهای فاز به هم مربوط می گردند. جابه جاییهای فاز طبق رابطه (۹) بر حسب مؤلفه های ماتریس گذار روی پوسته انرژی ($p = k = k'$) داده می شوند. معادله (۱۵) را می توان به صورت زیر بر روی پوسته انرژی نوشت:

$$T_l = \frac{(\pi\pi)^2 R_l}{(\pi\pi)^2 + \pi^2 \mu^2 p^2 R_l^2} \times [(\pi\pi)^2 - i\pi\mu p R_l] \quad (16)$$

و بنابراین با توجه به تساوی دوم در معادله (۹)، جابه جاییهای فاز به صورت زیر بر حسب مؤلفه های جزئی ماتریس برهم کنش R داده می شوند:

$$tg\delta_l = -\frac{\pi\mu p R_l(p, p; E)}{(\pi\pi)^2} \quad (17)$$

فرض کنیم پتانسیل برهم کنش تقارن کروی داشته باشد. با بسط توابع موج تخت بر حسب توابع بسل کروی نوع اول $j_l(x)$ و هماهنگهای کروی و انتگرال گیری روی قسمت زاویه ای و جمع زدن روی دلتاهای کروئکر داریم:

$$\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}' \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) V_l(k, k') Y_{l'm'}^*(\hat{\mathbf{k}}'), \quad (18)$$

که در آن:

$$V_l(k, k') = (\pi\pi)^2 \int_0^{\infty} dr r^2 j_l(kr) j_l(k'r) V(r), \quad (19)$$

ولی به دلیل ماهیت نوسانی توابع بسل کروی محاسبه انتگرال فوق بسیار دشوار و حتی ناممکن است. بنابراین برای پتانسیلهای شعاعی می توان از توابع لژاندر استفاده کرد، در معادله (۱۸) با جمع زدن روی m داریم:

$$\langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}' \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} V_l(k, k') P_l(\cos\gamma); \quad \cos\gamma = \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'. \quad (20)$$

با ضرب کردن طرفین در $P_l(\cos\gamma)$ و انتگرال گیری روی $\cos\gamma$ با استفاده از تعامد توابع لژاندر داریم:

$$V_l(k, k') = \pi \int_{-1}^{+1} \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}' \rangle P_l(x) dx; \quad x = \cos\gamma. \quad (21)$$

با وارد کردن رابطه بستاری در فضای موقعیت داریم:

لژاندر مرتبه l هستند. $f_l(k)$ و δ_l جابه جایی فاز مرتبه l با روابط زیر به عناصر ماتریس گذار مربوط می شوند:

$$f_l(k) = -\frac{\mu k}{\lambda\pi^2} T_l(k, k; E), \quad tg\delta_l = \frac{\text{Im}(T_l)}{\text{Re}(T_l)}. \quad (9)$$

سطح مقطع جزئی پراکندگی نیز با رابطه زیر از دامنه پراکندگی به دست می آید:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta)|^2. \quad (10)$$

گاهی بهتر است که معادله لیمن- شوینگر را بر حسب عملگر واکنش R بیان کنیم. می توان معادله انتگرالی زیر را برای ماتریس واکنش R به دست آورد:

$$R = V + V G_0^{(p)} R, \quad (11)$$

که به معادله انتگرالی لیمن- شوینگر برای ماتریس واکنش R معروف است. عملگر گرین $G_0^{(p)}$ با $G_0^{(p)} = P \frac{1}{E - H_0}$ که در آن P نشانگر مقدار اصلی کوشی است و می توان نشان داد:

$$G_0^{(\pm)} = G_0^{(p)} \mp i\pi\delta(E - H_0) \quad (12)$$

به روشی مشابه آنچه که برای ماتریس گذار T انجام دادیم، می توان معادله لیمن- شوینگر برای ماتریس واکنش R را به شکل انتگرالی زیر نوشت:

$$R_l(k, k') = V_l(k, k') + \frac{\mu}{4\pi^2} P \int_0^{\infty} dk'' \frac{k''^2}{p^2 - k''^2} V_l(k, k'') R_l(k'', k'), \quad (13)$$

که در به دست آوردن آن از واقعیت آمده در تعریف $G_0^{(p)}$ استفاده کرده ایم. مزیت این معادله آن است که برخلاف (۷)، در آن فقط با کمیتهای حقیقی سروکار داریم. همچنین با اعمال رابطه (۱۲) در (۵) و انجام محاسبات مشابه و یا اعمال مستقیم آن بر (۷) به معادله انتگرالی زیر می رسیم که البته معادل (۷) است.

$$T_l(k, k') = V_l(k, k') + \frac{\mu}{4\pi^2} P \int_0^{\infty} dk'' \frac{k''^2}{p^2 - k''^2} V_l(k, k'') T_l(k'', k') - \frac{i\pi\mu}{(\pi\pi)^2} p V_l(k, p) T_l(p, k'). \quad (14)$$

در اینجا لازم است که به رابطه میان ماتریس گذار T و واکنش R اشاره کنیم:

$$P \int_0^{+\infty} \frac{f(x)dx}{x^\nu - x_0^\nu} = \int_0^{+\infty} \frac{[f(x) - f(x_0)]dx}{x^\nu - x_0^\nu}, \quad (27)$$

استفاده کرده، علامت مقدار اصلی را حذف می‌کنیم:

$$R_l(k, k') = V_l(k, k') + \frac{\mu}{\epsilon\pi^\nu} \int_0^\infty dk'' \frac{1}{p^\nu - k''^\nu} \\ \times \{k''^\nu V_l(k, k'') R_l(k'', k') - p^\nu V_l(k, p) R_l(p, k')\}. \quad (28)$$

در این معادله پارامترهای k و k' هر مقدار دلخواهی را می‌توانند داشته باشند. ولی چون مقادیر روی پوسته انرژی از نظر فیزیکی دارای اهمیت هستند ما مقدار k' را برابر p انتخاب می‌کنیم، $k' = p$ ، و با استفاده از رابطه کوادراتوری مناسب انتگرال موجود را به یک مجموع تقریب می‌زنیم:

$$R_l(k, p) \simeq V_l(k, p) + \frac{\mu}{\epsilon\pi^\nu} \sum_{j=1}^N \frac{w_j}{p^\nu - k_j^\nu} \\ \times \{k_j^\nu V_l(k, k_j) R_l(k_j, p) - p^\nu V_l(k, p) R_l(p, p)\}, \quad (29)$$

که در آن مجموعه نقاط $\{k_j; j = 1, 2, \dots, N\}$ نقاط انتگرال‌گیری و مجموعه مقادیر ثابت $\{w_j; j = 1, 2, \dots, N\}$ ضرایب وزنی در روش انتگرال‌گیری هستند، که مقادیر آنها به نوع کوادراتور انتخاب شده بستگی دارد. معمولاً از کوادراتورهای گوسی در این مورد استفاده می‌شود. با فرض $k_{N+1} = p$ و در نظر گرفتن مقادیر گسسته $\{k_i; i = 1, 2, \dots, N+1\}$ برای پارامتر k در معادله بالا به صورت:

$$k_i = \begin{cases} k_j & ; \quad i = j = 1, 2, \dots, N \\ p & ; \quad i = N + 1 \end{cases} \quad (30)$$

به $N+1$ معادله جبری با همان تعداد مجهول می‌رسیم. این مجهولات عبارتند از N مقدار کوادراتوری $R_l(k_j, p)$ و یک مقدار مشاهده پذیر $R_l(p, p)$ که متناظر با مقدار ماتریس واکنش روی پوسته انرژی است. این مجهولات با مجموعه معادلات خطی حاصله به هم جفت شده‌اند. این معادلات عبارتند از:

$$R_l(k_i, p) \simeq V_l(k_i, p) + \frac{\mu}{\epsilon\pi^\nu} \sum_{j=1}^N \frac{w_j}{p^\nu - k_j^\nu} \\ \times \{k_j^\nu V_l(k_i, k_j) R_l(k_j, p) - p^\nu V_l(k_i, p) R_l(p, p)\}, \\ i = 1, 2, \dots, N + 1 \quad (31)$$

$$V_l(k, k') = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} dx P_l(x) \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \\ = (2\pi)^{5/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx P_l(x) \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (22)$$

که $\tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ تبدیل فوریه پتانسیل نسبت به $\Delta = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ است. با فرض شعاعی بودن پتانسیل باز هم داریم:

$$V_l(k, k') = -\epsilon i \pi \int_{-\infty}^{+\infty} dx P_l(x) \frac{1}{\Delta} \int_0^\infty dr r V(r) (e^{i\Delta r} - e^{-i\Delta r}). \quad (23)$$

به عنوان یک مثال ساده برای پتانسیل یوکاوا $V(r) = V_0 \frac{e^{-\lambda r}}{r}$ داریم:

$$V_l(k, k') = -\epsilon i \pi V_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx P_l(x) \frac{1}{\Delta} \int_0^\infty dr e^{-\lambda r} (e^{i\Delta r} - e^{-i\Delta r}), \quad (24)$$

یا:

$$V_l(k, k') = \lambda \pi V_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{P_l(x)}{\lambda^\nu + \Delta^\nu}; \\ \Delta^\nu = k^\nu + k'^\nu - 2kk'. \quad (25)$$

برای چنین پتانسیلی مؤلفه مرتبه صفرم پتانسیل عبارتست از:

$$V_0(k, k') = -\frac{\epsilon \pi V_0}{kk'} \ln \left(\frac{\lambda^\nu + (k - k')^\nu}{\lambda^\nu + (k + k')^\nu} \right) \quad (26)$$

۳. روش عددی برای حل معادله لیمن - شوینگر

اکنون در موقعیتی هستیم که می‌توانیم به حل عددی معادله انتگرالی لیمن - شوینگر پردازیم. منظور از حل معادله لیمن - شوینگر به دست آوردن عناصر ماتریس گذار، $T_l(p, p)$ ، یا به طور معادل عناصر ماتریس واکنش، $R_l(p, p)$ روی پوسته انرژی است که در معادله مذکور صدق می‌کند. با داشتن عناصر این ماتریسها روی پوسته انرژی، تمام اطلاعات مربوط به مسئله پراکندگی مانند دامنه‌های جزئی و کلی پراکندگی، جابه‌جاییهای فاز، سطح مقطعهای جزئی و کلی و... قابل حصول و محاسبه‌اند. به طور کلی در معادلات انتگرالی، بسته به رفتار انتگرالده روش محاسبه انتگرال نیز متفاوت است. به ویژه محاسبه انتگرالهای تکین دار و نیز انتگرالهای نوسانی روشهای خاص خود را می‌طلبد. مقدار خطا نیز به روش محاسبه بستگی دارد. ولی برای این معادله خاص، ابتدا از حل (۱۳) آغاز می‌کنیم. از معادله:

ساده و مستقیم برای ماتریس ارائه می‌دهد. روش دوم یافتن ماتریس \mathbf{R} است که بدون محاسبه ماتریس وارون رابطه (۳۷) را برآورده کند. این روش را روش حذف گوسی می‌نامند. با معلوم بودن عناصر ماتریس \mathbf{R} می‌توان با استفاده از (۱۵) مؤلفه‌های جزئی ماتریس گذار T و با استفاده از (۱۷) جابه‌جایی فاز متناظر با مرتبه l را محاسبه کرد. با تعیین جابه‌جایی‌های فاز متناظر با مرتبه‌های مختلف l همه چیز در مورد پراکندگی دو جسمی معلوم خواهد بود.

در اینجا لازم است که اشاره کنیم که با حل مستقیم معادله انتگرالی (۱۴) نیز می‌توان اطلاعات لازم در مورد پراکندگی دو جسمی مورد نظر را به دست آورد. در این حالت نیز با روشی مشابه آنچه که در بالا بحث شد به معادله زیر خواهیم رسید:

$$\sum_{j=1}^{N+1} D(k_i, k_j) T_l(k_j, p) - \frac{i\pi\mu}{(\gamma\pi)^\gamma} p V_l(k_i, p) T_l(p, p) = V_l(k_i, p); \quad i = 1, 2, \dots, N+1 \quad (38)$$

با وارد کردن جمله دوم در علامت مجموع داریم:

$$\sum_{j=1}^{N+1} F(k_i, k_j) T_l(k_j, p) = V_l(k_i, p); \quad i = 1, 2, \dots, N+1 \quad (39)$$

که در آن:

$$F(k_i, k_j) = \begin{cases} D(k_i, k_j) & ; \quad 1 \leq j \leq N \\ D(k_i, p) - \frac{i\pi\mu}{(\gamma\pi)^\gamma} p V_l(k_i, p) & ; \quad j = N+1 \end{cases} \quad (40)$$

معادله (۳۹) نیز دارای مقدار $(N+1)$ مجهول است: N مجهول کوادراتوری $T_l(k_j, p)$ و یک مجهول مشاهده‌پذیر $T_l(p, p)$ که متناظر با مقدار مؤلفه جزئی ماتریس گذار روی پوسته انرژی است.

این معادله را نیز می‌توان به صورت ضرب ماتریسی زیر بر حسب ماتریس مربعی $(N+1) \times (N+1)$ ، \mathbf{F} و ماتریسهای ستونی \mathbf{T} و \mathbf{V} ، که هر کدام مانند قبل دارای $(N+1)$ سطر هستند، نوشت:

$$\mathbf{FT} = \mathbf{V}, \quad (41)$$

اکنون تمام مجهولات را به طرف چپ معادله منتقل می‌کنیم. با کمی تغییرات ریاضی داریم:

$$\sum_{j=1}^N [\delta_{ij} - \frac{\mu}{\gamma\pi^\gamma} \frac{w_j}{p^\gamma - k_j^\gamma} k_j^\gamma V_l(k_i, k_j)] R_l(k_j, p) + [\delta_{i, N+1} + \frac{\mu}{\gamma\pi^\gamma} p^\gamma V_l(k_i, p) \times \sum_{m=1}^N \frac{w_m}{p^\gamma - k_m^\gamma}] R_l(p, p) \simeq V_l(k_i, p); \quad i = 1, 2, \dots, N+1 \quad (32)$$

یا به طور خلاصه‌تر داریم:

$$\sum_{j=1}^{N+1} D(k_i, k_j) R_l(k_j, p) = V_l(k_i, p); \quad i = 1, 2, \dots, N+1 \quad (33)$$

که در آن:

$$D(k_i, k_j) = \begin{cases} \delta_{ij} - \frac{\mu}{\gamma\pi^\gamma} \frac{w_j}{p^\gamma - k_j^\gamma} k_j^\gamma V_l(k_i, k_j) & ; \quad 1 \leq j \leq N \\ \delta_{i, N+1} + \frac{\mu}{\gamma\pi^\gamma} p^\gamma V_l(k_i, p) \sum_{m=1}^N \frac{w_m}{p^\gamma - k_m^\gamma} & ; \quad j = N+1 \end{cases} \quad (34)$$

مجموعه معادلات جفت شده در (۳۳) را می‌توان به صورت ضرب ماتریسی نمایش داد:

$$\mathbf{DR} = \mathbf{V} \quad (35)$$

که در آن \mathbf{D} ماتریسی مربعی و $(N+1) \times (N+1)$ است. \mathbf{R} و \mathbf{V} نیز ماتریسهای ستونی هستند که هر کدام دارای $(N+1)$ سطرند. عناصر این ماتریسها با توجه به روابط (۳۳) و (۳۴) به صورت زیر داده می‌شوند:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{ij} &= D(k_i, k_j) \\ \mathbf{R}_{i\lambda} &= R_l(k_i, p); \quad i, j = 1, 2, \dots, N+1 \\ \mathbf{V}_{i\lambda} &= V_l(k_i, p) \end{aligned} \quad (36)$$

برای یافتن عناصر مجهول ماتریس ستونی \mathbf{R} در واقع دو راه وجود دارد. راه اول حل معادله ماتریسی (۳۵) با استفاده از روش وارون‌سازی ماتریسی است. با ضرب طرفین این معادله در معکوس ماتریس \mathbf{D} از طرف چپ داریم:

$$\mathbf{R} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{V}. \quad (37)$$

چون در مباحث جبرخطی یافتن وارون ماتریسهای مختلط هم از روش استاندارد و معمول پیروی می‌کند معادله (۳۷) جوابی

با این حال در ادامه محاسبات انجام شده را بر مبنای کوادراتور گوس-ژاکوبی انجام خواهیم داد که در آن با یک تغییر متغیر ساده، بازه $[0, \infty)$ بر بازه $[-1, +1]$ نگاشته شده است. برای بحث بیشتر در مورد ضرایب وزنی و کوادراتورهای گوسی خواننده را به مرجع [۱۵] ارجاع می‌دهیم.

روش ارائه شده در بخش قبل را می‌توان برای پتانسیلهای پراکندگی شعاعی خوش‌رفتار به کار برد. آنچه که از حل معادلات جبری (۳۵) و (۴۱) به دست می‌آید و دارای اهمیت فیزیکی است، مقدار عددی ماتریس گذار، $T_l(p, p)$ یا ماتریس واکنش، $R_l(p, p)$ ، بر روی پوسته انرژی، است. در این بخش، به عنوان مثالی از کاربردهای روش ذکر شده، جابه‌جاییهای فاز، قسمت‌های حقیقی و موهومی ماتریس گذار بر روی پوسته انرژی، دامنه‌ها و سطح مقطعهای جزئی پراکندگی را برای پراکندگی ذره‌ای به جرم واحد در پتانسیل پراکندگی یوکاوا به معادله $\exp(-\nu r)/r$ ، را برای $l=0$ تا $l=10$ محاسبه می‌کنیم. دلیل این انتخاب آن است که در پراکندگیهای اتمی، گاهی پتانسیل پیچیده برهم‌کنش را با جمع یک پتانسیل کولنی و یک پتانسیل کوتاه‌برد تقریب می‌زنند. در اتمهای ساده و به ویژه برای الکترونهای لایه K ، پتانسیل یوکاوا تقریب خوبی برای بخش کوتاه‌برد است. گستره تغییرات انرژی پراکندگی را از 10 تا 500 eV که معادل تغییرات تکانه‌ای $0.86/\text{a.u.}$ است، در نظر گرفته‌ایم. در انجام محاسبات از کوادراتور گوس-ژاکوبی با نه نقطه گرهی استفاده شده است. بنابراین ماتریسهای \mathbf{F} و \mathbf{D} ماتریسهای 10×10 هستند که به روش حذف گوسی وارون آنها را پیدا کرده تا 10 معادله جبری جفت شده را همزمان حل کنیم.

شکل ۱ جابه‌جاییهای فاز را برحسب انرژی و عدد کوانتمی نشان می‌دهد. تغییرات جابه‌جایی فاز برحسب انرژی پراکندگی به ازای اعداد کوانتومی مدارهای مختلف و برحسب عدد کوانتومی مدارهای به ازای انرژیهای فرودی متفاوت نیز در شکل ۲ نشان داده شده است. همان‌گونه که از شکلها دیده می‌شود جابه‌جاییهای جزئی فاز به ازای l های بزرگ برای تمام مقادیر انرژی ممکن به سمت صفر می‌رود.

که در آن عناصر ماتریسی اجزاء مختلف به صورت زیر داده می‌شوند:

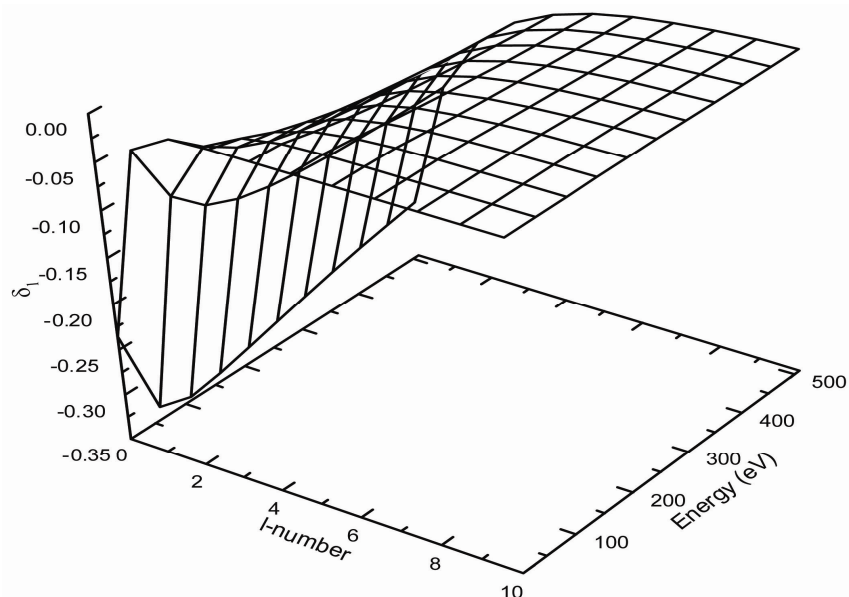
$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij} &= F(k_i, k_j) \\ \mathbf{T}_{i\lambda} &= T(k_i, p) \quad ; \quad i, j = 1, 2, \dots, N+1 \\ \mathbf{V}_{i\lambda} &= V(k_i, p) \end{aligned} \quad (42)$$

حل معادله (۴۱) نیز با دو فرایندی که در بالا توضیح دادیم امکان‌پذیر است. با این تفاوت که در اینجا با ماتریس مختلط \mathbf{F} تعریف شده در (۴۰) سر و کار داریم. در نتیجه مقادیری را که برای عناصر مجهول \mathbf{T} به دست می‌آوریم نیز مختلط خواهند بود.

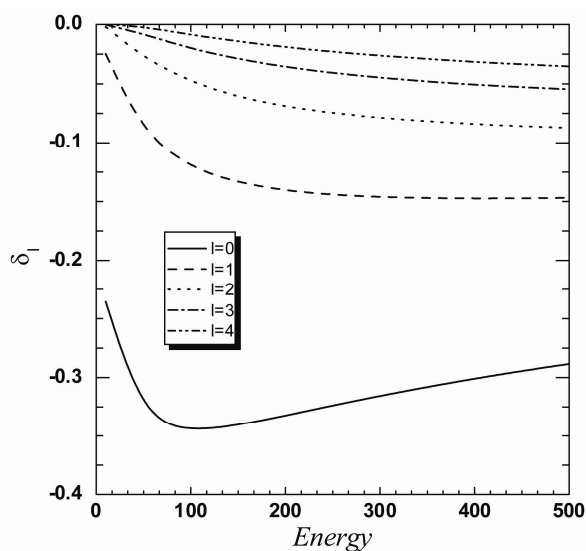
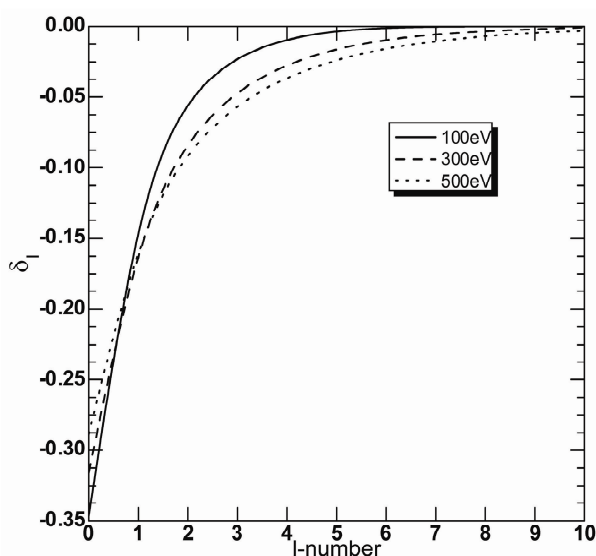
با حل معادله (۴۱) مقادیر مختلف مؤلفه مرتبه l ام ماتریس گذار خارج و روی پوسته انرژی به ازای انرژیهای مختلف به دست می‌آید. با معلوم بودن مقدار مؤلفه روی پوسته انرژی می‌توان با استفاده از (۹) جابه‌جایی فاز مرتبه l را بدست آورد و باز هم با معلوم بودن جابه‌جاییهای فاز مسأله پراکندگی به طور کامل حل شده است.

۴. نتایج و بحث

معادله شرودینگر برای پراکندگیهای دو ذره‌ای که در آنها پتانسیل برهم‌کنش سریعتر از $\frac{1}{r}$ افت می‌کند دارای جواب یکتا، محدود و معین است. به تبع معادله لیپمن-شونینگر نیز دارای این ویژگی است. ولی همان‌گونه که دیده شد این معادله دارای تکینگی ذاتی اما قابل حذف است [۱۴]. در آنچه که گذشت روشی برای حذف تکینگی مذکور ارائه شده است و حاصل نهائی معادله (۲۸) است که در غالب مسائل به روش عددی حل می‌شود. روش عددی ارائه شده در این مقاله، برای حل معادله مذکور مبتنی بر کوادراتورهای گوسی است که به معادله (۲۹) منجر شده است. ضرایب وزنی w_i به کوادراتور انتخاب شده بستگی دارند. بی‌نهایت بودن حد بالای انتگرال موجب نامتناهی بودن کل انتگرال نیست. به ویژه که کوادراتور مبتنی بر چندجمله‌ایهای لاگور را می‌توان مستقیماً برای محاسبه انتگرالها در بازه $[0, \infty)$ به کار برد. اگرچه روش ارائه شده در این مقاله را می‌توان برای تمام کوادراتورهای گوسی به کار برد،



شکل ۱. تغییرات جابجاییهای فاز بر حسب انرژی پراکندگی به ازای مقادیر مختلف عدد کوانتومی l .



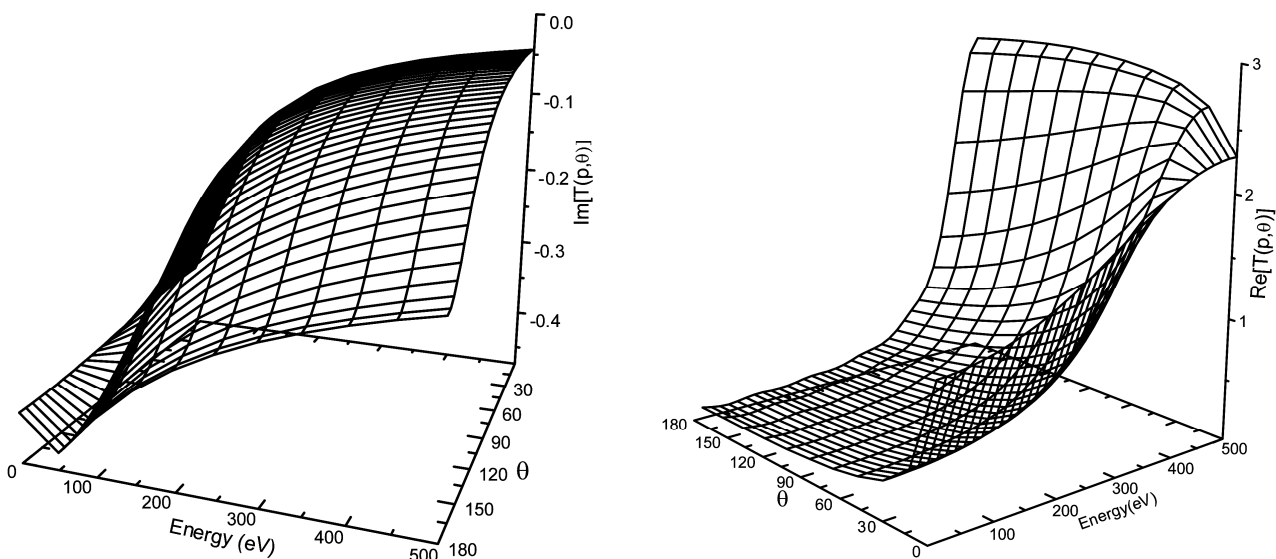
شکل ۲. تغییرات جابجایی فاز: الف) بر حسب انرژی پراکندگی به ازای اعداد کوانتومی مداری $l=0$ و $l=5$ (ب) بر حسب عدد کوانتومی مداری به ازای انرژیهای فرودی ۱۰۰، ۳۰۰ و ۵۰۰ eV.

زوایای پراکندگی کوچک بیشتر است، برای انرژیهای پراکندگی بالا این مقدار در زوایای پراکندگی بزرگ بیشتر از مقادیر متناظر در زوایای پراکندگی کوچک است.

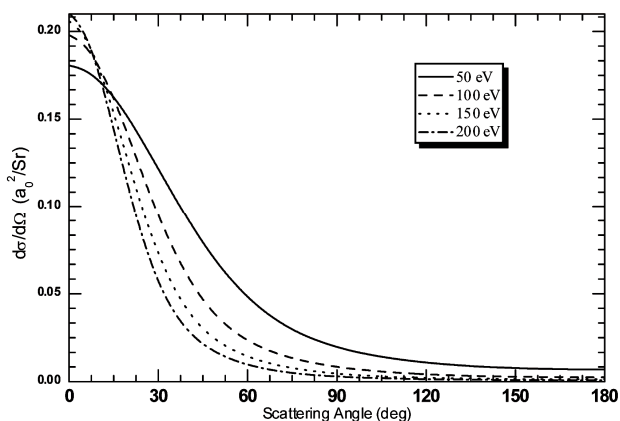
قسمت موهومی دامنه پراکندگی نیز در انرژیهای بالا و زوایای پراکندگی بالا، بیشترین مقدار و در انرژیهای پایین و زوایای پراکندگی بزرگ کمترین مقدار را دارد.

در شکل ۴، توزیع زاویه‌ای سطح مقطع پراکندگی به ازای همان انرژیهای فرودی برای تمام زوایای پراکندگی ممکن، و با

به ازای انرژی ۱۰۰ eV قدر مطلق جابجایی فاز δ_l نسبت به بقیه انرژیها بیشینه است. شکل ۳، قسمتهای حقیقی و موهومی ماتریس گذار را برای همان انرژیها و به ازای زاویه‌های پراکندگی 0° تا 180° درجه نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل نشان داده شده است قسمت حقیقی دامنه پراکندگی برای زوایای بزرگ و در انرژیهای پایین کمترین مقدار ممکن را دارد. در انرژیهای بالا این مقدار به طور قابل ملاحظه‌ای رشد دارد. برخلاف انرژیهای پائین که مقدار حقیقی ماتریس گذار در



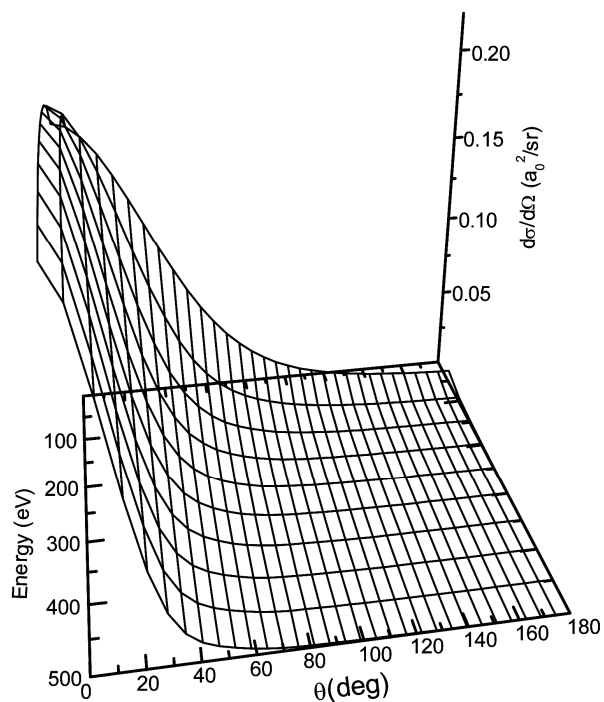
شکل ۳. مقادیر حقیقی و موهومی ماتریس گذار بر روی پوسته انرژی به ازای گستره انرژی ۵۰۰-۱۰ eV و زوایای پراکندگی ۱۸۰-۰ درجه.



شکل ۵. توزیع زاویه‌ای سطح مقطعهای جزئی پراکندگی به ازای انرژیهای فرود ۵۰، ۱۰۰، ۱۵۰ و ۲۰۰ eV.

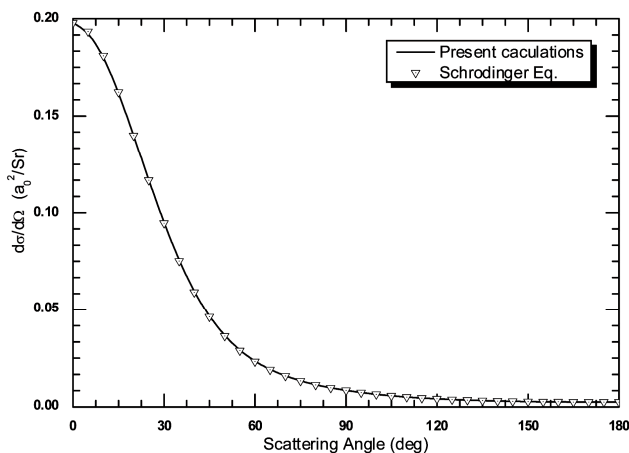
در شکل ۵، توزیع زاویه‌ای سطح مقطعهای جزئی پراکندگی به ازای انرژیهای فرود مختلف با یکدیگر مقایسه شده‌اند. همان‌گونه که در شکل دیده می‌شود، بیشینه سطح مقطع جزئی پراکندگی در زوایای پراکندگی نزدیک به صفر روی می‌دهد که با افزایش انرژی فرودی این بیشینه افزایش می‌یابد. با افزایش زاویه پراکندگی سطح مقطع سریعاً کاهش می‌یابد. با افزایش انرژی آهنگ افت سطح مقطع بر حسب تغییر زاویه پراکندگی افزایش می‌یابد.

در شکل ۶، قسمت‌های حقیقی و موهومی ماتریس گذار و در شکل ۷ سطح مقطع جزئی پراکندگی به ازای انرژی



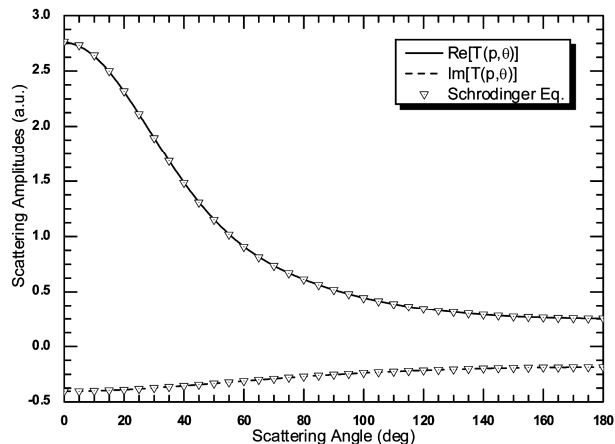
شکل ۴. توزیع زاویه‌ای سطح مقطع جزئی پراکندگی در گستره انرژی ۵۰۰-۱۰ eV و زوایای پراکندگی ۱۸۰-۰ درجه.

احتساب یازده مؤلفه جزئی، ($l=0, 10$)، و با محاسبه دامنه‌های پراکندگی متناظر با استفاده از روش ارائه شده، نشان داده شده است. برای تمام انرژیهای فرودی، سطح مقطع جزئی پراکندگی در زوایای کوچک بیشترین مقدار را دارد در زوایای بزرگ سطح مقطع به سمت صفر میل می‌کند.



شکل ۷. مقایسه نتایج به دست آمده، با استفاده از روش حاضر، با نتایج حاصل از معادله شرودینگر برای توزیع زاویه‌ای سطح مقطع جزئی پراکندگی به ازای انرژی فرودی ۱۰۰ eV و زوایای پراکندگی ۰-۱۸۰ درجه.

یک معادله جبری ساده تبدیل کردیم، به قسمی که حل معادله نسبتاً ساده جبری هم‌ارز معادله تکین دار و پیچیده لیپمن- شوینگر باشد. با معلوم بودن پتانسیل برهم کنش، می‌توان معادله جبری به دست آمده را برای به دست آوردن مؤلفه‌های جزئی ماتریسهای گذار و واکنش با هر l دلخواه روی پوسته انرژی حل کرد. مقدار مؤلفه‌های ماتریس واکنش حقیقی و مقدار مؤلفه‌های ماتریس گذار موهومی هستند. با معلوم بودن مقدار عناصر ماتریسهای واکنش و گذار، در روی پوسته انرژی، جابه‌جاییهای فاز، دامنه‌های جزئی پراکندگی و سطح مقطعهای جزئی قابل محاسبه‌اند. سطح مقطع پراکندگی مشاهده‌پذیر فیزیکی‌ای است که به روش نظری قابل محاسبه و به روش تجربی قابل اندازه‌گیری است.



شکل ۶. مقایسه نتایج به دست آمده، با استفاده از روش حاضر، با نتایج حاصل از معادله شرودینگر برای مقادیر حقیقی و موهومی ماتریس گذار بر روی پوسته انرژی به ازای انرژی ۱۰۰ eV و زوایای پراکندگی ۰-۱۸۰ درجه.

فرودی ۱۰۰ eV رسم شده است، مقادیر به دست آمده از این روش با مقادیر متناظر به دست آمده از حل مستقیم معادله شرودینگر با هم مقایسه شده‌اند. چنان که انتظار داریم، سطح مقطع جزئی در زوایای کوچک بیشینه است که با افزایش زاویه به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد. همان‌گونه که دیده می‌شود، توافق بسیار خوبی بین مقادیر به دست آمده با استفاده از این روش و مقادیر به دست آمده از حل معادله شرودینگر وجود دارد.

۵. نتیجه‌گیری

در روشی که ارائه شد، معادله انتگرالی و تکین دار لیپمن- شوینگر را، برای پتانسیلهای برهم کنش شعاعی، به یک معادله انتگرالی یک‌بعدی تبدیل کردیم. با استفاده از مقدار اصلی کوشی تکینگی موجود در این معادله را حذف کردیم. سپس با ارائه روشی مناسب، معادله انتگرالی را به

مراجع

1. D P Dewangan, J Eichler, *Phys. Rep.* **247** (1994) 59.
2. I R Afnan and A W Thomas, *Fundamentals of three-body scattering theory, Topics in Current Physics* **2** (1977) 1-47.
3. E Ghanbari Adivi, M J Brunger, M A Bolorizadeh and L Campbell, *Phys. Rev. A* **75** (2007) 022704.
4. E Ghanbari Adivi and M A Bolorizadeh, *Few-Body Syst.* **39** (2006) 11.
5. E Ghanbari Adivi and M A Bolorizadeh, *J. Phys.* **B** **37** (2004) 3321.

- Anal. Appl.*, **10** (2004) 645-660.
12. A S Kadyrov, I Bray, A T Stelbovics and B Saha, *J. Phys.*, **B 38** (2005) 509-515.
 13. T I Kopaleishvili, *Collision Theory: A Short Course*, World Scientific, Singapore (1995).
 14. C J Joachain, *Quantum Collision Theory*, North-Holland, Amsterdam (1975).
 15. W H Press, S A Teukolky, W T Vetterling and B P Flannery, *Numerical Recipes in C*, 2ed Edition, Cambridge University Press, Cambridge (1992).
 6. E Ghanbari Adivi and M A Bolorizadeh, *Hadronic J. Supplement*, **18** (2003) 345.
 7. B M Kessler, G L Payne and W N Polyzou, *Few-Body Syst.*, **33** (2003) 1-26.
 8. E Ghanbari Adivi and M A Bolorizadeh, *Ann. Iranian Phys. Conf.* (2005).
 9. M Kovacic, K Najzar and J Horacek, *Czech. J. Phys.*, **52** (2002) 41-50.
 10. H C Chiang and T Y Lee, *Chinese J. Phys.*, **10** (1972) 35-43.
 11. F Lanzara, V Maz'ya and G Schmidt, *J. Fourier*