

Calculation of $p\text{He}\mu$ and $d\text{He}\mu$ energy levels using a numerical - analytical method

Fatemeh Khoshkhooy¹, Mohammad Mohammadi¹, 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](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2019.14908)

Abstract

In the present paper, three body $d\text{He}\mu$ and $p\text{He}\mu$ 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 $p\text{He}\mu$ and $d\text{He}\mu$ 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 $p\text{He}\mu$ and $d\text{He}\mu$ molecules, respectively.

Keywords: Energy level, Ion $d\text{He}\mu$, Ion $p\text{He}\mu$, Analytical-numerical method, Nuclear size

*Corresponding author: gheisari@pgu.ac.ir

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

فاطمه خوشخوی¹، محمد محمدی¹، روح‌اله قیصری^{۱،۲*}

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](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2019.14908)

چکیده

در مقاله حاضر با استفاده از یک تابع موج آزمایشی به بررسی سیستم‌های سه جسمی $pHe\mu$ و $dHe\mu$ 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 به حل 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 به دست آمده و انرژی حاصل می‌توان سایر پارامترهای ساختاری همچون اندازه هسته را به دست آورد. در این کار، اندازه هسته یون‌ها نیز محاسبه شده‌اند. نتایج انرژی حاصل از این کار برای مولکول‌های $pHe\mu$ و $dHe\mu$ به ترتیب برابر با $-73,021\text{eV}$ و $-76,728\text{eV}$ می‌باشند. خطای نسبی نتایج کار حاضر در مقایسه با کارهای دیگران برای مولکول $pHe\mu$ کمتر از 1/135% و برای مولکول $dHe\mu$ کمتر از 1% می‌باشد.

کلیدواژگان: تراز انرژی، یون $dHe\mu$ ، یون $pHe\mu$ ، روش تحلیلی-عددی، اندازه هسته

مقدمه

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، به دست آورده و سپس به کمک روش وردشی، انرژی حالت پایه برای یون‌های $dHe\mu$ و $pHe\mu$ به دست می‌آید.

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 به ترازهای انرژی بستگی دارد. روش‌های متفاوتی نظیر تقریب بورن-اپنهایمر [1]، نمایش آدیاباتیک [2]، روش چند جعبه [3] و ... وجود دارد که هر کدام به صورت تقریبی، به نتایج تقریباً یکسانی منتج می‌شوند [4]. بسته به روش،

* نویسنده مسئول: gheisari@pgu.ac.ir



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

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

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.

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

$$z(\Omega) = V_{ij} + V_{ik} + V_{jk} = \quad 4$$

$$\frac{z_j z_k e^2}{d_i \cos \alpha_i} + \frac{z_i z_k e^2}{d_j \cos \alpha_j} + \frac{z_j z_i e^2}{d_k \cos \alpha_k}$$

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

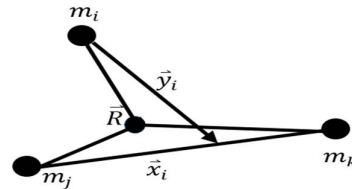
$$\langle K | \cos \alpha_{()}^p | K \rangle = \quad 5$$

$$N_{KK}^{l_{x()} l_{y()}} (-1)^{n+n} 2^{-(l_{x()} + l_{y()} + \frac{p}{2} + 3)}$$

$$\times C \left(l_{x()} + \frac{p}{2} + 1/2; n, l_{x()} + \frac{1}{2}, l_{y()} + \frac{1}{2}; n', l_{x()} + \frac{1}{2}, l_{y()} + \frac{1}{2} \right)$$

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

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



شکل 1. شمایی از سیستم سه جسمی در دستگاه مختصات ژاکوبی

روش کار

مطابق شکل 1، در دستگاه مختصات ژاکوبی مختصات سه جسم به جرم‌های m_i ، m_j و m_k با بردارهای مکان $(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

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

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 $\mu = \sqrt{\frac{m_i m_j m_k}{M}}$ در این کار تعیین جهت و علامت بردار \vec{x}_i با شرط تشکیل تعویض چرخه‌ای (i,j,k) که سه عدد از مجموعه $(1,2,3)$ 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) به صورت 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 به یکسان بودن این پارامتر در تمامی دستگاه‌های ژاکوبی و تغییر نکردن آن طی فرآیندهای انتقال، جایگشت و چرخش اشاره نمود. این پارامتر اطلاعاتی درباره اندازه سیستم می‌دهد.

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

$\bar{\Phi}(\rho)$ 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 رابنال-ریوای تعیین می‌گردد [7]. برای نوع خاصی از معادلات دیفرانسیل خطی درجه دوم می‌توان ویژه توابع متعامد آنها را به‌عنوان حل عمومی با استفاده روش NU به‌دست آورد [8 و 9]. معادله 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 درجه یک، $\sigma(\rho)$ و $\bar{\sigma}(\rho)$ چند جمله‌ای درجه دو می‌باشند. با اعمال تغییرات مناسبی در معادله 10 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 معادله 11 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 $\bar{\sigma}(\rho) = -K(K+4)$ و $Z\rho - E'$ فرض می‌شود. با استفاده از این روش خواهیم داشت:

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

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

ویژه توابع $y_{Kl_x l_y m_x m_y}(\Omega_i)$ توابع بهنجار شده عملگر \hat{K}^2 و هارمونیک فوق‌کروی نامیده می‌شوند و یک مجموعه کامل و متعامد را تشکیل می‌دهند:

$$y_{Kl_x l_y m_x m_y}(\Omega_i) = \quad 7$$

$$N_k^{1x_i, 1y_i} (\cos \alpha_i)^{1x_i} (\sin \alpha_i)^{1y_i} Y_{1x_i}^{m_x i}(\hat{X}_i) Y_{1y_i}^{m_y i}(\hat{Y}_i) \times P_{n_i}^{1y_i + \frac{1}{2}, 1x_i + \frac{1}{2}}(\cos(2\alpha_i))$$

در رابطه 5، $N_k^{l_x l_y}$ ضریب بهنجارش، $p_k^{(\alpha, \beta)}$ تابع ژاکوبی، $n_i = \frac{K - l_x - l_y}{2}$ و l_x, l_y به‌ترتیب ویژه مقادیر عملگرهای تکانه زاویه‌ای معمولی مربوط به بردارهای 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:

$$Y_{K\mu_i}(\Omega_i) = \quad 8$$

$$\sum_{m_x m_y} \langle l_x m_x l_y m_y | LM \rangle y_{Kl_x l_y m_x m_y}(\Omega_i)$$

μ_i یک مجموعه از اعداد کوانتومی $[l_x, l_y, L, M]$ است که در آن M, L به‌ترتیب تکانه 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 معادله 3 و ضرب $Y_{K\mu_i}^*(\Omega_i) d\Omega_i$ در دو طرف معادله و سپس انتگرال‌گیری روی همه زاویای ممکن Ω_i معادلات زیر حاصل می‌شوند:

پایه‌های فضای k ام (کانال k ام) بسط می‌دهند. ضرایب درست برای چنین تبدیلی را ضرایب راینال ریوای می‌نامند [7]:

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

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

$$\langle l_{x_k}l_{y_k} | l_{x_i}l_{y_i} \rangle_{KL} = \frac{\pi}{4} \left[C_{l_{x_i}l_{y_i}}^{n_i} C_{l_{x_k}l_{y_k}}^{n_k} \right]^{-\frac{1}{2}} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} i^{\lambda_3+\lambda_4+l_{y_i}-l_{y_k}} (-1)^{\lambda_1+\lambda_2+K} \quad 18$$

$$\begin{aligned} & \times f(\lambda_1, \lambda_3; l_{x_k}) f(\lambda_4, \lambda_2; l_{y_k}) f(\lambda_1, \lambda_4; l_{x_i}) f(\lambda_3, \lambda_2; l_{y_i}) \\ & \times \begin{Bmatrix} \lambda_1 & \lambda_3 & l_{x_k} \\ \lambda_4 & \lambda_2 & l_{y_k} \\ l_{x_i} & l_{y_i} & L \end{Bmatrix} \\ & \times \sum_{\mu\nu} (-1)^{\lambda_4} C_{\lambda_3\lambda_4}^{\mu} C_{\lambda_1\lambda_2}^{\nu} \cos(\varphi_{ki})^{2\nu+\lambda_1+\lambda_2} \\ & \sin(\varphi_{ki})^{2\mu+\lambda_3+\lambda_4} \end{aligned}$$

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

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

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

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

n_i و n_k اعداد صحیح زوج و این روابط نشان‌دهنده آنست که اعداد کوانتومی M ، L و K با رفتن از کانالی به کانال دیگر باید ثابت باقی بمانند. برای توصیف پایین‌ترین تراز انرژی یون‌های مورد نظر، به یک 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

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 به صورت زیر خواهد شد:

$$\psi(\rho) = \rho^K e^{-\sqrt{E}\rho} L_n^{2(K+2)}(2\sqrt{E}\rho) \quad 15$$

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 به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\psi(\rho, \Omega_i) = \sum_{K\mu_i}^{K_{max}} \sum_{n=0}^{N_{max}} C_{K\mu_i}^n \rho^K e^{-b\rho} L_n^{2(K+2)}(2b\rho) Y_{K\mu_i}(\Omega_i) \quad 16$$

در این رابطه، $b = \sqrt{E}$ بوده و با محاسبه ضرایب بسط $C_{K\mu}^n$ ویژه تابع سیستم مشخص می‌شود. در رابطه 16 پارامترهای N_{max} و K_{max} به ترتیب حداکثر درجه چند جمله‌ای لاگر و حداکثر عدد تکانه زاویه‌ای کل می‌باشد [9]. در بررسی توابع پایه به‌ازای ρ های 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 به هسته خواهد شد. در حالت کلی دستگاه‌های مختصات ژاکوبی (i, j, k) کاملاً معادل می‌باشند و برای هر کدام از آنها می‌توان یک مجموعه کامل از هارمونیک‌های فوق‌کروی تصور نمود به نحوی که هر کدام از آنها به مجموعه‌ای از هماهنگ‌های کروی برای توصیف فضای پنج بعدی فوق‌کروی منتج می‌شود. هر یک از پایه‌های فضا را می‌توان برحسب مجموعه‌ای دیگر از پایه‌های فضا بسط داد. بنابراین، پایه‌های فضای M ام (کانال M ام) را برحسب

اندیس s بیانگر اعداد کوانتومی (K, μ_i, n) است [9]. با توجه به شرح روش وردشی خطی در مرجع [12 و 13] برای نیل به کمینه ویژه مقدار انرژی باید ضرایب بسط (پارامترهای وردشی $C_{K\mu_i}^n$) را بهینه نمود به نحوی که دترمینان مربوطه صفر بشود:

21

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

در این کار به صورت عددی به ازای مقادیر متفاوت $E' = -\frac{2\mu}{\hbar^2} E$ ، به طور معادل، ابتدا توابع فضای برداری محاسبه، سپس در دترمینان 18 جای‌گذاری می‌شوند. با انجام این کار به جای حل مستقیم دترمینان (روش حل شده در مرجع 9)، علاوه بر آنکه جواب‌های معادله با دقت و در زمانی کمتر به دست می‌آید، حجم زیادی از محاسبات را نیز می‌کاهد. به علاوه 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 به نحوی پیدا نمود که نتیجه این دترمینان به ازای مقادیر ابتدا و انتهای این بازه تغییر علامت بدهد. با سعی و خطا و کوچک نمودن چنین بازه خاصی به بهترین جواب تقریبی مطلوب برای ویژه مقدار حاصل از روش وردشی معادله شرودینگر 10 مربوط به سیستم سه جسمی، نزدیک می‌شویم. به عبارت دیگر ما دنبال یک E خاص هستیم که به ازای آن دترمینان مورد نظر صفر بشود ولی چون چنین خواستی به صورت تحلیلی امکان پذیر نیست، به ناچار، به صورت عددی محاسبه دترمینان فوق را در بازه‌های کوچک E مورد مطالعه قرار می‌دهیم. دقت کنید به ازای هر N_{max} و K_{max} خاص این فرآیند باید به صورت مستقل تکرار

می‌باشد. پارامتر K برابر با $\vec{L} = \vec{l}_{x_i} + \vec{l}_{y_i}$ است به طوری که $K = l_{x_i} + l_{y_i} + 2n_i$ باید عدد صحیح غیر منفی باشد. در جدول 1 برخی از مجموعه اعداد کوانتومی مورد نیاز برای محاسبه 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 به محدودیت‌های حاکم بر اعداد کوانتومی، باید ترکیبی از اعداد را به نحوی انتخاب نمود که L کل صفر شود. با صفر شدن L و توجه به روابط بالا می‌توان دریافت $l_{x_i} = l_{y_i} \leq K/2$ از طرفی چون l_{x_i} و l_{y_i} باید از اعداد صحیح انتخاب نمود پس K نیز باید عددی زوج و صحیح باشد [11].

برای به دست آوردن تراز انرژی حالت پایه، تابع موج به دست آمده از محاسبات بالا را در فرمول روش وردشی $\mathcal{E} = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_1$ جای‌گذاری کرده و بدین ترتیب مقدار انرژی حالت پایه به دست می‌آید. در این روش، برای ساخت تابع موج آزمایشی $\psi(\rho, \Omega_i)$ تنها به تعداد معدودی از چند ویژه تابع شعاعی $\Phi_n(\rho)$ ($0 \leq n \leq N_{max}$) و تعداد محدودی از ویژه توابع زاویه‌ای $y_{K\mu_i}(\Omega_i)$ ($0 \leq n \leq K_{max}$) بسنده می‌شود. نکته مهمی که در اینجا فرض می‌شود اینست که برای تمامی ویژه توابع بسط 16، 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 آزمایشی 16 را می‌توان به شکل ساده زیر بازنویسی نمود [9]:

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

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 اندازه هسته‌های دو یون $dHe\mu$ و $pHe\mu$ به‌دست آمده که نتایج آن در جدول 2 می‌باشد.

جدول 1. مقادیر انرژی حالت پایه (برحسب eV) یون‌های $dHe\mu$ و $pHe\mu$ و مقایسه آنها با کار دیگران [14].

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

جدول 2. اندازه 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 خلیج فارس 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.

شود. جدول‌های 2 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 به‌نچار مورد نظر است.

با توجه به روابط 1 و 2 می‌توان اندازه هسته را چنین نوشت:

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

با توجه به تابع موج 20 به‌صورت زیر محاسبه می‌گردد.

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

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

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

نتیجه‌گیری

در جدول 1 ویژه‌مقادیر انرژی حاصل از کار حاضر با داده‌های دیگران مقایسه شده‌اند. در این جدول B-O معرف 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 به دیگر روش‌ها از جمله [9] (روش به‌کار برده شده در ادامه و تصحیح و تکمیل کننده مرجع ذکر شده است). از مزیت‌های این روش

[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 $(\mu\mu)_{1s} + \text{He}^{++}$ scattering and the influence of adiabatic corrections on $(\text{He}\mu\text{h})^{++}$ bound states, *Acta Physica Polonica A* **6** (2004) 756-816.

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

جدول 3. 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, Transformation Coefficients 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, Basel, (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).

جدول 5. 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

جدول 4. 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