بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده فیزیک

گروه فیزیک هسته ای

محاسبه‌ی طیف هسته‌ی اتم تریتیوم

جواد رحمت آبادی ثانی

استاد راهنما :

پروفسور علی اکبر رجبی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

بهمن ۱۳۹۲

به یاد پدرم

و

تقدیم به مادرم

تشکر و قدردانی:

برخود لازم می‌دانم از استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر علی‌اکبر رجبی که در تدوین این پایان‌نامه به‌طور مداوم از راهنمایی‌های ارزشمند ایشان بهره می‌بردم و همچنین از تمامی اساتید عزیز گروه فیزیک هسته‌ای دانشگاه صنعتی شاهرود که در مدت تحصیلم در این دانشگاه درس‌های زیادی از آنها آموختم، کمال تشکر و قدردانی را داشته باشم. از دوستان عزیزم که لحظات بسیار خوبی را در کنار آنها گذراندم متشکرم و در نهایت سپاسگذار زحمات مادر مهربانم هستم.

تعهد نامه

اینجانب **جواد رحمت آبادی ثانی** دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته **فیزیک هسته‌ای** دانشکده **فیزیک** دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه **محاسبه‌ی طیف هسته‌ی اتم تریتیوم** متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است

.

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده :

از آغاز تاریخچه‌ی فیزیک هسته‌ای تاکنون استفاده از مدلی که قادر باشد توصیف مناسبی از رفتار نوکلئون‌ها را که متأثر از نیروی هسته‌ای قوی موجود بین آنهاست ارائه دهد، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار بوده است. روش بسط هماهنگ‌های فوق‌کروی یکی از مطمئن‌ترین و موفق‌ترین روش‌ها جهت مطالعه‌ی سیستم‌های چند ذره‌ای در مکانیک کوانتومی نسبیتی و غیرنسبیتی است. ما قصد داریم با استفاده از این روش شکل مناسب معادله‌ی شرودینگر را برای سیستم هسته‌ای سه نوکلئونی تریتون استخراج کرده و پس از آن به منظور بررسی نظری حالت پایه و امکان وجود حالت مقید برانگیخته در طیف تریتون، این معادله را حل کنیم. در این راه استفاده از پتانسیل مناسبی که برآورد خوبی از پارامترهای استاتیکی حالت پایه (انرژی و شعاع باری) داشته باشد در دست‌یافتن به یک مدل پدیده‌شناسی از اهمیت زیادی برخوردار است. ما نخست از پتانسیل یوکاوا به‌عنوان پتانسیل نوکلئون- نوکلئون در تریتون استفاده کرده‌ایم و پس از آن به منظور نزدیک‌تر شدن به مقادیر تجربی و پتانسیل واقعی یک جمله اصلاحی به آن اضافه نموده‌ایم. نتایج برای هر دو مورد ارائه و با تجربه مقایسه شده است. در این کار برای حل معادله‌ی شرودینگر از روش عددی پرتاب استفاده کرده‌ایم. این روش یک انتخاب مناسب جهت حل دقیق معادلات ویژه‌مقداری مخصوصاً برای آن دسته از پتانسیل‌هایی است که حل تحلیلی دقیق برای آنها وجود ندارد (از جمله پتانسیل یوکاوا). روش پرتاب خود مبتنی بر الگوریتم‌های عددی دیگری نظیر روش رانگه-کوتا و روش ریشه‌یابی نیوتون-رافسن است.

کلمات کلیدی : فضای فوق کروی، معادله‌ی شرودینگر، روش عددی پرتاب، تریتون، انرژی بستگی

مقاله‌ی مستخرج از پایان نامه :

رحمت آبادی. جواد، رجبی. علی‌اکبر، "محاسبه‌ی انرژی بستگی دوترون و تریتون به کمک حل معادله‌ی شرودینگر به روش عددی پرتاب"، کنفرانس فیزیک محاسباتی ایران، ۳۰ دی تا ۲ بهمن ماه ۹۲، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی تهران

فهرست مطالب

فصل اول : مقدمه ای بر فیزیک هسته‌ای و ساختار هسته

۱-۱. مقدمه ۲
۱-۲. نیروهای موجود در طبیعت و مدل استاندارد ۳
۱-۳. خواص هسته ۴
۱-۳-۱. جرم، بار و اندازه ی هسته ۴
۱-۳-۲. انرژی بستگی ۶
۱-۳-۳. تکانه‌ی زاویه‌ای هسته ها و پاریته ۷
۱-۳-۴. حالات پایه و برانگیخته‌ی هسته ۸
۱-۴. انرژی نوکلئون ها در هسته ۹
۱-۵. مدل‌های هسته‌ای ۱۰
۱-۵-۱. مدل قطره مایعی ۱۱
۱-۵-۲. مدل لایه‌ای (پوسته‌ای) ۱۲
۱-۵-۳. مدل گاز فرمی ۱۴
۱-۵-۴. مدل های جمعی ۱۴

فصل دوم : نیروی هسته‌ای

۲-۱. مقدمه ۱۸
۲-۲. دوترون، ساده ترین حالت مقید نوکلئون ها ۱۸
۲-۲-۱. انرژی بستگی ۱۹
۲-۲-۲. اسپین و پاریته ۲۱
۲-۲-۳. گشتاورهای دو قطبی مغناطیسی و چارقطبی الکتریکی ۲۲
۲-۳. خواص عمومی نیرو و پتانسیل هسته ای ۲۳
۲-۴. مدل نیروی تبادل ۲۶

۲-۵. نیروهای چند جسمی ۲۹
۲-۶. پتانسیل های هسته‌ای ۳۰

فصل سوم : فضای فوق‌کروی

۳-۱. مقدمه ۳۲
۳-۲. مختصات ژاکوبی و فضای فوق کروی ۳۲
۳-۳. لاپلاسی سیستم، عملگر انرژی جنبشی و معادله ی شرودینگر در فضای فوق کروی..... ۳۶
۳-۴. هماهنگ‌های فوق‌کروی ۴۰
۳-۵. سیستم سه ذره ای ۴۲

فصل چهارم : روش‌های عددی

۴-۱. مقدمه ۴۶
۴-۲. انتگرال‌گیری عددی در معادلات دیفرانسیل معمولی ۴۶
۴-۳. روش رانگه کوتا ۴۸
۴-۳-۱. روش رانگه کوتای مرتبه دوم ۴۸
۴-۳-۲. روش رانگه کوتای مرتبه چهارم ۴۹
۴-۳-۳. روش رانگه کوتای مرتبه پنجم با اندازه‌ی گام بهینه ۴۹
۴-۴. مسائل دارای شرایط دو مرزی و ویژه مقداری ۵۱
۴-۴-۱. روش پرتاب ۵۲
۴-۴-۲. روش تطبیق (پرتاب به نقطه ی انطباق) ۵۵
۴-۵. نتایج حاصل از حل چند مسأله‌ی کوانتومی با استفاده از روش عددی پرتاب ۵۷
۴-۵-۱. اتم هیدروژن ۵۷
۴-۵-۲. دوترون ۵۸
۴-۵-۳. حالات مقید معادله ی شرودینگر دو جسمی در حضور پتانسیل منینگ-روزن ۶۰
۴-۵-۴. حالات مقید معادله ی شرودینگر دو جسمی در حضور پتانسیل یوکاوا ۶۲

فصل پنجم : نتایج

۵-۱. مقدمه ۶۶
۵-۲. تریتون ۶۶
۵-۳. یکاها و ابعاد مناسب ۶۶
۵-۴. روش پرتاب برای معادله‌ی شرودینگر ۶۷
۵-۵. بررسی حالات انرژی تریتون در حضور پتانسیل یوکاوا..... ۶۸
۵-۵-۱. انرژی بستگی و شعاع باری..... ۷۱
۵-۵-۲. حالات برانگیخته..... ۷۴
۵-۵-۳. بررسی حل تحلیلی با استفاده از شکل تقریبی جمله‌ی $1/x^2$..... ۷۶
۵-۶. بررسی تریتون در حضور پتانسیل یوکاوای اصلاح شده..... ۷۹
۵-۶-۱. انرژی بستگی و شعاع باری..... ۸۰
۵-۶-۲. حالات برانگیخته ۸۳

نتیجه‌گیری ۸۴
پیوست ۸۶
مراجع ۹۱

فهرست شکل‌ها

شکل (۱-۱) منحنی رابطه ی (۱-۲) برای $\rho(r)$ بر حسب r ۶
شکل (۱-۲) انرژی نخستین حالتهای +۲ در هسته‌های زوج زوج..... ۱۵
شکل (۲-۱) تابع موج دوترون برای $R = 2.1 fm$ ۲۱
شکل (۴-۱) توابع موج شعاعی برای حالات $(1,0)$ ، $(2,0)$ و $(2,1)$ اتم هیدرورژن..... ۵۹
شکل (۴-۲) تابع موج دوترون برای پتانسیل چاه مربعی با $R = 2.1 fm$ ۶۰
شکل (۴-۳) تابع موج شعاعی حالت $4p$ برای پتانسیل منینگ- روزن..... ۶۱
شکل (۴-۴) تابع موج شعاعی حالت $3p$ برای پتانسیل یوکاوا به ازای $V_0 = \sqrt{2}$ و $k = 0.002V_0$ ۶۲
شکل (۵-۱) تابع موج حالت پایه‌ی تریتون در حضور پتانسیل یوکاوا ۷۳
شکل (۵-۲) چگالی احتمال شعاعی حالت پایه‌ی تریتون در حضور پتانسیل یوکاوا ۷۴
شکل (۵-۳) تابع موج حالات برانگیخته در تریتون..... ۷۵
شکل (۵-۴) رفتار هریک از جملات و جمله کلی پتانسیل رابطه (۵-۲۸) ۸۱
شکل (۵-۵) تابع موج حالت پایه‌ی تریتون در حضور پتانسیل (۵-۲۸)..... ۸۲
شکل (۵-۶) چگالی احتمال شعاعی حالت پایه‌ی تریتون در حضور پتانسیل (۵-۲۸)..... ۸۲

فهرست جدول‌ها

جدول (۴-۱) ضرایب cash-karp..... ۵۰
جدول (۴-۲) ویژه مقادیر انرژی تحلیلی و عددی برای برخی حالات اتم هیدروژن..... ۵۸
جدول (۴-۳) برخی ویژه مقادیر انرژی $(-E_{nl})$ پتانسیل منینگ- روزن حاصل از روش های مختلف به ازای $b = 40$, $\alpha = 0.75$, $A = 2b$ و $\hbar = \mu = 1$ ۶۱
جدول (۴-۴) برخی ویژه مقادیر انرژی $(-E_{nl})$ (برحسب (fm^{-1})) پتانسیل یوکاوا به ازای $V_0 = \sqrt{2}$ و $\hbar = m = 1$ ۶۳
جدول (۵-۱) انرژی بستگی (قدر مطلق انرژی حالت پایه) و جرم هسته‌ای تریتون به ازای $k = 0.7\ fm^{-1}$ و مقادیر مختلف V_0 ..... ۷۲
جدول (۵-۲) طیف انرژی مثبت (نامقید) برای حالات برانگیخته در تریتون در حضور پتانسیل یوکاوا..... ۷۵
جدول (۵-۳) انرژی بستگی محاسبه شده با روش تحلیلی تقریبی به ازای $k = 0.7\ fm^{-1}$ و مقادیر مختلف V_0 ..... ۷۸
جدول (۵-۴) انرژی بستگی، جرم هسته‌ای و شعاع باری محاسبه شده برای تریتون به ازای برخی مقادیر پارامترهای پتانسیل (۵-۲۸)..... ۸۰
جدول (۵-۵) طیف انرژی مثبت (نامقید) برای حالات برانگیخته در تریتون در حضور پتانسیل (۵-۲۸)..... ۸۳

فصل اول

مقدمه‌ای بر فیزیک هسته‌ای و ساختار هسته

۱-۱- مقدمه

نقطه‌ی آغاز فیزیک هسته‌ای را می توان کشف پرتوزایی توسط بکرل در سال ۱۸۹۶ دانست. وی بطور اتفاقی به تیره شدن یک صفحه‌ی عکاسی در مجاوت نوعی سنگ معدن پی برد. اما بزرگترین شناخت از پرتوزایی توسط رادرفورد و همکارانش صورت گرفت که به ظهور فرضیه‌ی رادرفورد مبنی بر وجود هسته در اتم‌ها در سال ۱۹۱۱ منتهی گردید. امروزه درک نسبتاً خوبی از ساختار هسته و ویژگی های نیروی هسته‌ای که این ساختار را ایجاد می کنند، بدست آورده‌ایم. بطور کلی می‌توان گفت ساختار این نیرو که بطور ویژه در فصل بعدی به سراغ آن خواهیم رفت، بسیار پیچیده است.

فیزیک هسته‌ای، برخلاف فیزیک اتمی از چنان صورتبندی نظری منسجمی برخوردار نیست که با استفاده از آن بتوانیم تمام پدیده‌ها را به روشی بنیادی تجزیه و تحلیل کنیم. بدین ترتیب، در مطالعه‌ی فیزیک هسته‌ای باید شیوه ای پدیده شناختی در پیش بگیریم و برای توصیف پدیده های متنوعی از قبیل واپاشی آلفازا، واپاشی بتازا، واکنش‌های مستقیم یا شکافت، از صورت‌بندی های متفاوتی استفاده کنیم [۱].

هدف از ارائه‌ی این فصل آشنایی با برخی مفاهیم و تعاریف مقدماتی است که در قلمروی فیزیک هسته‌ای قرار می‌گیرند و بیان آنها پیش از ارائه‌ی مطالب بعدی ضروری به نظر می رسد.

۱-۲- نیروهای موجود در طبیعت و مدل استاندارد

تا آنجا که ما می‌دانیم، چهار نوع نیروی بنیادی در طبیعت وجود دارد: قوی (هسته‌ای قوی)، الکترومغناطیس، ضعیف (هسته ای ضعیف) و گرانش. هریک از این نیروها از یک نظریه‌ی فیزیکی تبعیت می‌کنند. نظریه کلاسیکی گرانش، قانون گرانش نیوتون است. تعمیم نسبیتی آن نظریه‌ی نسبیت عام انیشتین است که در چارچوب نظریه فیزیکی ژئومترودینامیک توصیف می‌شود. نظریه‌ی فیزیکی که

نیروهای الکترومغناطیسی را توصیف می کند، الکترودینامیک نامیده می شود که فرمولبندی کلاسیکی آن بیشتر از صد سال پیش توسط ماکسول ارائه شد. نظریه‌ی کلاسیکی ماکسول بر نسبیت خاص منطبق بود. نظریه‌ی کوانتومی الکترودینامیک نیز در سال ۱۹۴۰ توسط توموناگا، فاینمن و شوینگر [1] ارائه گردید. نیروهای ضعیف که عامل ایجاد واپاشی هسته‌ای بتازا هستند برای فیزیک کلاسیک ناشناخته بودند. نخستین نظریه در رابطه با این نیروها را فرمی در سال ۱۹۳۳ عنوان کرد که بوسیله‌ی افراد دیگری رفته رفته تکمیل شد و گلاشو، واینبرگ و سلام آن را به شکل امروزی درآوردند. نظریه‌ی (GWS) [2] نیروهای ضعیف و الکترومغناطیس را دو صورت مختلف از یک نیروی واحد به نام الکتروضعیف می داند، بنابراین طبق این نظریه نیروهای چهارگانه به نیروهای سه‌گانه تقلیل می یابند. و سرانجام نیروهای قوی که با کار یوکاوا در سال ۱۹۳۴ معرفی شدند توسط نظریه‌ی فیزیکی کرومودینامیک توصیف می‌شوند [۲].

مدل استاندارد نظریه‌ای در رابطه با برهم‌کنش های قوی، ضعیف و الکترومغناطیس است که بر اساس آن تمام ماده از سه گروه ذرات بنیادی تشکیل شده است: لپتون‌ها، کوارک‌ها و ذرات واسطه. شش لپتون وجود دارد که بر اساس نوع بار، عدد لپتونی، عدد میونی و عدد تاو طبقه بندی می شوند و در سه نسل قرار می‌گیرند. همچنین شش پاد لپتون در طبیعت وجود دارند که برای آنها نوع بار و اعداد ذکرشده بر عکس لپتون‌های متناظر است. شش نوع کوارک و شش پادکوارک نیز در این مدل وجود دارند که هریک از این کوارک‌ها در سه رنگ ظاهر می شوند، بنابراین مجموعاً با ۳۶ نوع کوارک و پادکوارک روبرو هستیم. هر برهم‌کنش دارای ذره‌ی واسطه‌ی خاصی است. فوتون ذره‌ی واسطه برای برهم‌کنش الکترومغناطیسی و گراویتون ذره‌ی واسطه در برهم‌کنش گرانشی است. بوزون‌های برداری میانه W^+، W^- و Z واسطه‌ی برقراری برهم‌کنش ضعیف بین کوارک‌ها و لپتون‌های مختلف هستند [۲]. در نهایت گلوئون‌ها واسطه‌ی

[1] Tomonaga, Feynman and Schwinger
[2] Glashow-Weinberg-Salam

برقراری نیروی قوی بین ذرات باردار رنگی یعنی کوارک‌ها می باشند. گلوئون‌ها خود ذراتی بدون جرم و حامل بار و رنگ هستند.

۱-۳- خواص هسته

هسته‌ها دارای برخی خواص مستقل از زمان مانند جرم، اندازه، بار، تکانه‌ی زاویه‌ای ذاتی (اسپین) و برخی خواص وابسته به زمان مانند واپاشی پرتوزا و تبدیلات هسته‌ای مصنوعی (واکنش‌های هسته‌ای) هستند. رده‌ی اول خواص استاتیکی و رده‌ی بعدی خواص دینامیکی هسته نامیده می شوند. هسته ها همچنین دارای حالات برانگیخته هستند که انرژی آنها معمولاً جزء خواص استاتیکی بررسی می شود، اما واپاشی آنها یکی از انواع واپاشی پرتوزاست [۳]. برای داشتن یک دید کلی برخی از این خواص را بطور خلاصه بررسی می کنیم.

۱-۳-۱- جرم،بار و اندازه هسته

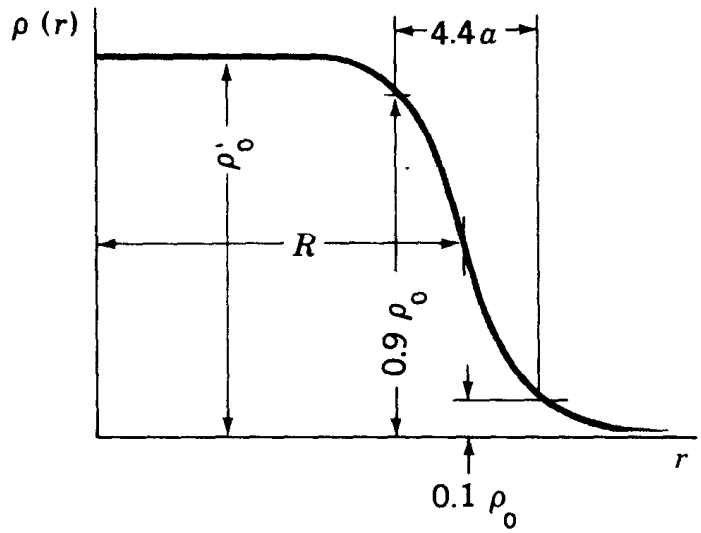
هسته از نوترون ها و پروتون ها تشکیل شده است، دو ذره‌ای که ۱۸۴۰ بار از الکترون سنگین تر هستند و بطور کلی به آنها نوکلئون گفته می شود. تعداد پروتون‌ها در هسته درست برابر با عدد اتمی (Z) و تعداد کلی نوکلئون‌ها نزدیکترین عدد صحیح به جرم اتمی آن هسته است، بنابراین تعداد نوترون‌ها برابر $(A-Z)$ است. بعنوان مثال هسته ی سدیم ، $^{23}_{11}Na$ که عدد اتمی آن ۱۱ و وزن اتمی آن خیلی نزدیک به ۲۳ است، ۱۱ پروتون و ۱۲ نوترون دارد. جرم هسته تقریباً برابر با جرم اتم است که برای به‌دست آوردن آن بر حسب کیلوگرم کافی است جرم اتمی را بر عدد آووگادرو (6.03×10^{26}) تقسیم کنیم [۴]. آزمایش‌های دقیق با بهره‌گیری از پراکندگی ذرات هسته‌ای و الکترون‌ها، نشان داده‌اند که شعاعی که در آن آثار هسته‌ای ظاهر می شود از رابطه‌ی تقریبی زیر به دست می آید:

$$R = R_0 A^{1/3} \qquad (۱-۱)$$

که در آن R_0 موسوم به " ثابت شعاع " است و مقدار آن برای پراکندگی ذرات هسته‌ای از هسته‌ها ۱٫۴ فرمی و برای پراکندگی الکترون از هسته ها ۱٫۲ فرمی است. علت اختلاف بین این دو مقدار چنین است : در پراکندگی الکترون، ما موضع بارهای مثبت (نقطه‌ای) مربوط به پروتون‌های هسته را تعیین می کنیم، و حال آنکه در پراکندگی ذرات هسته‌ای اندازه‌ی مربوط به ناحیه‌ی ایجاد کننده‌ی نیروی هسته‌ای را که بر ذره اثر می‌گذارد تعیین می کنیم. این مطلب می‌رساند که نیروی هسته‌ای از ناحیه‌ای که مربوط به بار (یا جرم) است فراتر می‌رود و هسته را بزرگتر از آنچه که هست جلوه می دهد. گسترش نیرو به ورای توده‌ی هسته‌ای حدود یک فرمی است که به وسیله‌ی برد نیروی هسته‌ای تعیین می‌شود [۳]. آزمایش‌هایی برای تعداد زیادی از هسته ها با استفاده از الکترون‌های فرودی در انرژی‌های مختلف انجام شده که نشان می‌دهند توزیع چگالی هسته ای دارای یک لبه‌ی تیز در شعاع R نیست. تمام نتایج بدست آمده تقریباً با تابع توزیع بار زیر قابل توجیه‌اند

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1+\exp[(r-R)/a]} \qquad (۲-۱)$$

ترسیمی از تابع (۱-۲) در شکل (۱-۱) به نمایش درآمده است و معنی فیزیکی پارامترهای مختلف در آن مشخص شده است. همانطورکه مشاهده می‌شود ρ_0 چگالی نوکلئون در نزدیکی مرکز هسته است، R فاصله‌ای است که در آن چگالی هسته به نصف مقدارش در مرکز تقلیل می یابد و a ضخامت سطحی هسته را نشان می‌دهد چنان که فاصله‌ای که در آن چگالی از نود درصد ρ_0 به ده درصد ρ_0 تقلیل می‌یابد برابر با $4.4a$ است [۴].



شکل (۱-۱) منحنی رابطه ی (۱-۲) برای $\rho(r)$ بر حسب r

۱-۳-۲- انرژی بستگی

انرژی متناظر به جرم هر نوکلید، $m_N c^2$، عبارت است از حاصل تفریق انرژی جرم اتمی آن نوکلید، $m_A c^2$، وانرژی جرمی Z الکترون و انرژی بستگی الکترونی کل آن

$$m_N c^2 = m_A c^2 - Z m_e c^2 + \sum_{i=1}^{Z} B_i \qquad (۳-۱)$$

که در آن B_i انرژی بستگی iامین الکترون است. انرژی بستگی الکترونی در اتم های سنگین از از مرتبه ۱۰ تا ۱۰۰کیلوالکترون ولت است، در حالیکه انرژی جرم اتمی از مرتبه‌ی $A\times1000\ MeV$ است. بنابراین با دقت حدود یک قسمت در میلیون می توان از آخرین جمله‌ی (۱-۳) صرفنظر کرد.

انرژی بستگی B یک هسته عبارت است از اختلاف انرژی بین جرم هسته ی ${}^{A}_{Z}X_N$ و جرم کل پروتونها (Z پروتون) ونوترونهای تشکیل دهنده ی آن (N نوترون)

$$B = \left\{ Z m_p + N m_n - \left[m({}^{A}X) - Z m_e \right] \right\} c^2 \qquad (۴-۱)$$

که در آن شاخص پایین جرم اتمی m_A را حذف کرده‌ایم. اگر مجموع جرم Z پروتون و Z الکترون را بصورت جرم Z اتم خنثای هیدروژن در نظر بگیریم، معادله ی (۱-۴) چنین می شود [۱]

$$B=\left[Zm(^1H)+Nm_n-m(^AX)\right]c^2 \qquad (۱-۵)$$

با توجه به اینکه جرم‌ها معمولاً برحسب یکای جرم اتمی بیان می شوند، بهتر است که ضریب تبدیل c^2 را به صورت $c^2=931.50\,MeV/u$ وارد کنیم. انرژی بستگی در واقع معرف کاری است که باید انجام داد تا هسته را به نوکلئون‌های جدا از هم تجزیه کرد [۳]. در فصل آخر انرژی بستگی یک هسته‌ی سه نوکلئونی (تریتون) را از طریق حل معادله شرودینگر محاسبه خواهیم کرد.

۱-۳-۳- تکانه‌ی زاویه‌ای هسته ها و پاریته

تا آنجا که پتانسیل هسته‌ای را مرکزی بگیریم، $\mathbf{L}$(اندازه حرکت زاویه ای مداری) و $\mathbf{S}$(اسپین) و بنابراین $\mathbf{J}$(اندازه‌ی حرکت زاویه‌ای کل) از جمله ثابت‌های حرکت خواهند بود. به زبان مکانیک کوانتومی می‌توانیم هر نوکلئونی را با اعداد کوانتومی l,s و j مشخص کنیم. در این صورت، تکانه‌ی زاویه‌ای کل هسته ای که شامل A نوکلئون باشد از جمع برداری تکانه‌های زاویه‌ای همه‌ی نوکلئون‌های آن به‌دست می‌آید. این تکانه‌ی زاویه‌ای کل را معمولاً اسپین هسته می نامند و با نماد I نشان می‌دهند. تکانه‌ی زاویه‌ای I تمامی خواص بردارهای تکانه زاویه‌ای را که در مکانیک کوانتومی متداول‌اند، داراست

$$I_z=m\hbar,(m=-I,\ldots,+\mathrm{I}) \quad \text{و} \quad \mathbf{I}^2=\hbar^2 I(I+1) \qquad (۱-۶)$$

در بسیاری از اثرات مربوط به تکانه زاویه‌ای، رفتار هسته به گونه‌ای است که گویی با یک جسم منفرد با تکانه زاویه‌ای ذاتی I سروکار داریم. برای نمونه، در میدان های مغناطیسی معمولی با مشاهده‌ی شکافتگی حالت I به تعداد $(2I+1)$ زیر حالت $(m=-I,-I+1,\ldots,I-1,I)$ می توانیم اثر هسته‌ای زیمان را تجربه کنیم (در اینجا اسپین هسته را با نماد I و تکانه زاویه‌ای کل یک نوکلئون منفرد را با نماد j نشان

می‌دهیم). اغلب با مواردی روبرو می شویم که تمام خواص هسته را یک تک ذره‌ی ظرفیت تعیین می‌کند؛ در این حالت داریم $\mathbf{I} = \mathbf{j}$. در موارد دیگر، ممکن است لازم باشد که دو ذره‌ی ظرفیت را در نظر بگیریم. در این گونه حالتها داریم $\mathbf{I} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$ که در آن برآیند I می تواند چند مقدار مختلف داشته باشد. در پاره‌ای از موارد، ذره‌ی منفرد و قلب حاصل از نوکلئون‌های باقیمانده هردو باهم در تکانه زاویه‌ای کل هسته سهم دارند، یعنی $\mathbf{I} = \mathbf{j}_P + \mathbf{j}_C$ می‌شود که در آن $\mathbf{j}_P$ تکانه ذره‌ی منفرد و $\mathbf{j}_C$ تکانه قلب نوکلئون‌های باقیمانده است. در هسته‌های با A ی فرد I مقداری نیم درست و در هسته‌های با A ی زوج I مقداری درست دارد.

برای مشخص‌کردن حالات هسته، علاوه بر اسپین هسته از پاریته نیز استفاده می‌شود. پاریته می‌تواند دارای مقادیر مثبت (زوج) یا منفی باشد. اگر تابع موج تک‌تک نوکلئون‌های موجود در هسته را می‌شناختیم، از حاصلضرب پاریته‌های تمامی A نوکلئون می‌توانستیم پاریته‌ی هسته را به صورت π مثبت یا منفی $(\pi = \pi_1 \pi_2 \cdots \pi_A)$ به دست آوریم. پاریته‌ی هسته را به صورت شاخص بالای اسپین هسته و با علامت + یا − نشان می‌دهیم و می‌نویسیم I^{π}. برای مثال می‌نویسیم 0^+. هیچگونه رابطه‌ی نظری مستقیمی بین I و π وجود ندارد و در نتیجه برای هر مقداری از I علامت π می‌تواند مثبت یا منفی باشد [۱].

۱-۳-۴- حالات پایه و برانگیخته‌ی هسته

هر هسته دارای حالتی با کمترین انرژی به نام حالت پایه است. حالت های با انرژی بالاتر را حالت‌های برانگیخته می نامیم. اطلاعات زیادی در مورد نیروهای هسته‌ای را می‌توان از بررسی هسته‌ها در حالت پایه‌ی آنها، مستقل از اینکه هسته ها پایدار بوده یا امکان واپاشی پرتوزا را داشته باشند، بدست آورد [۳]. این همان کاری است که ما در فصل‌های بعدی به دنبال انجام آن هستیم. همچنین از بررسی

حالت‌های برانگیخته‌ی هسته ای نیز می توانیم تا حدودی ساختار هسته‌ها را بشناسیم. حالت‌های برانگیخته‌ی هسته هم مانند حالت‌های برانگیخته‌ی اتمی ناپایدارند و سریعاً به حالت پایه برمی‌گردند. برانگیختگی اتم ها در اثر جابجاکردن الکترون‌ها و رساندن آنها به مدارهای انرژی بالاتر صورت می گیرد. همین کار را برای نوکلئون های موجود در هسته نیز می‌توان انجام داد. بدین ترتیب، به کمک حالت‌های برانگیخته می‌توان برخی خصوصیات مدارهای نوکلئونی را در هسته‌ها نشان داد [۱].

۱-۴- انرژی نوکلئون‌ها در هسته

در این قسمت لازم است که مرتبه‌ی بزرگی انرژی نوکلئون‌ها در هسته را تعیین کنیم. انرژی پرتوهای بتا و گاما که از هسته‌ها گسیل می شوند معمولاً در حدود MeV ۱ است، اما این فرایندها حاصل گذار نوکلئون‌ها از یک تراز به تراز دیگرند و انرژی آنها برابر با تفاوت انرژی بین دو تراز است، بنابراین انرژی واقعی نوکلئون باید از این مقدار خیلی بیشتر باشد. یکی از روش‌های حل این مسئله عبارت است از محاسبه‌ی انرژی الکترواستاتیک (E_c) لازم برای وارد کردن یک پروتون به داخل هسته. این انرژی به طور تقریبی برابر است با

$$E_c = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R} \qquad (۱-۷)$$

که برای هسته ای میان- جرم $(Z = 50, A = 120)$ ، مقدار آن به قرار زیر است

$$E_c = \frac{50(1.6\times10^{-19})^2 C^2}{4\pi(8.9\times10^{-12})(C^2/N.m^2)1.07\times120^{1/3}\times10^{-15}m}\frac{1J}{1N.m}\frac{1eV}{1.6\times10^{-19}J} = 13\times10^6 eV = 13MeV$$

(۱-۸)

که C و N به ترتیب علامت یکاهای کولن و نیوتون هستند. این مقدار انرژی کولنی در صورتیکه یک پروتون بتواند از هسته خارج شود، آزاد خواهد شد. ولی با وجود این در حالت عادی، پروتون ها از هسته بیرون نمی آیند. این بدان معنی است که پروتون با انرژی بیشتری به هسته مقید است. با این بحث ساده می توانیم نتیجه بگیریم که عموماً انرژی نوکلئون ها از مرتبه ی بزرگی MeV ۱۰ است. از آنجا که سرعت یک نوکلئون با انرژی ۱۰ مگاالکترون ولت فقط ۱۵ درصد سرعت نور است، می‌توان نتیجه گرفت که استفاده از نسبیت در مورد حرکت نوکلئون‌ها الزامی نیست و به آسانی می توان روابط نانسبیتی را در مورد جرم، سرعت، تکانه و انرژی به کار برد [۴].

۱-۵- مدل‌های هسته‌ای

برای بررسی هسته ها معمولاً یک نظریه‌ی فوق العاده ساده را که از لحاظ ریاضی بدون مشکل و از لحاظ فیزیکی غنی باشد، انتخاب می‌کنند. اگر این نظریه در توصیف دستکم چند خاصیت هسته ای نسبتاً موفق باشد، آنگاه با افزودن جمله‌های اضافی آن را تکمیل می‌کنند. بدین ترتیب یک مدل هسته‌ای ساخته می‌شود، یعنی چشم انداز ساده‌ای از ساختار هسته ای که متضمن خصوصیات اصلی فیزیک هسته‌هاست [۱].

مدل‌های هسته‌ای اساساً در دو طبقه‌ی کلی جای می گیرند. در مدل‌های طبقه‌ی اول فرض می شود که نوکلئون ها در درون هسته قویاً با یکدیگر برهم‌کنش دارند و در محدوده‌ی آنها مسیر آزاد بسیار کوچک است. این موقعیت شبیه آنچه در مولکول‌های مایع مشاهده می‌شود است. مدل قطره مایعی در این طبقه جای می گیرد. اینها مدل‌های جمعی نامیده می شوند و به بررسی پدیده هایی می‌پردازند که در آنها به هسته به عنوان یک مجموعه نگاه می شود. در طبقه‌ی دیگر مدل‌های ذره مستقل هستند که در آنها فرض بر این است که اصل پائولی تعداد برخوردهای میان نوکلئون‌ها را در داخل ماده‌ی هسته‌ای محدود

می‌کند که این منجر به فضای آزاد بزرگتری می‌شود. انواع مختلف مدل‌های لایه‌ای در این طبقه جای می‌گیرند . امروزه بر این باوریم که هسته‌ها می توانند هر دو نوع پدیده های جمعی و ذره‌ی مستقل را بروز دهند و هر مدل می تواند سودمندی‌اش را در توضیح یک گروه خاص از خواص هسته‌ای بیابد [۵].

۱-۵-۱- مدل قطره مایعی[1]

مدل بسیار ساده شده‌ای است که در آن از بعضی ویژگی‌های ظریف‌تر نیروهای هسته‌ای صرفنظر ولی بر جاذبه‌ی قوی بین نوکلئونی تاکید می‌گردد. این مدل را فون وایس زکر[2] بر پایه‌ی مانستگی قطره‌ی مایع با ماده‌ی هسته ای ، که توسط بوهر پیشنهاد شده بود، به دست آورد. فرض های اساسی در این مدل به قرار زیرند [۳] :

۱- هسته متشکل از ماده‌ی غیرقابل تراکم است، بطوری که $R \sim A^{1/3}$.

۲- نیروی هسته‌ای برای هر نوکلئون یکسان است و به خصوص به نوع آن که پروتون باشد یا نوترون بستگی ندارد.

۳- نیروی هسته‌ای اشباع می‌شود.

با درنظرگرفتن فرض های اساسی در این مدل می توان انرژی بستگی کل یک هسته را بصورت زیر نوشت

$$B_{tot}(A,Z) = a_V A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - a_s \frac{(N-Z)^2}{A} \pm \delta + \eta \qquad (۹-۱)$$

$a_V A$ جمله ی حجمی است و بیان می‌کند که انرژی بستگی هسته با حجم آن رابطه‌ی مستقیم دارد.

$-a_s A^{2/3}$ جمله‌ی سطحی است . وجود این جمله بدان علت است که نوکلئون‌های سطحی تحت جاذبه‌ی یکسان از اطراف خود قرار نمی‌گیرند و از این رو باید جمله‌ای متناسب با تعداد نوکلئون‌های سطحی یا متناسب با سطح هسته از انرژی بستگی هسته کم شود.

[1] Liquid-drop model
[2] Von Weizscacker

$-a_c \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}$ جمله کولنی است و بیانگر این مطلب می باشد که نیروی دافعه کولنی که بین تمام جفت پروتون‌ها برقرار است، انرژی بستگی را کاهش می دهد.

$-a_s \frac{(N-Z)^2}{A}$ جمله‌ی انرژی عدم تقارن نامیده می شود. این جمله بیانگر آن است که انرژی بستگی یک هسته با $N \neq Z$ همیشه نسبت به هسته‌ی ایزوبارش با $N = Z$ کمتر است. در واقع انرژی عدم تقارن را می‌توان بصورت اختلاف انرژی بستگی یک هسته با اعداد نوترونی و پروتونی N و Z با انرژی ایزوباری که در آن اعداد نوترونی و پروتونی هردو مساوی $A/2$ است، تعریف کرد.

$\pm\delta$ جمله‌ی انرژی زوجیت است که مقدار آن برای هسته‌های با Aی فرد برابر صفر می باشد. برای هسته‌های زوج-زوج علامت مثبت و برای هسته‌های فرد-فرد علامت منفی در نظر گرفته می شود.

و در نهایت η جمله لایه‌ای است که فقط برای هسته‌هایی که در آن ها N یا Z یک عدد جادویی است دارای مقدار مثبت است.

ثابت‌های رابطه‌ی (۱-۹) را می توان توسط مقایسه با داده‌های تجربی موجود به‌دست آورد. چون برازش هیچ‌گاه کامل نیست، چندین مجموعه از ضرایب به کار می روند. یک نمونه از این مجموعه‌ها (بر حسب MeV) عبارتست از [۳]

$$a_V = 14, \quad a_s = 13, \quad a_c = 60, \quad a_a = 19, \quad \delta = 34 / A^{3/4} \qquad (۱۰-۱)$$

مدل قطره مایعی در توجیه برخی خواص هسته‌ها نظیر وجود اعداد جادویی (که در بخش بعد معرفی خواهیم کرد) ناتوان بود به همین علت پس از آن مدل‌های متعدد دیگری ارائه شده است.

۱-۵-۲- مدل لایه ای (پوسته‌ای)

متخصصان فیزیک هسته ای به امید آنکه بتوانند به توصیف روشنی از خواص هسته ها دست

یابند، سعی کردند در بررسی ساختار هسته ای از نظریه‌ای مشابه با نظریه‌ی اتمی که با استفاده از مدل پوسته ای توانسته بود جزئیات ساختار اتم ها را به‌طور کامل توضیح دهد، استفاده کنند. تغییرات خواص اتمی (مانند شعاع یونی و انرژی یونش) در محدوده‌ی هر زیرلایه تدریجی و کم است درحالیکه وقتی از یک زیرپوسته به زیر پوسته‌ی دیگر می رویم تغییرات خواص، ناگهانی و زیاد است. وجود چنین رفتاری در خواص هسته‌ای (از جمله پایداری هسته، انرژی جدایی نوترون و پروتون، سطح مقطع واکنش و . . .) شاهدی تجربی بر وجود لایه‌های هسته‌ای است. بطور مثال انرژی جدایی، مانند انرژی یونش در اتم ها، به استثنای موارد افت سریع در عبور از بعضی اعداد پروتونی و نوترونی یکسان، به تدریج با افزایش N یا Z افزایش می یابد. این اعداد پروتونی یا نوترونی هسته هایی که Z یا N آنها برابر ۲، ۸، ۲۰، ۲۸، ۵۰، ۸۲ و ۱۲۶ است و معرف اثرات اصلی پوسته‌های پرشده هستند را اعداد جادویی می گویند [۱]. اگر اعداد پروتونی یا نوترونی یکی از اعداد جادویی باشند، هسته از پایداری خاصی برخوردار است. به بیانی تخصصی‌تر، ویژگی‌های زیر قابل مشاهده است [۶]،

- بزرگتر بودن انرژی بستگی کل هسته
- بزرگتر بودن انرژی جداسازی تک نوکلئون
- بزرگتر بودن انرژی پایین‌ترین حالات برانگیخته
- وجود تعداد زیاد ایزوبارها یا ایزوتون‌های با اعداد نوترونی یا پروتونی برابر با همان عدد جادویی

در مورد اتم ها پتانسیل حاکم را میدان کولنی هسته تأمین می‌کند، یعنی یک عامل خارجی زیر پوسته ها را سازمان می دهد. در این حالت معادله‌ی شرودینگر را با همین پتانسیل می‌توان حل کرد و انرژی زیرپوسته هایی را که الکترون‌ها می توانند در آن قرار گیرند محاسبه کرد. اما در مورد هسته هیچ عامل خارجی‌ای وجود ندارد، و نوکلئون‌ها در پتانسیلی که خودشان بوجود می‌آورند در حرکت هستند. پتانسیلی

که معمولاً برای مدل لایه ای در نظر گرفته می شود پتانسیل وودز-ساکسون[1] است که اگر یک جمله‌ی موسوم به پتانسیل اسپین مدار هسته‌ای به آن اضافه شود با حل معادله‌ی شرودینگر برای آن می توان اعداد جادویی را در لایه‌های هسته‌ای بدست آورد.

۱-۵-۳- مدل گاز فرمی

این مدل بر این حقیقت استوار است که نوکلئون‌ها به دلیل اصل پائولی، تقریباً به طور آزادانه در داخل هسته حرکت می کنند. دو نوکلئون به طور همزمان نمی توانند یک حالت انرژی را اشغال کنند بنابراین پراکنده نمی‌شوند زیرا حالات نهایی که می‌توانند به آنها پراکنده شوند قبلاً توسط نوکلئون دیگری اشغال شده است. اما هنگامی که یک نوکلئون به سمت سطح هسته می رود و تلاش می‌کند که هسته را ترک کند، نیروی جاذبه‌ای را از طرف نوکلئون‌های پشت سرش احساس می کند که آن را به سمت داخل هسته می‌کشند. این نوکلئون در داخل هسته نیروی جاذبه‌ای را از طرف تمام نوکلئون‌های اطرافش احساس می‌کند که نتیجه‌ی یک نیروی خالص است که تقریباً برابر صفر می باشد. در این مدل می‌توانیم هسته را به صورت یک بالون تصور کنیم که در داخل آن نوکلئون‌ها آزادانه در حرکت‌اند اما ترازهایی با انرژی متفاوت را اشغال می کنند [۵].

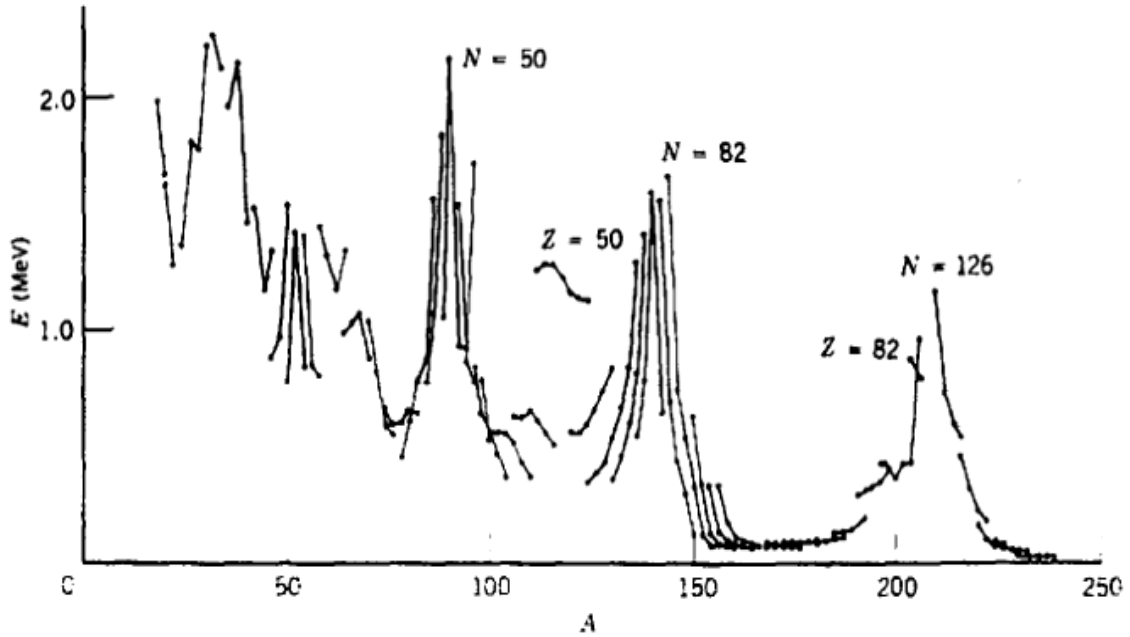
۱-۵-۴- مدل های جمعی

مدل قطره مایعی که بر آثار تعاونی بین نوکلئون های متعدد موجود در هسته تأکید می کرد، پیشقراول مدل های تجمعی ساختار هسته ای است [۳]. خواصی که منشأ اصلی آنها در حرکت دسته جمعی اجزای هسته ای است و بسیاری از نوکلئون های هسته در ایجادشان شرکت دارند، خواص جمعی نامیده می‌شوند. این نوع خواص هسته‌ها بر حسب عدد جرمی بطور ملایم و تدریجی تغییر می کند و اکثراً

[1] Woods-saxon potential

هم از تعداد و نوع نوکلئون‌های ظرفیت که خارج از زیر پوسته‌های کامل قرار دارند، مستقل است. به عنوان مثال در شکل (۱-۲) یک خاصیت هسته های زوج- زوج که ناشی از رفتار جمعی هسته‌ها هستند را مشاهده می‌کنیم. مطابق شکل به نظر می رسد که انرژی نخستین حالت برانگیخته‌ی 2^+ با افزایش A به تدریج کاهش می‌یابد (نواحی نزدیک به پوسته‌های کامل استثنا است)، درحالیکه در ناحیه‌ی تقریبی $A=150$ تا $A=190$ هم فوق العاده ثابت‌اند و هم بسیار کوچک.

برای توضیح چنین خواصی باید دو نوع ساختار جمعی در نظر بگیریم، زیرا به نظر می‌رسد که یک دسته از خواص به هسته های $A<150$ و دسته‌ی دیگر به هسته های $150<A<190$ مربوط می شوند. هسته‌های دسته‌ی اول عموماً به کمک مدل مبتنی بر ارتعاشات حول شکل تعادل کروی و هسته‌های دسته‌ی دوم با مدل مبتنی بر اثرات دورانی سیستم های غیرکروی بررسی می شوند. ارتعاش و دوران دو نوع اصلی حرکت جمعی در هسته‌هاست [۱].



شکل (۱-۲). انرژی نخستین حالتهای +۲ در هسته های زوج زوج [۱].

فصل دوم

نیروی هسته‌ای

۲-۱- مقدمه

می‌دانیم که هسته وجود دارد و از نوترون های بدون بار و پروتون های با بار مثبت تشکیل شده است. اگر تنها نیروی دافعه‌ی کولنی بر محیط هسته غالب باشد، وجود هسته ناممکن است. بنابراین فوراً می توان نتیجه گرفت که باید یک نیروی جاذبه‌ی قوی در هسته وجود داشته باشد که بر دافعه کولنی غلبه کرده و نوکلئون‌ها را به یکدیگر مقید گرداند. در نگاه اول، نیروی هسته‌ای یک نیروی مبهم است زیرا در مواد ماکروسکوپیک آثار زیادی برای تشخیص آن وجود ندارد. در حقیقت ماهیت این نیرو هنوز تا حد زیادی ناشناخته است [۷].

در این فصل سعی داریم برخی از خواص اصلی نیروی هسته‌ای را از نظر بگذرانیم. اطلاعات در مورد این خواص از بررسی ساده ترین سیستم های مقید هسته‌ای، مانند دوترون، یا مطالعه‌ی پراکندگی‌های نوکلئون- نوکلئون حاصل شده اند. ما نیز این فصل را با بررسی مسأله دوترون آغاز می کنیم که خود پیش‌درآمدی بر مسئله‌ی سه ذره‌ای نیز محسوب می شود.

۲-۲- دوترون، ساده‌ترین سیستم مقید نوکلئون‌ها

هسته‌ی اتم دوتریوم $^{2}_{1}\mathrm{H}$ (ایزوتوپ هیدروژن با تعداد یک نوترون) دوترون نامیده می شود. این هسته دارای یک پروتون و یک نوترون است و بنابراین ساده‌ترین سیستم مقید ممکن متشکل از نوکلئون‌ها است و به همین دلیل سیستمی ایده‌آل برای مطالعه‌ی برهم‌کنش نوکلئون- نوکلئون به‌شمار می‌آید. این هسته هیچ نوع حالت برانگیخته‌ی مقیدی ندارد زیرا بستگی آن بسیار ضعیف است و حالت‌های برانگیخته‌ی آن فقط به صورت نوترون و پروتون آزاد ظاهر می شوند.

۲-۲-۱- انرژی بستگی

روش های تجربی مختلفی برای اندازه‌گیری انرژی بستگی دوترون وجود دارد که برخی از آنها عبارتند از:

۱) تعیین مستقیم جرم دوترون توسط طیف نمایی و سپس محاسبه‌ی انرژی بستگی از رابطه‌ی (۱-۵)

۲) نزدیک‌سازی یک پروتون و یک نوترون و تشکیل ${}^{2}_{1}\mathrm{H}$ و محاسبه‌ی انرژی بستگی دوترون با اندازه‌گیری انرژی فوتون گامای گسیل شده در این فرایند

$${}^{1}\mathrm{H} + n \rightarrow {}^{2}\mathrm{H} + \gamma$$

۳) اندازه‌گیری کمینه‌ی انرژی پرتو گامایی که بتواند فرایند موسوم به تجزیه‌ی فوتونی دوترون را انجام دهد (این انرژی برابر انرژی بستگی دوترون است).

$$\gamma + {}^{2}\mathrm{H} \rightarrow {}^{1}\mathrm{H} + n$$

مقدار محاسبه شده‌ی انرژی بستگی دوترون از این روش‌ها با دقت خوبی برابر ۲٫۲۲۴ مگاالکترون ولت است [۱]. با توجه به اینکه بستگی متوسط هر نوکلئون به هسته در حدود ۸ مگاالکترون ولت است مشاهده می‌کنیم که دوترون بستگی بسیار ضعیفی دارد.

در مسئله‌ی دو جسمی، نوترون و پروتون با نیرویی که با پتانسیل $\boldsymbol{V(r_p - r_n)}$ نمایش داده می‌شود، برهم‌کنش می‌کنند. این مسئله تحت تبدیل مرکز جرم در مکانیک کلاسیک، به مسئله‌ی تک ذره در چاه پتانسیل $V(r)$ تبدیل می‌شود که مختصات مؤثر تک ذره، یعنی r, θ, ϕ در حقیقت مختصات نوترون نسبت به پروتون (یا پروتون نسبت به نوترون) است و جرم تک ذره عبارت است از جرم کاهش یافته‌ی $\mu = M_p M_n / (M_p + M_n)$ که برابر نصف جرم نوکلئون است [۴]. برای بررسی دوترون پتانسیل چاه مربعی به شعاع R را به عنوان پتانسیل هسته‌ای در نظر می‌گیریم

$$V(r) = -V_0, \qquad r < R$$
$$= 0 \qquad r > R \tag{۱-۲}$$

معادله‌ی شعاعی شرودینگر برای این سیستم بصورت زیر خواهد بود

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r) + V(r)R(r) = ER(r) \tag{۲-۲}$$

اگر بخش شعاعی تابع موج $R(r)$ را به صورت $\frac{u(r)}{r}$ در نظر بگیریم، با جانشینی در معادله (۲-۲) این معادله به شکل زیر در می آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u(r) + V(r)u(r) = Eu(r) \tag{۳-۲}$$

برای دوترون در پایین ترین حالت انرژی‌اش در اکثر اوقات مقدار l برابر صفر است. جواب این معادله در حالت $l = 0$ برای ناحیه ی $r < R$ به صورت

$$u(r) = A\sin(k_1 r) + B\cos(k_1 r) \tag{۴-۲}$$

است که در آن $k_1 = \sqrt{2\mu(E+V_0)/\hbar^2}$ است، و برای ناحیه‌ی $r > R$ خواهیم داشت

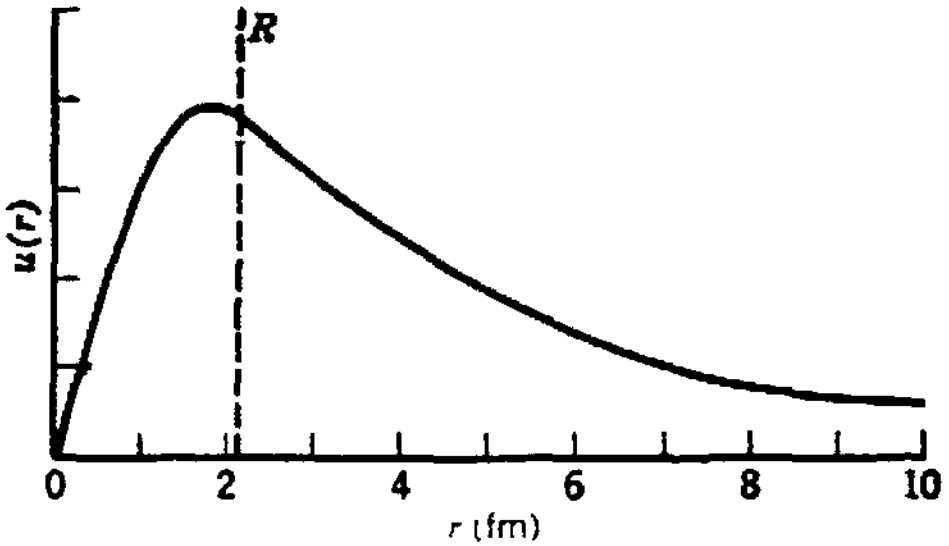
$$u(r) = Ce^{-k_2 r} + De^{+k_2 r} \tag{۵-۲}$$

که در آن $k_2 = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$ است. شرط متناهی بودن تابع موج در بی نهایت ایجاب می کند که $D = 0$ باشد و شرط متناهی بودن تابع موج وقتی $r \to 0$ باعث می شود که $B = 0$ شود. از پیوستگی $u(r)$ و du/dr در $r = R$ شرط زیر حاصل می شود که ارتباط میان V_0 و R را نشان می دهد

$$k_1 \cot g(k_1 R) = -k_2 \tag{۶-۲}$$

با قرار دادن مقدار تجربی ریشه‌ی میانگین مربعی شعاع دوترون $R = 2.1\,fm$ در معادله‌ی (۲-۶) و حل عددی آن خواهیم داشت $V_0 = 35MeV$ که برآوردی از عمق پتانسیل نوکلئون- نوکلئون است. حالت انرژی دوترون خیلی به لبه‌ی چاه نزدیک است. این یعنی اگر نیروی نوکلئون- نوکلئون فقط اندکی

ضعیف‌تر بود، حالت مقید دوترون نمی توانست وجود داشته باشد. تابع موج دوترون در شکل (۲-۱) نشان داده شده است [۱].



شکل (۲-۱). تابع موج دوترون برای $R = 2.1\,fm$

۲-۲-۲- اسپین و پاریته

تکانه‌ی زاویه‌ای کل (اسپین) I دوترون را می‌توان با روش‌های مختلف از جمله با استفاده از ساختار فوق‌ریز در طیف نمایی نوری اندازه‌گیری کرد. نتیجه‌ی بدست آمده عبارت است از $I = 1$ [۴].

اسپین دوترون برابر است با حاصل جمع برداری دو تکانه‌ی زاویه‌ای مداری و اسپینی

$$\mathbf{I} = \mathbf{l} + \mathbf{S} \qquad (۷-۲)$$

که تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی، خود حاصل جمع برداری اسپین‌های نوترون و پروتون است

$$\mathbf{S} = \mathbf{S_p} + \mathbf{S_n} = \left|\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}} + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\right| = \ 1 \text{ یا } 0 \qquad (۸-۲)$$

بنابراین می‌توان چهار حالت متصور شد که در آنها اسپین دوترون برابر یک می‌شود :

۱) $\mathbf{S_p}$ و $\mathbf{S_n}$ موازی و $l=0$

۲) $\mathbf{S_p}$ و $\mathbf{S_n}$ پاد موازی و $l=1$

۳) $\mathbf{S_p}$ و $\mathbf{S_n}$ موازی و $l=2$

۴) $\mathbf{S_p}$ و $\mathbf{S_n}$ موازی و $l=1$

از بررسی واکنش‌هایی که دوترون در آنها شرکت می‌کند، مشخص شده که پاریته دوترون زوج (مثبت) است و از آنجا که پاریته‌ی منتسب به حرکت مداری به صورت $(-1)^l$ است، بنابراین تنها حالات ممکن برای اسپین دوترون حالات (۱) و (۳) هستند که برای آنها به ترتیب $l=0$ و $l=2$ می‌باشد. بنابراین اسپین و پاریته‌ی دوترون با فرض $l=0$، که در بخش قبل در نظر گرفتیم سازگار است، اما فرض $l=2$ را نیز نمی‌توان منتفی دانست [۱].

۲-۲-۳- گشتاورهای دوقطبی مغناطیسی و چهار قطبی الکتریکی

در ساختار دو ذره‌ای، انتظار می‌رود گشتاور مغناطیسی کل برابر باشد با جمع برداری گشتاورهای مغناطیسی مربوط به اسپین و گشتاورهای مغناطیسی مربوط به حرکت مداری ذرات باردار. اگر فرض کنیم دوترون فقط در حالت $l=0$ است، حرکت مداری سهمی در گشتاور مغناطیسی کل ندارد و گشتاور مغناطیسی به صورت زیر به دست می آید

$$\mu_d = \mu_p + \mu_n = 2.7925\frac{e\hbar}{2M_p} - 1.9128\frac{e\hbar}{2M_p} = 0.8797\frac{e\hbar}{2M_p} \qquad (۹-۲)$$

ولی نتیجه ی اندازه گیری تجربی گشتاور مغناطیسی دوترون چنین بوده است

$$\mu_d = 0.8574\frac{e\hbar}{2M_p} \qquad (۱۰-۲)$$

ساده‌ترین توجیه برای این اختلاف، قائل شدن حرکت مداری با l غیرصفر برای حالت پایه‌ی دوترون است.

شاهدی بهتر برای این نتیجه‌گیری از اندازه‌گیری گشتاور چهار قطبی الکتریکی دوترون به‌دست می‌آید. اگر دوترون فقط در حالت $l=0$ باشد تابع موج آن فقط وابستگی شعاعی دارد و به θ و φ وابسته نیست. این یعنی دوترون دارای توزیع بار متقارن کروی است و از آنجا که هسته هایی که از چنین توزیع باری برخوردار هستند ، گشتاور چهارقطبی الکتریکی و گشتاورهای الکتریکی از درجه‌های بالاتر ندارند، انتظار داریم که گشتاور چهارقطبی الکتریکی دوترون صفر باشد. ولی مقدار اندازه‌گیری شده‌ی این گشتاور برای دوترون چنین است

$$Q_d = 2.82\times10^{-27}\,cm^2 = 0.00288b \qquad (۱۱-۲)$$

که هرچند کوچک، اما غیرصفر است. این موضوع نشان می‌دهد که تابع موج، یک تابع موج ساده‌ی $l=0$ نیست و مخلوطی از مقادیر l می باشد. این امر با نتیجه‌ای که از گشتاور مغناطیسی گرفتیم توافق دارد. برای $I=1$ و بیشینه مقدار $S=1$ با توجه به رابطه‌ی (۲-۷)، l تنها می‌تواند 0 ، 1 و یا 2 باشد. ولی به علت پایستگی پاریته چون مقادیر زوج و فرد l نمی توانند در یک تابع موج یکجا حضور داشته باشند، $l=1$ مجاز نیست. لذا سیستم دوترون کسری از زمان (حدود 0.94) را در حالت $l=0$ و کسر دیگر (حدود 0.06) را در حالت $l=2$ می‌گذراند [۴].

۲-۳- خواص عمومی نیرو و پتانسیل هسته‌ای

در این بخش برخی از خواص برهم‌کنش بین نوکلئون‌ها را به‌طور خلاصه شرح می‌دهیم [۱ و ۴].

مرکزی بودن

ویژگی مشترک همه‌ی پتانسیل‌های هسته‌ای در بستگی انحصاری آنها به فاصله‌ی بین نوکلئونی r است. به این دلیل این عبارت مرکزی را به صورت $V_c(r)$ نشان می‌دهیم .

وابستگی به اسپین

وابستگی پتانسیل هسته‌ای به اسپین را می توان از عدم موفقیت در مشاهده‌ی حالت مقید تک تایه‌ی دوترون (یعنی حالت $S=0$) نتیجه گرفت. بنابر این باید جمله‌ای به پتانسیل افزوده شود که به اسپین $\mathbf{S}_1$ و $\mathbf{S}_2$ نوکلئون‌ها بستگی داشته باشد. البته نیروی هسته‌ای باید متضمن بعضی از تقارن‌ها باشد، که باعث می شود همه‌ی ترکیب‌های $\mathbf{S}_1$ و $\mathbf{S}_2$ مجاز نباشند. وجود جملاتی مانند $\mathbf{S}_1$ و $\mathbf{S}_2$ یا ترکیبی از آنها $A\mathbf{S}_1+B\mathbf{S}_2$ در تابع پتانسیل موجب نقض تقارن نسبت به برگشت زمان می‌شود و بنابراین مجاز نیست. جملاتی مانند $V(\mathbf{r})$ یا $\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$ که نسبت به برگشت زمان ناوردا هستند مجاز خواهند بود.

تانسوری بودن

پتانسیل بین نوکلئونی شامل یک جمله‌ی غیرمرکزی، به نام پتانسیل تانسوری است. عمده ترین توجیه وجود نیروی تانسوری از مشاهده گشتاور چارقطبی در حالت پایه‌ی دوترون حاصل می شود. گفتیم که وجود گشتاور چارقطبی الکتریکی باعث می شود تابع موج دوترون، مخلوطی از حالت های مختلف l باشد. این تابع موج مخلوط را باید از پتانسیل های غیر مرکزی به وجود آورد. این نیروی تانسوری باید به جای $V(r)$ به صورت $V(\mathbf{r})$ باشد. برای یک نوکلئون منفرد، انتخاب یک جهت مشخص در فضا اختیاری است و تنها جهت مرجع برای نوکلئون جهت اسپین آن است و از این رو تنها جمله ای که می توان در نظر گرفت به صورت $\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}$ یا $\mathbf{s}\times\mathbf{r}$ است که بردار مکان را با جهت اسپین ارتباط می دهد. با در نظر گرفتن

ملاحظات مربوط به ناوردایی تحت پاریته، می توانیم بخش تانسوری مربوط به پتانسیل بین نوکلئونی را به صورت $V_T(r)S_{12}$ درنظر بگیریم که در آن $V_T(r)$ بستگی شعاعی نیرو و بزرگی آن را تأمین می‌کند و داریم

$$S_{12} = \frac{3(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^2} - \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \qquad (۱۲-۲)$$

تقارن نسبت به جنس نوکلئون

این بدان معنی است که پس از تصحیح نیروی کولنی در سیستم پروتون- پروتون، فرقی بین برهم‌کنش پروتون - پروتون و برهم کنش نوترون- نوترون نیست. دلیل این امر آن است که طول‌های پراکندگی و همچنین بردهای مؤثر در برهم کنش های pp و nn با هم مساوی است.

استقلال از بار الکتریکی

این واقعیت که نیروی هسته‌ای برای نوکلئون‌های باردار (پروتون‌ها) و نوکلئون‌های بی‌بار (نوترون ها) یکسان است، یا به عبارت دیگر هر سه نیروی هسته‌ای nn، pp و pn با هم مساوی هستند، به استقلال از بار نیروی هسته‌ای معروف است. به این ترتیب، استقلال از بار شرطی قویتر از تقارن نسبت به جنس است.

دافعه شدن در فواصل خیلی کوتاه

این نتیجه از بررسی کیفی چگالی هسته‌ای حاصل می شود. رشد هسته در اثر افزایش نوکلئون‌ها به صورتی است که چگالی مرکزی آن تقریباً ثابت می‌ماند، و از این رو باید عاملی وجود داشته باشد که از

تجمع و نزدیک‌شدن بیش از حد نوکلئون‌ها جلوگیری کند. در فاصله‌های حدود نیم فرمی نیروی بین نوکلئون‌ها به شدت دافعه است. اصطلاحاً می‌توانیم بگوییم که نوکلئون‌ها دارای مغزی سخت هستند.

وابستگی به سرعت نسبی نوکلئون ها

نیروهای وابسته به سرعت یا تکانه را نمی‌توان با پتانسیل نرده‌ای نشان داد، اما با استفاده از جملات درجه‌ی اول **P**، درجه‌ی دوم **P**، و غیره که هرکدام از آنها با یک پتانسیل مشخصه‌ی $V(r)$ متناظرند، می‌توان آنها را درنظر گرفت. یکی از صورت‌های قابل قبول این جمله که شامل توان‌های درجه اول **P** می شود و نسبت به پاریته و برگشت زمان ناورداست، $V(r)(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\cdot\mathbf{S}$ است که در آن $\mathbf{S}=\mathbf{s}_1+\mathbf{s}_2$ اسپین کل دو نوکلئون مورد بررسی است. تکانه‌ی زاویه‌ای نسبی نوکلئون‌ها $\mathbf{l}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ است، در نتیجه این جمله به خاطر مشابهت با فیزیک اتمی جمله‌ی اسپین مدار نامیده می شود و به صورت $V_{so}(r)\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}$ نوشته می‌شود.

۲-۴- مدل نیروی تبادل

یکی از سازوکارهای موفق درباره‌ی نیروی نوکلئون- نوکلئون، سازوکار نیروی تبادل است. برای تأیید حضور نیروی تبادل در هسته‌ها، دو دلیل عمده در دست است. دلیل اول خاصیت اشباع نیروی هسته ای است. پشتوانه‌ی تجربی خاصیت اشباع، چگالی هسته‌ای نسبتاً ثابت و انرژی بستگی نسبتاً ثابت به ازای هر نوکلئون می‌باشد. یعنی وقتی از اجتماع چند نوکلئون یک هسته به‌وجود می‌آید، انرژی بستگی بین یک نوکلئون و بقیه‌ی هسته به سوی یک حد میل می کند، یا به عبارت دیگر به نظر می‌رسد که هر نوکلئون فقط تعداد کمی از همسایه‌های نزدیکش را جذب می‌کند، اما همین نوکلئون در فاصله‌های خیلی کوتاه همان همسایه‌های نزدیک خود را هم دفع می‌کند تا از نزدیکی بیش از حد آنها جلوگیری کند. همانطور که هنگامی که چند اتم با اشتراک گذاشتن چند الکترون، مولکول پایدار را تشکیل می‌دهند ،

اگر بخواهیم اتم ها را به یکدیگر نزدیکتر کنیم، در اثر همپوشی پوسته‌های الکترونی پر یک نیروی دافعه‌ی قوی بین اتم ها به وجود می‌آید.

دلیل دوم آن است که سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی np در زوایای نزدیک به صفر در جهات رو به جلو دارای مقادیر بزرگ قله‌ای است و این نشانگر آن است که انتقال تکانه در برخورد بین ذرات فرودی و هدف کوچک است. اگر فرض کنیم که در طی برخورد، نوترون و پروتون جایشان را با هم عوض می کنند، مدل تبادل می تواند توضیح قانع کننده تری ارائه کند. این بدان معنی است که نوترونی که به طرف جلو حرکت می‌کند به پروتون تبدیل می‌شود و پروتونی که به عقب در حرکت است (در چارچوب مرکز جرم) به پروتون تبدیل می‌شود. در اینصورت از دیدگاه چارچوب آزمایشگاه، نوکلئون فرودی به صورت نوکلئونی نمایان می‌شود که به طرف جلو در حرکت است. چنین تحلیلی با براورد زاویه‌ی انحراف کوچک در پراکندگی نوکلئون ـ نوکلئون که در بالا مطرح شد، سازگاری دارد.

بنابراین با استفاده از نیروی تبادل، هم خصوصیت اشباع نیروهای هسته‌ای و هم وجود قله‌ی بزرگ رو به عقب در پراکندگی np را می‌توان توضیح داد. در مورد اول می‌گوییم برای آنکه نوعی پیوند اشباعی بین نوکلئون‌ها وجود داشته باشد باید بین آنها چیزی رد و بدل شود. در مورد دوم می‌گوییم که بین نوکلئون‌ها چیزی مبادله می شود که عملاً خصوصیت آنها را تغییر می‌دهد. بر اساس نظریه‌ی میدان ، هر جسمی در فضا یک میدان نیرو ایجاد می‌کند و برهم کنش جسم دوم، نه مستقیماً با جسم اول بلکه فقط از طریق همین میدان صورت می‌گیرد. در واقع به طور دقیقتر بنا بر نظریه‌ی میدان‌های کوانتومی، جسم اول در فضای اطرافش یک میدان کلاسیک به وجود نمی آورد بلکه از خود کوانتوم میدان گسیل می‌کند. در این صورت جسم دوم می‌تواند این کوانتوم‌های میدان را جذب کند. بنابراین طبیعی است که آن چیزی را که در برهم‌کنش نوکلئون ـ نوکلئون مبادله می‌شود، کوانتوم میدان هسته ای در نظر بگیریم. فرض کنید که نوکلئون (N) ذره ای مانند X از خود گسیل می‌کند و نوکلئون دومی این ذره‌ی X را جذب می‌کند

$$N_1 \rightarrow N_1 + X$$

$$X + N_2 \rightarrow N_3$$

یک نوکلئون تنها در صورتی می‌تواند یک ذره با انرژی جرمی $m_X c^2$ از خود گسیل کند و بدون نقض پایستگی انرژی همچنان به صورت نوکلئون باقی بماند که گسیل و جذب مجدد نوکلئون در چنان فاصله‌ی زمانی کوتاه Δt انجام گیرد که ما از نقض پایستگی انرژی مطلع نشویم. چون اصل عدم قطعیت توانایی ما را در اندازه گیری انرژی محدود می‌کند، اگر $\Delta t < \hbar / m_X c^2$ باشد، ما از نقض پایستگی انرژی به میزان $\Delta E = m_X c^2$ مطلع نخواهیم شد. بیشینه‌ی برد نیرو را بیشینه‌ی فاصله‌ای که ذره‌ی X می تواند در زمان Δt طی کند، تعیین می‌کند. اگر سرعت ذره را از مرتبه ی c بگیریم، حداکثر برد ذره R چنین می‌شود

$$R = c\Delta t = \frac{\hbar c}{m_X c^2} = \frac{200 MeV.fm}{m_X c^2} \qquad (۱۲-۲)$$

از این معادله روشن است که اگر برد نیروی هسته‌ای در حدود fm ۱ باشد ، انرژی جرمی ذره‌ی تبادلی باید در حدود MeV ۲۰۰ باشد. ذرات تبادلی حامل نیروی هسته‌ای را مزون می نامند. سبکترین مزون‌ها را که مزون π یا پیون نامیده می‌شوند عامل آن قسمت از پتانسیل نوکلئون- نوکلئون که برد بلندتر (از 1.0 تا $1.5\ fm$) دارد، می‌دانیم. برای آن که انواع تبادل‌های لازم در سیستم دو نوکلئونی امکان پذیر باشد، باید سه نوع پیون با بارهای الکتریکی 1+، 0 و 1- وجود داشته باشند. پیون‌ها اسپین صفر دارند و انرژی سکون آنها معادل $139.6 MeV$ (برای $\pi^{\pm}$) و $135.0 MeV$ (برای π^0) است [۱].

۲-۵- نیروهای چند جسمی

تا اینجا به طور ضمنی فرض کرده ایم که نیروی هسته ای نیرویی دو جسمی است. اگر سه نوکلئون مانند A، B و C نزدیک یکدیگر باشند نیروهای اعمال شده بر A، $F_{AB}+F_{AC}$ هستند که اگر C وجود نمی داشت F_{AB} نیروی میان A و B بود و هرگاه B وجود نمی داشت F_{AC} نیرویی میان A و C می شد. این مسلماً نحوه ی رفتار نیروهای الکترومغناطیسی و گرانشی است. از دیدی که از نیروهای حاصل از تبادل مزون ها داریم چنین بر می آید که تبادل های مزونی فقط میان جفت ها عمل می کند، ولی فوراً در می یابیم تبادل های دیگری نیز وجود دارند. برای مثال هنگامی که دو نوکلئون حضور دارند و یکی از نوکلئون ها دو مزون گسیل می کند، هر دو مزون باید جذب نوکلئون دیگر شوند، ولی هرگاه دو نوکلئون دیگر علاوه بر نوکلئون اول حضور داشته باشند، دو مزون گسیل شده می توانند جداگانه جذب هر یک از دو نوکلئون شوند. این امر منجر به نیروی سه جسمی می شود، نیرویی که دیگر تعریف بالا از نیروی دوجسمی برای آن برقرار نیست. از آنجا که باید مزون‌های زیادی به طور همزمان در این فرایندها ایجاد شوند، این خود ایجاب می کند که برد نیروها با افزایش تعداد جسم‌ها کاهش یابد. به تقریب برد نیروهای دو، سه، چهار، و پنج جسمی به ترتیب حدود 1.4، 0.7، 0.47 و 0.35 fm است. به علت نیروی دافعه‌ی قوی، نوکلئون‌ها تقریباً هیچ‌گاه از حدود نیم فرمی به یکدیگر نزدیک‌تر نمی شوند. بنابراین می‌توان انتظار داشت که نیروی دو جسمی در تعیین ساختار هسته از اهمیت زیادی برخوردار است و نیروهای چهار جسمی و بیشتر بی‌اهمیت خواهند بود . لذا مهم‌ترین نیروی چند جسمی که لازم است به آن توجه کنیم، نیروی سه جسمی است. این نیرو در سیستم‌هایی که شامل سه نوکلئون هستند مطالعه می‌شود [۴]. برای مثال تریتون، (هسته‌ی تریتیوم) از یک پروتون و دو نوترون تشکیل شده است. می‌توان گفت که یک نیروی دو جسمی بین نوکلئون‌های ۱ و ۲، نوکلئون های ۲ و ۳ و نوکلئون های ۱ و ۳ وجود دارد. اگر پس از در نظر گرفتن مجموع برهم‌کنش ها بین این سه جفت نوکلئون و همچنین منظور کردن هر

جمله‌ی تک جسمی ممکن، هنوز نیروی بررسی نشده‌ای در سیستم وجود داشته باشد، آنگاه می‌توانیم بگوییم یک نیروی سه جسمی بین نوکلئون‌ها برقرار است. شواهد نشان می‌دهند که این نیرو، اگر وجود داشته باشد، باید خیلی ضعیف تر از نیروی دوجسمی باشد. دانش نظری و داده‌های تجربی اثر نیروهای سه جسمی را در هسته مشخص کرده اند [۸].

۲-۶- پتانسیل های هسته ای

برهم کنش نوکلئون- نوکلئون همواره به سه بخش تقسیم می گردد [۹]:

۱- بخش بلند برد[۱] $(r \geq 2\,fm)$: در بسیاری از مدل ها این بخش به شکل پتانسیل تبادل تک پیونی (OPEP)[۲] در نظر گرفته می‌شود و به عنوان یک دنباله به سایر قسمت‌های پتانسیل افزوده می‌گردد.

۲- بخش میان برد[۳] $(1\,fm \leq r \leq 2\,fm)$: که ناشی از تبادل‌های تک مزونی و به طور ویژه تبادل مزون های نرده ای است (دو پیون یا مزون های سنگین تر)

۳- بخش کوتاه برد[۴] $(r \leq 1\,fm)$: که همواره با تبادل مزون های برداری همراه است (مزون‌های سنگین و تبادل های چند پیونی)

تاکنون پتانسیل‌های مختلفی برای توصیف برهم‌کنش نوکلئون‌ها با در نظرگرفتن بخش‌های مختلف ذکر شده، ارائه گردیده که از آن جمله می‌توان به پتانسیل های یوکاوا، وودز ساکسون، هولسن، هامادا جانسون، راید و ... اشاره کرد. در فصل‌های بعدی ضمن توصیف خواص پتانسیل یوکاوا سعی می‌کنیم به کمک حل معادله شرودینگر برای آن حالت‌های مقید سیستم سه نوکلئونی را به‌دست آوریم.

---

[1] Long range part
[2] One Pion Exchange Potential
[3] Medium range part
[4] Short range part

فصل سوم

فضای فوق‌کروی

۳-۱- مقدمه

از میان روش‌های مختلف مطالعه‌ی معادله‌ی موج برای سیستم‌های سه ذره‌ای (مانند سه کوارک، سه اتم، سه نوکلئون و . . .) روش بسط هماهنگ‌های فوق کروی[1](HHEM) به طور ویژه‌ای مورد توجه قرار گرفته است [۱۰]. باید توجه شود که این روش، ابزاری جهت دستیابی به معادله‌ی شرودینگر چند جسمی برای هنگامی است که تابع موج کل برحسب مجموعه‌ی کاملی از پایه‌های فوق کروی بسط داده شده است [۱۱]. حتی نیروهای چند جسمی نیز که ساختار بسیار پیچیده‌ای دارند در غالب هماهنگ‌های فوق کروی قابل معرفی و بررسی هستند [۱۲]. میزان همگرایی روش بسط هماهنگ‌های فوق کروی برای پتانسیل‌های مختلف در پژوهش‌های فراوانی از جمله پژوهش ارن[2] و همکاران [۱۳] مورد مطالعه قرار گرفته است. در این فصل توصیف نسبتاً جامعی از فضای فوق کروی ارائه خواهیم داد و فرم معادله‌ی شرودینگر برای سیستم سه نوکلئونی را در این فضا به دست می‌آوریم و در فصل بعد به معرفی و بررسی روش‌های عددی‌ای می‌پردازیم که به کمک آنها می‌توان این معادله را حل کرد.

۳-۲- مختصات ژاکوبی[3] و فضای فوق‌کروی

در بررسی حرکت نوکلئون ها در هسته، استفاده از مختصات ژاکوبی که برای مطالعه‌ی سیستم‌های چندجسمی مور توجه قرار دارد، انتخاب مفیدی است. در این مختصات برای یک سیستم A ذره ای می‌توان $N=A-1$ بردار ژاکوبی و در نتیجه $3N$ مختصه ی ژاکوبی را تعریف کرد. هر بردار ژاکوبی در واقع مرکز جرم یک زیر سیستم را به یکی از ذرات باقیمانده وصل می کند [۱۴]. N بردار

[1] Hyperspherical Harmonics Expansion Method
[2] Erens
[3] Jacobi coordinates

ژاکوبی $\xi_i (i=1,\ldots,N)$ که ترکیبات خطی از $\mathbf{r}_i$ها ($\mathbf{r}_i$ بردار مکان ذره iام نسبت به مبدأ است) هستند به شکل زیر تعریف می‌گردند

$$\xi_1 = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$$

$$\xi_2 = \sqrt{\frac{4}{3}}(\mathbf{r}_3 - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2})$$

و به همین ترتیب برای j امین بردار داریم

$$\xi_j = \sqrt{\frac{2j}{j+1}}(\mathbf{r}_{j+1} - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \cdots + \mathbf{r}_j}{j}) = \sqrt{\frac{2j}{j+1}}(\mathbf{r}_{j+1} - \frac{1}{j}\sum_{i=1}^{j}\mathbf{r}_i) \qquad (۱-۳)$$

در واقع ξ_1 بردار مکان ذره (۲) نسبت (۱)، ξ_2 بردار مکان ذره (۳) نسبت به مرکز جرم ذرات (۱) و (۲) و به همین ترتیب ξ_i بردار مکان ذره ی iام نسبت به مرکز جرم دستگاه متشکل از $i-1$ ذره‌ی قبلی است.

با تعریف بردار مرکز جرم به صورت زیر

$$\mathbf{R} = \frac{1}{A}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \cdots + \mathbf{r}_A) = \frac{1}{A}\sum_{i=1}^{A}\mathbf{r}_i = \frac{1}{N+1}\sum_{i=1}^{N+1}\mathbf{r}_i \qquad (۲-۳)$$

می‌توان روابط (۳-۱) را به شکل زیر نوشت

$$\xi_1 = 2(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}) \qquad (۳-۳)$$

$$\xi_2 = \sqrt{3}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{R})$$
$$\vdots$$

$$\xi_j = \sqrt{\frac{2(j+1)}{j}}(\mathbf{r}_{j+1} - \mathbf{R})$$

در بحث مدل لایه‌ای اشاره کردیم که پتانسیل هسته‌ای به وسیله‌ی خود نوکلئون‌ها به وجود می آید و عوامل خارجی در ایجاد آن نقشی ندارند، بنابراین چون با نیروهای داخلی سروکار داریم می‌توانیم با قرار دادن مرکز جرم در مبدأ مختصات (استفاده از دستگاه مرکز جرم در مسأله)، 3 مختصه‌ی مربوط به مرکز جرم را حذف کرده و با $3A-3$ مختصه‌ی باقیمانده که در واقع همان ابعاد D فضای ما را تشکیل می‌دهند کار کنیم.

در این مختصات ابر شعاع[1] x به صورت زیر تعریف می‌شود که نشان دهنده‌ی فاصله‌ی بین ذره‌ای D بعدی است.

$$x=\left[\sum_{i=1}^{N}\xi_i^2\right]^{\frac{1}{2}}=\left[2\sum_{i=1}^{A}(\mathbf{r}_i-\mathbf{R})^2\right]^{\frac{1}{2}}=\left[\frac{2}{A}(\mathbf{r}_{12}^2+\mathbf{r}_{23}^2+\cdots+\mathbf{r}_{1A}^2)\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (۴-۳)$$

در واقع معرفی ابرشعاع به این معنی است که ما در ادامه قصد داریم از مختصات کروی استفاده کنیم زیرا هسته دارای شکلی تقریباً کروی است. در اینجا اضافه کردن پیشوند «فوق» اشاره به فضای بیش از سه بعد دارد [۱۵]. در تبدیل بردارهای ژاکوبی به مختصات فوق‌کروی از $D=3N$ مختصه، $2N$ مختصه به زوایای قطبی و سمتی مربوط به N بردار ژاکوبی، $N-1$ مختصه فوق زاویه و یک مختصه‌ی باقیمانده ابرشعاع است [۱۱]. پس غیر از ابر شعاع $3N-1$ مختصه‌ی دیگر وجود دارند که می‌توان آنها را در یک نمایش واحد به صورت زیر نشان داد

$$\Omega=\Omega(\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{D-1}) \qquad (۵-۳)$$

Ω در این رابطه در واقع نماد کلی نشان دهنده‌ی مجموعه‌ای از $3N-1$ زاویه و فوق زاویه است [۱۶] که فوق زوایا از θ_{2N+1} شروع می شوند. همچنین در نمایش جدید ابر شعاع به صورت (۳-۶) است

[1] Hyperradius

$$x=\left[\sum_{i=1}^{D} x_i^2\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (۶-۳)$$

x_iها تعداد D مولفه‌ی فضایی متعلق به N بردار ژاکوبی ξ_i هستند و از طریق رابطه‌ی زیر به ابر شعاع و زوایای θ_i مربوط می شوند [۱۷]

$$x_1 = x\sin\theta_1 \sin\theta_2 \cdots \sin\theta_{D-1}$$

$$x_2 = x\cos\theta_1 \sin\theta_2 \sin\theta_3 \cdots \sin\theta_{D-1}$$

$$\vdots$$

$$x_i = x\cos\theta_{i-1} \sin\theta_i \sin\theta_{i+1} \cdots \sin\theta_{D-1}$$

$$\vdots$$

$$x_{D-1} = x\cos\theta_{D-2} \sin\theta_{D-1}$$

$$x_D = x\cos\theta_{D-1} \qquad (۷-۳)$$

که در آن داریم

$$D = 3,4,5,\ldots, \quad 0 < x < \infty \qquad (۸-۳)$$

و با توجه به (۳-۷) اندازه ی زوایا از رابطه

$$\tan\theta_i = \left[\sum_{j=1}^{i} x_j^2\right] \Big/ x_{i+1} \qquad (i = 1,2,\ldots,D-1) \qquad (۹-۳)$$

قابل محاسبه خواهد بود.

۳-۳- لاپلاسی سیستم و معادله‌ی شرودینگر در فضای فوق‌کروی

با استفاده از مختصات ژاکوبی یعنی روابط (۳-۱) و (۳-۲) می‌توان عملگر لاپلاسی یک سیستم شامل A ذره‌ی یکسان به جرم m را به صورت رابطه‌ی زیر نوشت [۱۱]

$$\nabla^2 = \sum_{i=1}^{A} \nabla_{r_i}^2 = \sum_{i=1}^{A} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} = 2\sum_{i=1}^{N=A-1} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \frac{1}{A}\frac{\partial^2}{\partial R^2} = 2\sum_{i=1}^{N} \nabla_{\xi_i^2}^2 + \frac{1}{A}\nabla_R^2 \qquad (۱۰-۳)$$

بنابراین عملگر انرژی جنبشی سیستم به شکل

$$T = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{m}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \frac{1}{2mA}\nabla_R^2 \qquad (۱۱-۳)$$

بیان می شود. این رابطه بیان کننده‌ی این واقعیت است که انرژی جنبشی سیستم از دو بخش تشکیل شده که یک بخش مربوط به حرکت ذره‌ی آزاد مرکز جرم و بخش دیگر انرژی جنبشی نسبی ذرات سیستم است. از آنجا که ما مسئله را در دستگاه مرکز جرم بررسی می کنیم، بنابراین مرکز جرم سیستم ساکن و جمله‌ی دوم سمت راست معادله‌ی (۳-۱۱) برابر صفر است. پس رابطه‌ی (۳-۱۱) به صورت

$$T = -\frac{\hbar^2}{m}\nabla_{\xi_i}^2 = -\frac{\hbar^2}{m}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} \qquad (۱۲-۳)$$

درمی‌آید. حال باید به دنبال بیان عملگر انرژی جنبشی برحسب ابرشعاع x باشیم. بدین منظور با استفاده از روابط (۳-۶) و (۳-۷) داریم

$$\nabla_{\xi_i}^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} = \sum_{i=1}^{D} \frac{\partial}{\partial x_i^2} = \sum_{i=1}^{D} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{1}{x^{D-1}} \frac{\partial}{\partial x} x^{D-1} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$+ \frac{1}{x^2} \sum_{j=1}^{D-2} \frac{1}{\sin^2 \theta_{j+1} \ldots \sin^2 \theta_{D-1}} \left(\frac{1}{\sin^{j-1} \theta_j} \frac{\partial}{\partial \theta_j} \sin^{j-1} \theta_j \frac{\partial}{\partial \theta_j} \right)$$

$$+ \frac{1}{x^2} \left(\frac{1}{\sin^{D-2} \theta_{D-1}} \frac{\partial}{\partial \theta_{D-1}} \sin^{D-2} \theta_{D-1} \frac{\partial}{\partial \theta_{D-1}} \right) \qquad (۱۳-۳)$$

مشخص است که لاپلاسی متشکل از دو قسمت می باشد، قسمت شعاعی و قسمت زاویه‌ای. با بررسی خواص عملگر تکانه زاویه‌ای L نشان می‌دهیم که قسمت زاویه‌ای به وجود این عملگر در لاپلاسی مربوط می شود. این عمگر دارای ویژگی‌های زیر است

$$L_{ij} = -L_{ji} = x_i p_j - x_j p_i, \quad i = 1, 2, \ldots, j-1, \quad j = 1, 2, \ldots, D-1 \qquad (۱۴-۳)$$

که در آن

$$p_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \qquad (۱۵-۳)$$

همچنین رابطه‌ی جابجایی زیر نیز برقرار است

$$\left[L_{ij}, L_{kl} \right] = i\hbar \delta_{jl} L_{ik} + i\hbar \delta_{ik} L_{jl} - i\hbar \delta_{jk} L_{il} - i\hbar \delta_{il} L_{jk} \qquad (۱۶-۳)$$

علاوه بر این داریم

$$L_k^2 = \sum_{i,j} L_{ij} L_{ij}, \qquad i = 1, 2, \ldots, j-1, \quad j = 2, 3, \ldots, k-1 \qquad (۱۷-۳)$$

به کمک این روابط می‌توانیم رابطه‌های بازگشتی (۳-۱۸) را به دست‌آوریم [۱۷]

$$L_1^2 = -\frac{\partial^2}{\partial\theta_1^2}$$

$$L_2^2 = -\left(\frac{1}{\sin\theta_2}\frac{\partial}{\partial\theta_2}\sin\theta_2\frac{\partial}{\partial\theta_2} - \frac{L_1^2}{\sin^2\theta_2}\right)$$

$$\vdots$$

$$L_k^2 = -\left(\frac{1}{\sin^{k-1}\theta_k}\frac{\partial}{\partial\theta_k}\sin^{k-1}\theta_k\frac{\partial}{\partial\theta_k} - \frac{L_{k-1}^2}{\sin^2\theta_k}\right)$$

$$\vdots$$

$$L_{D-1}^2 = -\left(\frac{1}{\sin^{D-2}\theta_{D-1}}\frac{\partial}{\partial\theta_{D-1}}\sin^{D-2}\theta_{D-1}\frac{\partial}{\partial\theta_{D-1}} - \frac{L_{D-2}^2}{\sin^2\theta_{D-1}}\right) \qquad (۱۸-۳)$$

بنابراین از روابط (۳-۱۳) و (۳-۱۸) شکل نهایی عملگر لاپلاسی در D بعد به دست می آید

$$\nabla^2_{\xi_i(D)} = \frac{1}{x^{D-1}}\frac{\partial}{\partial x}x^{D-1}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{L_{D-1}^2}{x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{D-1}{x}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{L_{D-1}^2}{x^2} \qquad (۱۹-۳)$$

در نام‌گذاری مرسوم، L عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای بزرگ نامیده می‌شود. ویژه مقادیر L به‌صورت $\gamma(\gamma+D-2)$ هستند و در آن γ که عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای بزرگ خوانده می‌شود با رابطه‌ی

$$\gamma = \sum_{i=1}^{N}(2n_i + l_{\xi_i}), \quad n_1 = 0 \qquad (۲۰-۳)$$

داده می‌شود. n_i ها، تعداد $N-1$ عدد کوانتومی فوق‌کروی مربوط به $N-1$ فوق زاویه و l_{ξ_i} ها تعداد N عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای مداری مربوط به هر یک از N مختصه‌ی ξ_i است.

با استفاده از روابط (۳-۱۲) و (۳-۱۹)، عملگر انرژی جنبشی سیستم در فضای فوق‌کروی D بعدی در قالب رابطه‌ی زیر بیان می‌شود

$$T=-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{D-1}{x}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{L_{D-1}^2}{x^2}\right) \qquad (۲۱-۳)$$

بنابراین معادله‌ی شرودینگر در فضای فوق‌کروی را می‌توان به شکل رابطه‌ی (۳-۲۲) نوشت

$$(H-E)\psi(x,\Omega)=-\left(\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{D-1}{x}\frac{d}{dx}-\frac{L_{D-1}^2(\Omega)}{x^2}\right)+V(x,\Omega)-E\right)\psi(x,\Omega)=0 \qquad (۲۲-۳)$$

در اینجا $V(x,\Omega)$ پتانسیل برهم‌کنش است. این پتانسیل باید تحت چرخش در فضای D بعدی ناوردا باقی بماند. بسط تابع موج سیستم در پایه‌ی هماهنگ‌های فوق‌کروی به صورت

$$\psi(x,\Omega)=\sum_{[\gamma]}x^{-(D-1)/2}u_{[\gamma]}(x)Y_{[\gamma]}(\Omega) \qquad (۲۳-۳)$$

می باشد که $Y_{[\gamma]}(\Omega)$ها هماهنگ های فوق‌کروی (در بخش بعد توصیف کامل‌تری از آنها ارائه می‌دهیم) و $u_{[\gamma]}(x)$ تابع موج فوق شعاعی است. با قراردادن این تابع موج در معادله‌ی شرودینگر و جمع‌بندی روی مجموعه‌ی Ω به یک مجموعه‌ی نامحدود از معادلات دیفرانسیل جفت شده مرتبه دوم

$$\left\langle Y_{[\gamma]}\middle|H-E\middle|\sum_{[\gamma']}x^{-(D-1)/2}u_{[\gamma']}(x)Y_{[\gamma']}(\Omega)\right\rangle=0 \qquad (۲۴-۳)$$

می رسیم. از بسط این رابطه معادله (۳-۲۵) حاصل می شود

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{m}\left[\frac{d^2}{dx^2}-\frac{\gamma(\gamma+D-2)+\frac{1}{4}(D-1)(D-3)}{x^2}\right]-E\right\}u_{[\gamma]}(x)$$

$$+\sum_{[\gamma']}\left\langle Y_{[\gamma]}\middle|V(x,\Omega)\middle|Y_{[\gamma']}\right\rangle u_{[\gamma']}(x)=0 \qquad (۲۵-۳)$$

چون پتانسیل مورد استفاده‌ی ما وابستگی زاویه‌ای ندارد ($V=V(x)$) از رابطه (۳-۲۵) به معادله‌ی فوق‌شعاعی D بعدی شرودینگر می‌رسیم

$$-\frac{\hbar^2}{m}\left[\frac{d^2}{dx^2}-\frac{\gamma(\gamma+D-2)+\frac{1}{4}(D-1)(D-3)}{x^2}\right]u_{[\gamma]}(x)+V(x)u_{[\gamma]}(x)=Eu_{[\gamma]}(x) \qquad (۳-۲۶)$$

شرط بهنجارش تابع موج فوق شعاعی $u_{[\gamma]}(x)$ نیز به صورت رابطه ی زیر بیان می گردد

$$\sum_{[\gamma]}\int_0^\infty dx\left|u_{[\gamma]}(x)\right|^2=1 \qquad (۳-۲۷)$$

۳-۴- هماهنگ‌های فوق‌کروی

در نمایش زرینک و برینکمن[1] [۱۶] ، عملگر $L^2(\Omega)$ به صورت زیر نمایش داده می‌شود

$$L^2(\Omega)=\sum_{i=1}^{N}\left\{\prod_{j=i+1}^{N}\sin^2\phi_j\right\}^{-1}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\phi_j^2}+((3i-4)\cot\phi_i-2\tan\phi_i)\frac{\partial}{\partial\phi_i}+\frac{l^2(\hat{\xi}_i)}{\cos^2\phi_i}\right\} \qquad (۳-۲۸)$$

در اینجا فوق‌زوایا (که تعداد آنها برابر $N-1$ است) را با نماد ϕ_J نشان داده‌ایم ($\phi_1=0$ و $0<\phi_j<\pi/2$ $j=2,\ldots,N$). همچنین $l^2(\hat{\xi}_i)$ عملگر تکانه زاویه‌ای معمولی مربوط به بردار ξ_i است (منظور از $\hat{\xi}_i$ در این نمایش نیز همان زوایای قطبی و سمتی مربوط به بردار ξ_i است). ویژه توابع عملگر $L^2(\Omega)$ هماهنگ‌های فوق‌کروی هستند :

$$Y_{[\gamma]}(\Omega)=Y_{l_1}^{m_1}(\hat{\xi}_1)\prod_{j=2}^{N}Y_{l_j}^{m_j}(\hat{\xi}_j)\,{}^{(i)}P_{\gamma_j}^{l_j,\gamma_{j-1}}(\phi_j) \qquad (۳-۲۹)$$

که جواب‌های معادله‌ی ویژه مقداری زیر می‌باشند

[1] Zerinke and Brinkman

$$L^2(\Omega)Y_{[\gamma]}(\Omega)=\gamma(\gamma+3N-2)Y_{[\gamma]}(\Omega) \qquad (۳۰-۳)$$

در رابطه‌ی مربوط به هماهنگ‌های فوق‌کروی (۳-۲۸)، $Y_{l_j}^{m_j}(\hat{\xi}_j)$ ها هماهنگ‌های کروی هستند و $^{(i)}P_{\gamma_j}^{l_j,\gamma_{j-1}}(\phi_j)$ با رابطه (۳-۳۰) بیان می‌شود

$$^{(j)}P_{\gamma_j}^{l_j,\gamma_{j-1}}(\phi_j)=\left\{\frac{2\nu_j\Gamma(\nu_j-n_j)\Gamma(n_j+1)}{\Gamma(\nu_j-n_j-l_j-\frac{1}{2})\Gamma(n_j+l_j+\frac{3}{2})}\right\}^{\frac{1}{2}}(\cos\phi_j)^{l_j}(\sin\phi_j)^{\gamma_{j-1}}P_{n_j}^{\nu_{j-1},l_j+1/2}(\cos 2\phi_j)$$

(۳۱-۳)

که در آن

$$\nu_j=\gamma_j+\frac{3j}{2}-1, \qquad (۳۲-۳)$$

$$\gamma_j=\sum_{i=1}^{j}(2n_i+l_i),\quad n_1=0$$

$P_n^{\alpha,\beta}$ چندجمله‌ای‌های ژاکوبی و Γ همان تابع مشهور گاما در ریاضی است. همانطور که قبلاً اشاره کردیم، مجموعه ی γ از $3N-1$ عدد کوانتومی که یک هماهنگ فوق کروی را در مورد مختصه‌های زاویه‌ای ما (مجموعه‌ی Ω) تعریف می‌کند، ترکیبی است از :

- N عدد کوانتومی مداری l_j و N عدد کوانتومی مغناطیسی m_j برای هر بردار ξ_j ($j=1,\ldots,N$).
- $N-1$ عدد کوانتومی فوق‌کروی n_j، ($j=2,\ldots,N$) برای هر فوق زاویه‌ی ϕ_j.

همانطورکه گفتیم γ عدد کوانتومی تکانه‌ی زاویه‌ای بزرگ است و با رابطه‌ی (۳-۲۰) داده می‌شود. پاریته‌ی هماهنگ‌های فوق‌کروی تحت تبدیل ξ به $-\xi$ نیز به شکل $(-1)^{\gamma}$ بیان می‌شود.

۳-۵- سیستم سه ذره‌ای

در این بخش قصد داریم آنچه از ابتدای فصل تاکنون بیان شد را برای مورد خاص سیستم سه ذره‌ای که مسئله‌ی مورد نظر ماست، به‌کار بریم. برای سیستم سه ذره‌ای داریم :

$$A=3, \quad N=A-1=2, \quad D=3A-3=3N=6 \qquad (۳۳-۳)$$

بنابراین با یک فضای فوق‌کروی شش بعدی مواجه هستیم. یادآوری می‌کنیم که ذرات را یکسان و به جرم m در نظر گرفته‌ایم و هیچ نیروی خارجی به سیستم وارد نمی‌شود. از رابطه‌های (۳-۱) و (۳-۲) بردار مرکز جرم و بردارهای ژاکوبی به صورت زیر هستند

$$\mathbf{R}=\frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3}\mathbf{r}_i=\frac{1}{3}(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2+\mathbf{r}_3)$$

$$\boldsymbol{\xi}_1=(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)$$

$$\boldsymbol{\xi}_2=\sqrt{\frac{4}{3}}(\mathbf{r}_3-\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2})=\frac{1}{\sqrt{3}}(2\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) \qquad (۳۴-۳)$$

با توجه به اینکه داریم [۱۸]

$$\xi_1=\left[\xi_{1x}^2+\xi_{1y}^2+\xi_{1z}^2\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad \xi_2=\left[\xi_{2x}^2+\xi_{2y}^2+\xi_{2z}^2\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (۳۵-۳)$$

جملات لاپلاسی شامل شش جمله می باشند

$$\frac{\partial^2}{\partial\xi_1{}^2}=\frac{\partial^2}{\partial\xi_{1x}{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial\xi_{1y}{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial\xi_{1z}{}^2}, \quad \frac{\partial^2}{\partial\xi_2{}^2}=\frac{\partial^2}{\partial\xi_{2x}{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial\xi_{2y}{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial\xi_{2z}{}^2} \qquad (۳۶-۳)$$

حال با استفاده از نمایش

$$\xi_{1x} = x_1, \quad \xi_{1y} = x_2, \quad \xi_{1z} = x_3, \quad \xi_{2x} = x_4, \quad \xi_{2y} = x_5, \quad \xi_{2z} = x_6 \qquad (۳۷-۳)$$

و روابط (۳-۷) تبدیل از مختصلت ژاکوبی به مختصات فوق کروی را انجام می دهیم

$$x_1 = x \sin\theta_1 \sin\theta_2 \sin\theta_3 \sin\theta_4 \sin\theta_5$$

$$x_2 = x \cos\theta_1 \sin\theta_2 \sin\theta_3 \sin\theta_4 \sin\theta_5$$

$$x_3 = x \cos\theta_2 \sin\theta_3 \sin\theta_4 \sin\theta_5$$

$$x_4 = x \cos\theta_3 \sin\theta_4 \sin\theta_5$$

$$x_5 = x \cos\theta_4 \sin\theta_5$$

$$x_6 = x \cos\theta_5 \qquad (۳۸-۳)$$

که در اینجا θ_5 فوق زاویه است. بنابراین رابطه (۳-۱۳) برای لاپلاسی سیستم سه ذره‌ای به شکل

$$\nabla^2 = \sum_{i=1}^{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} = \sum_{i=1}^{6} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = \sum_{i=1}^{6} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{1}{x^5} \frac{\partial}{\partial x}\left(x^5 \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$+ \frac{1}{x^2 \sin^2\theta_2 \sin^2\theta_3 \sin^2\theta_4 \sin^2\theta_5} \frac{\partial}{\partial \theta_1}\left(\frac{\partial}{\partial \theta_1} \right)$$

$$+ \frac{1}{x^2 \sin^2\theta_3 \sin^2\theta_4 \sin^2\theta_5}\left(\frac{1}{\sin\theta_2} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \sin\theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} \right)$$

$$+ \frac{1}{x^2 \sin^2\theta_4 \sin^2\theta_5}\left(\frac{1}{\sin^2\theta_3} \frac{\partial}{\partial \theta_3} \sin^2\theta_3 \frac{\partial}{\partial \theta_3} \right) + \frac{1}{x^2 \sin^2\theta_5}\left(\frac{1}{\sin^3\theta_4} \frac{\partial}{\partial \theta_4} \sin^3\theta_4 \frac{\partial}{\partial \theta_4} \right)$$

$$+ \frac{1}{x^2 \sin^4\theta_5}\left(\frac{\partial}{\partial \theta_5} \sin^4\theta_5 \frac{\partial}{\partial \theta_5} \right) \qquad (۳۹-۳)$$

در می‌آید که می‌توان آن را برحسب عملگر تکانه زاویه‌ای بزرگ (رابطه‌ی (۳-۱۹)) نوشت

$$\nabla^2_{\xi_i} = \frac{1}{x^5}\frac{\partial}{\partial x}x^5\frac{\partial}{\partial x} + \frac{L_5^2}{x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{5}{x}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{L_5^2}{x^2} \qquad (۴۰-۳)$$

و نهایتاً معادله شرودینگر فوق شعاعی (۳-۲۵) برای سیستم سه ذره ای به معادله (۳-۴۱) تبدیل می‌شود.

$$-\frac{\hbar^2}{m}\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{(\gamma+2)^2 - \frac{1}{4}}{x^2}\right]u_{[\gamma]}(x) + V(x)u_{[\gamma]}(x) = Eu_{[\gamma]}(x) \qquad (۴۱-۳)$$

در فصل بعد به دنبال توصیف یک روش عددی مناسب برای حل معادلاتی مانند (۳-۴۱) خواهیم بود.

فصل چهارم

روش‌های عددی

۴-۱- مقدمه

حل تحلیلی معادله‌ی شعاعی شرودینگر در مکانیک کوانتومی غیر نسبیتی از اهمیت بالایی برخوردار است، زیرا تابع موج تمام اطلاعات لازم درباره ی سیستم کوانتومی مورد نظر را دربرمی‌گیرد [۱۹]. تاکنون روش‌های تحلیلی زیادی از جمله ابرتقارن[۱]، NU[۲]، تقریب پکریس[۳]، قاعده ی کوانتش اصلاح شده[۴]، روش حدس جواب[۵] و ... در این زمینه ارائه شده است. اما متأسفانه حل تحلیلی معادله‌ی شرودینگر برای بسیاری از پتانسیل‌های نمایی در حالات $l \neq 0$ ناممکن است. همچنین تعداد معدودی از پتانسیل‌های فیزیکی دارای حل تحلیلی دقیق برای تمام حالات n و l هستند [۲۰]. این چنین است که محدودیت توانایی ما در دستیابی به جواب‌های تحلیلی، محبوبیت ایده‌ی استفاده از روش‌های عددی را تقویت می‌کند. تاکنون گستره‌ی بسیار متنوعی از روش‌های عددی برای رویارویی با مسائل کوانتومی ارائه گردیده‌اند که قطعاً در اینجا مجال پرداختن به تمام آنها وجود ندارد. هدف معرفی و بررسی برخی از این روش‌هاست که ما را در حل مسئله‌ی مورد نظرمان یاری نمایند.

۴-۲- انتگرال‌گیری عددی در معادلات دیفرانسیل معمولی

مسائل شامل معادلات دیفرانسیل معمولی را همواره می‌توان به مسئله‌ی بررسی مجموعه‌ای از معادلات درجه اول کاهش داد. برای مثال معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه دوم

$$\frac{d^2y}{dx^2} + q(x)\frac{dy}{dx} = r(x) \qquad (۱-۴)$$

را می توان به دو معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه اول

---

[1] Super symmetry (SUSY)
[2] Nikiforov-Uvarov method
[3] Pekeris approximation
[4] Improved Quantization Rule (IQR)
[5] Ansatz method

$$\frac{dy}{dx} = z(x) \qquad (۲-۴)$$

$$\frac{dz}{dx} = r(x) - q(x)z(x)$$

تبدیل کرد که در آن z یک متغیر جدید است. بنابراین مسئله‌ی عمومی معادلات دیفرانسیل معمولی نیز به مسئله‌ی مطالعه‌ی N معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه اول جفت شده برای توابع y_i $(i = 1, 2, \ldots, N)$ که به شکل کلی

$$\frac{dy_i}{dx} = f_i(x, y_1, \ldots, y_N), \quad i = 1, 2, \ldots, N \qquad (۳-۴)$$

هستند، کاهش می یابد. مسئله‌ی شامل معادله‌ی دیفرانسیل معمولی به طور کامل توسط خود معادله به تنهایی مشخص نمی‌شود. درواقع ماهیت شرایط مرزی است که نحوه‌ی حمله‌ی عددی به معادله دیفرانسیل را مشخص می‌کند. شرایط مرزی در حقیقت شرایطی جبری بر روی مقادیر توابع y_i هستند. مسائل شرایط مرزی به دوگروه اصلی تقسیم می‌شوند:

- **مسائل مقدار اولیه**[1] که در آنها مقادیر y_i ها در یک نقطه‌ی آغازین مانند x_s در دست است و هدف یافتن مقادیر y_i ها در یک نقطه ی پایانی مانند x_f یا برخی نقاط گسسته است.
- **مسائل با شرایط دو مرزی**[2] که در آنها شرایط مرزی باید در بیش از یک نقطه ارضا شوند. به طور نمونه، برخی شرایط باید در نقطه ی x_s و شرایط باقیمانده باید در x_f برقرار باشند.

در این قسمت سعی داریم در ابتدا روش‌های رانگه کوتا را که از روش‌های عددی مشهور برای حل مسائل مقدار اولیه هستند معرفی نموده و سپس به سراغ بررسی مسائل دو مرزی که مد نظر ما هستند برویم [۲۱].

[1] Initial value problems
[2] Two point boundary value problems

۴-۳- روش رانگه کوتا[1]

روش رانگه‌کوتا با جمع آوری اطلاعات از طریق گام‌های متعدد اویلرگونه (که هرکدام شامل تخمین f ها هستند) اقدام به گسترش یک جواب در طول یک بازه می‌نماید و سپس اطلاعات بدست آمده را برای منطبق کردن جواب با بسط یک سری تیلور تا چند مرتبه بالاتر به کار می‌بندد.

۴-۳-۱ روش رانگه کوتای مرتبه دوم

رابطه‌ی (۴-۳) را دوباره در نظر می‌گیریم. فرمول روش اویلر به صورت زیر است

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \qquad (۴-۴)$$

که یک جواب را از x_n تا $x_{n+1} = x_n + h$ پیش می‌برد. رابطه نامتقارن است زیرا جواب را در طول یک بازه‌ی h پیش می‌برد اما فقط از اطلاعات مشتق مربوط به نقطه‌ی آغازین بازه استفاده می‌کند. این بدان معنی است که خطای گام تنها به اندازه‌ی توان اول h کوچکتر از تصحیح است و جمله‌ی $o(h^2)$ باید به سمت راست (۴-۴) افزوده شود. بنابراین روش اویلر روش عملی دقیقی برای رویارویی با معادلات دیفرانسیل معمولی نیست. یک رابطه‌ی دقیق‌تر به شکل زیر است

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)$$

$$y_{n+1} = y_n + k_2 + o(h^3) \qquad (۵-۴)$$

که به روش رانگه‌کوتای مرتبه دوم معروف است (به طور قراردادی، یک روش که خطای آن از مرتبه $o(h^{n+1})$ است، روش مرتبه‌ی nام نامیده می شود) و با تعیین مشتق در نقطه‌ی میانی بازه برآورد دقیق‌تری از جواب را فراهم می‌سازد.

[1] Runge-Kutta method

۴-۳-۲- روش رانگه کوتای مرتبه چهارم

رابطه‌ای که در اغلب موارد به مراتب بیشتر از بقیه استفاده می‌شود رابطه‌ی معروف به رانگه کوتای مرتبه چهارم می‌باشد که فرمول کلی آن به شکل زیر است

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2})$$

$$k_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2})$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + o(h^5) \qquad (۶-۴)$$

روش رانگه کوتای مرتبه چهارم نیازمند چهار بار سنجش تابع f در هر گام است. البته باید دقت داشته باشیم که همیشه مرتبه‌ی بالاتر به معنای دقت بیشتر نیست.

۴-۳-۳- روش رانگه کوتای مرتبه پنجم (رانگه کوتا- فلبرگ) با اندازه‌ی گام بهینه

اکنون می‌خواهیم الگوریتمی را معرفی کنیم که به کمک آن اندازه‌ی گام در جهت کاهش خطا کنترل می‌شود. این الگوریتم بر پایه‌ی فرمول رانگه‌کوتایی است که به وسیله‌ی فلبرگ[1] پیشنهاد شد. فرمول رانگه کوتا برای مرتبه‌های M بالاتر از مرتبه‌ی چهار نیازمند بیش از M بار سنجش تابع است و این دلیل شهرت روش رانگه کوتای مرتبه‌ی چهارم است. به هر حال فلبرگ یک روش رانگه‌کوتای مرتبه پنجم با شش بار سنجش تابع را ابداع نمود. ما برای پیشروی در معادله‌ی دیفرانسیل از این روش استفاده می‌کنیم. ترکیب دیگری از شش تابع، یک فرمول مرتبه چهارم[2] را به دست می‌دهد. اختلاف بین تخمین

[1] Fehlberg
[2] The embedded fourth-order formula

این دو روش از مقدار $y(x+h)$ می‌تواند به عنوان برآوردی از خطا جهت تنظیم اندازه‌ی گام استفاده شود.

فرم کلی رابطه‌ی رانگه کوتای مرتبه‌ی پنجم به صورت زیر است

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$
$$k_2 = hf(x_n + a_2 h, y_n + b_{21}k_1)$$
$$\vdots$$
$$k_6 = hf(x_n + a_6 h, y_n + b_{61}k_1 + \cdots + b_{65}k_5)$$
$$y_{n+1} = y_n + c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3 + c_4k_4 + c_5k_5 + c_6k_6 + o(h^6) \qquad (۷-۴)$$

و فرمول رابطه‌ی مرتبه چهارم به شکل زیر است

$$y^*_{n+1} = y_n + c^*_1k_1 + c^*_2k_2 + c^*_3k_3 + c^*_4k_4 + c^*_5k_5 + c^*_6k_6 + o(h^5) \qquad (۸-۴)$$

که در آن ثابت های c_i, b_{ij}, a_i و c^*_i قبلاً محاسبه [۲۲] و در جدول (۴-۱) نشان داده شده‌اند.

جدول (۴-۱). ضرایب cash-karp [۲۱]

i	a_i	b_{ij}					c_i	c^*_i
1							$\frac{37}{378}$	$\frac{2825}{27648}$
2	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					0	0
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				$\frac{250}{621}$	$\frac{18575}{48384}$
4	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$-\frac{9}{10}$	$\frac{6}{5}$			$\frac{125}{594}$	$\frac{13525}{55296}$
5	1	$-\frac{11}{54}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{70}{27}$	$\frac{35}{27}$		0	$\frac{277}{14336}$
6	$\frac{7}{8}$	$\frac{1631}{55296}$	$\frac{175}{512}$	$\frac{575}{13824}$	$\frac{44275}{110592}$	$\frac{253}{4096}$	$\frac{512}{1771}$	$\frac{1}{4}$
j		1	2	3	4	5		

بنابراین برآورد خطا به صورت رابطه‌ی (۴-۹) به‌دست می‌آید

$$\Delta \equiv y_{n+1} - y_{n+1}^{*} = \sum_{i=1}^{6} (c_i - c_i^{*}) k_i \qquad (۹-۴)$$

با پیداکردن رابطه‌ای میان اندازه‌ی گام (h) و خطا (Δ) می‌توانیم اندازه‌ی گام را در جهت کاهش خطا تنظیم کنیم. خطا از مرتبه‌ی h^5 است، اگر ما خطای Δ_1 را در گام h_1 مرتکب شویم، آنگاه اندازه‌ی گام h_0 که خطای Δ_0 را تولید می‌کند به‌صورت

$$h_0 = h_1 \left| \frac{\Delta_0}{\Delta_1} \right|^{0.2} \qquad (۱۰-۴)$$

است که در آن Δ_0 دقت دلخواه ما می باشد. حال دو موقعیت می‌تواند وجود داشته باشد؛ اگر Δ_1 از Δ_0 بزرگتر باشد، اندازه‌ی گام باید با استفاده از معادله‌ی (۴-۱۰) کاهش یابد و گام شکست خورده‌ی فعلی تکرار شود و برعکس اگر Δ_1 کوچکتر از Δ_0 باشد معادله‌ی (۴-۱۰) برای افزایش اندازه‌ی گام در مرحله بعدی مورد استفاده قرار می‌گیرد و با این روش اندازه‌ی گام کنترل می‌شود. ما در حل معادله‌ی شرودینگر از زیر برنامه‌ای که به زبان برنامه نویسی فرترن[1] نوشته شده و این الگوریتم را به کار می‌بندد استفاده می‌کنیم. این زیر برنامه به همراه سایر زیر برنامه‌های استفاده شده در پیوست آمده‌اند.

۴-۴- مسائل دارای شرایط دو مرزی و ویژه مقداری

معادله‌ی شرودینگری که ما با آن سروکار داریم (۳-۴۷) یکی از مسائلی است که شرایط مرزی در آن باید در ابتدا و انتهای یک بازه برآورده شوند. همچنین در این معادله علاوه بر یافتن تابع موج هدف دیگری را نیز دنبال می‌کنیم که آن یافتن ویژه مقدار انرژی است. بنابراین با یک مسئله‌ی دو مقدار مرزی ویژه مقداری مواجه هستیم که روش حل آن نسبت به مسائل مقدار اولیه کمی پیچیده‌تر است. برای حل

[1] FORTRAN programming language

این نوع معادلات خطی روش‌های عددی متنوعی ارائه شده است که ما در اینجا به بررسی دو مورد از پرکاربردترین آنها یعنی روش پرتاب[1] و روش تطبیق[2] (پرتاب به نقطه‌ی انطباق) خواهیم پرداخت.

۴-۴-۱- روش پرتاب

روش پرتاب، رویکردی مناسب برای حل معادلات دیفرانسیلی (از جمله معادله‌ی شرودینگر) است که باید شرایط مرزی را در دو طرف یک بازه برآورده کنند، هر چند استفاده از آن محدود به موقعیت‌هایی می‌شود که در آنها مقادیر تابع جواب و مشتق آن به گونه‌ای در نقطه‌ی ابتدایی مشخص شده باشند. استفاده از این روش دقیقاً شبیه تلاش برای پرتاب یک توپ به قصد زدن آن به یک هدف است [۲۳]. تنها در صورتی توپ مسیر مناسب را طی و به هدف برخورد می‌کند که آن را با انرژی و جهت مناسب پرتاب کنیم. در مورد معادلات ویژه مقداری این بدان معنی است که ما در ابتدا یک فرض مناسب برای ویژه مقدار در نظر می‌گیریم و با آن شروع به حل معادله می‌کنیم. اگر جواب بدست آمده شرایط مرزی را برآورده کند، حدس ویژه مقدار صحیح بوده، در غیر اینصورت باید ویژه مقدار حدسی آنقدر تغییر کند تا نهایتاً شرایط مرزی توسط جواب معادله تأمین شود. بنابراین در مورد معادله‌ی شرودینگر، حل با تخصیص یک مقدار حدسی اولیه برای انرژی شروع می‌شود که البته این حدس باید از نظر فیزیکی منطقی باشد.

اکنون به سراغ توضیح الگوریتم روش پرتاب می رویم [۲۲]. همانطور که گفتیم با معادلات ویژه مقداری سروکار داریم. در چنین مسائلی طرف راست معادله‌ی (۴-۳) به یک پارامتر مانند λ وابسته است

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = f_i(x, y_1, \ldots, y_N, \lambda), \qquad i = 1, \ldots, N \qquad (۱۱-۴)$$

[1] Shooting method
[2] Mathching (shooting to fitting point) method

که در آن N بیانگر درجه‌ی معادله‌ی دیفرانسیل است. این معادلات دارای تعداد $N+1$ مقدار اولیه برای n_1 شرط مرزی در نقطه‌ی ابتدایی x_1 و $n_2 = N+1-n_1$ شرط مرزی در نقطه‌ی انتهایی x_2 هستند. مسأله تنها به ازای مقادیر خاصی از λ دارای جواب است. با معرفی یک متغیر وابسته‌ی جدید

$$y_{N+1} = \lambda \qquad (۱۲-۴)$$

و اضافه کردن یک معادله‌ی دیفرانسیل جدید به N معادله‌ی جفت شده‌ی قبلی

$$\frac{dy_{N+1}}{dx} = 0 \qquad (۱۳-۴)$$

می‌توان مسئله را به حالت استاندارد (یعنی تعداد $N+1$ متغیر y_i برای $N+1$ معادله) تبدیل کرد. همانطور که گفته شد در نقطه‌ی ابتدایی $N+1$ مقدار اولیه وجود دارد در حالیکه تعداد شرایط مرزی در این نقطه فقط n_1 شرط است. بنابراین تعداد $n_2 = N+1-n_1$ مقدار اولیه در این نقطه وجود دارند که باید آنها را به‌طور اختیاری مقداردهی کرد. اینها در واقع همان حدس‌های اولیه برای ویژه مقدار (و در برخی مسائل شرایط مرزی، چون در بسیاری از معادلات، شرایط مرزی شامل روابطی بین مؤلفه‌های y می باشند) هستند. حال فرض می‌کنیم این مقادیر اختیاری مؤلفه های یک آرایه مانند $\boldsymbol{V}$ هستند که دقیقاً دارای n_2 مؤلفه است. می‌توانیم در برنامه‌ی کامپیوتری خود از زیر روالی[1] استفاده کنیم که مقادیر اولیه y در x_1 را با با توجه به شرایط مرزی و n_2 مؤلفه‌ی اختیاری V به برنامه معرفی کند. تمام این گفته‌ها را می‌توان در رابطه‌ی زیر خلاصه کرد

$$y_i(x_1) = y_i(x_1, V_1, \ldots, V_{n_2}) \qquad i = 1, 2, \ldots, N+1 \qquad (۱۴-۴)$$

با دادن یک مقدار مشخص V ادامه‌ی کار تبدیل به حل یک مسأله‌ی مقدار اولیه می‌شود که در آن $y(x_1)$ با پیشروی عددی در معادله‌ی دیفرانسیل از x_1 تا x_2 تبدیل به یک مقدار $y(x_2)$ می شود. این کار به

[1] Subroutine

وسیله‌ی روش رانگه کوتا که در بخش قبل توضیح داده شد انجام می گیرد. حال این سؤال به وجود می آید که آیا مقدار $y(x_2)$ ی حاصل شده با شرایط مرزی در نقطه ی x_2 همخوانی دارد؟ برای پاسخ به این سؤال یک آرایه جدید $\boldsymbol{F}$ که شامل n_2 مؤلفه است و این مؤلفه ها میزان فاصله‌ی ما از برآورده کردن n_2 شرط مرزی در x_2 را تعیین می‌کنند، معرفی می‌کنیم. به عبارت دیگر

$$F_k = B_k(x_2, y_1, \ldots, y_N) = B_k(x_2, \mathbf{y}) \qquad k = 1, \ldots, n_2 \tag{۱۵-۴}$$

B_kها شرایط مرزی در $x_۲$ هستند. باید رابطه‌ی بین مؤلفه‌های F و مؤلفه‌های y در $x_۲$ طوری به برنامه داده شود که فقط و فقط هنگامی شرایط مرزی در $x_۲$ ارضا شوند که مؤلفه‌های F صفر گردند. بدین منظور زیرروالی در برنامه تعریف می‌کنیم که مقادیر $y(x_2)$ را با n_2 مؤلفه‌ی F مقایسه می‌کند. اما اکنون به الگوریتمی نیاز داریم که ویژه مقداری را در معادله که باعث صفر شدن مؤلفه‌های F می‌گردد برای ما بیابد و آن روش نیوتون رافسن[1] است که از پرکاربردترین روش‌های عددی ریشه‌یابی توابع به‌شمار می‌یابد. در این روش هریک از توابع F_k را با استفاده از بسط تیلور حول $\boldsymbol{V}$ بسط می‌دهیم

$$F(\boldsymbol{V} + \delta\boldsymbol{V}) = F_i(\boldsymbol{V}) + \sum_{i=1}^{n_2} \frac{\partial F_i}{\partial V_j} \delta V_j + o(\delta \boldsymbol{V}^2) \tag{۱۶-۴}$$

در رابطه‌ی (۴-۱۶) ماتریس ژاکوبی با رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود

$$J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial V_j} \tag{۱۷-۴}$$

محاسبه‌ی هریک از مشتقات جزئی در این رابطه نیازمند یک انتگرال‌گیری عددی جداگانه در N معادله دیفرانسیل و استفاده از تقریب

$$\frac{\partial F_i}{\partial V_j} \approx \frac{F_i(V_1, \ldots, V_j + \Delta V_j, \ldots) - F_i(V_1, \ldots, V_j, \ldots)}{\Delta V_j} \tag{۱۸-۴}$$

[1] Newton-Raphson

است که توسط زیرروال مناسب انجام می‌گیرد. می‌توانیم رابطه‌ی (۴-۱۶) را با نمایش ماتریسی

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{V}+\delta\boldsymbol{V})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{V})+\boldsymbol{J}.\delta\boldsymbol{V}+o(\delta\boldsymbol{V}^2) \qquad (۱۹-۴)$$

بنویسیم. به دنبال مقادیری از V هستیم که مؤلفه‌های متناظر در F را صفر کند. بنابراین با قرار دادن

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{V}+\delta\boldsymbol{V})=0 \qquad (۲۰-۴)$$

و صرف نظر کردن از جملات از مرتبه‌ی δV^2 و بالاتر، به دستگاه معادلات خطی

$$\boldsymbol{J}.\delta\boldsymbol{V}=-\boldsymbol{F} \qquad (۲۱-۴)$$

می‌رسیم. این دستگاه را می‌توان با استفاده از زیرروالی که به روش تجزیه‌ی LU [1] عمل می‌کند حل کرده و مقدار $\delta\boldsymbol{V}$ که تصحیح لازم برای حدس اولیه است را به‌دست آورد. سپس این تصحیح با استفاده از رابطه‌ی

$$\boldsymbol{V}_{new}=\boldsymbol{V}_{old}+\delta\boldsymbol{V} \qquad (۲۲-۴)$$

به مقدار قبلی V افزوده شده و با چند بار تکرار این روند سرانجام مقدار دقیق V که باعث صفر شدن F می‌گردد برای ما مشخص می‌شود.

۴-۴-۲- روش تطبیق (پرتاب به نقطه‌ی انطباق)

روش پرتاب که در بخش قبل توضیح داده شد بر این فرض استوار است که پرتاب فرضی توان پیمودن کل بازه‌ی محاسبه و همگرا شدن به سوی جواب صحیح را داراست. در برخی از مسائل در نظر گرفتن شرایط اولیه‌ی نادرست باعث می شود که یک جواب اولیه نتواند بدون خطا و تولید نتایج فاجعه بار

[1] LU decomposition

از x_1 به x_2 برسد. برای مثال هنگامی که هر دو نقطه‌ی ابتدایی و انتهایی نقاط تکین معادلات دیفرانسیل باشند، معمولاً انتگرال‌گیری عددی به سمت آنها عملی نیست. یا اینکه متغیر زیر رادیکال منفی شود که موجب ایجاد خطا در کد محاسباتی می‌گردد.

راه حل مشکلات ذکر شده استفاده از روش تطبیق است. در این روش به جای انتگرال‌گیری از نقطه‌ی x_1 تا x_2، نخست پیشروی را از نقطه‌ی x_1 تا نقطه ی x_f که بین نقاط x_1 و x_2 قرار دارد (و معمولاً در مسائل فیزیکی نقطه‌ی کمینه‌ی پتانسیل است) و پس از آن در جهت عکس از نقطه‌ی x_2 تا x_f انجام می‌دهیم. اگر تعداد شرایط مرزی در x_1 برابر n_1 و تعداد شرایط مرزی در x_2 برابر n_2 باشد، آنگاه تعداد مقادیر اولیه‌ی اختیاری (یعنی مقادیر حدسی) در x_1 برابر n_2 و تعداد این پارامترها در x_2 برابر n_1 است. بنابراین یک آرایه‌ی n_2 مؤلفه ای $\boldsymbol{V}_{(1)}$ از پارامترهای اولیه در x_1 تعریف می‌کنیم و داریم

$$y_i(x_1) = y_i(x_1; V_{(1)1}, \ldots, V_{(1)n_2}) \qquad i = 1, \ldots, N+1 \tag{۲۳-۴}$$

همچنین آرایه‌ی n_1 مؤلفه ای $\boldsymbol{V}_{(2)}$ از پارامترهای اولیه در x_2 را نیز تعریف کرده و داریم

$$y_i(x_2) = y_i(x_2; V_{(2)1}, \ldots, V_{(2)n_1}) \qquad i = 1, \ldots, N+1 \tag{۲۴-۴}$$

بنابراین ما مجموعاً تعداد N پارامتر اولیه‌ی اختیاری در ترکیب $\boldsymbol{V}_{(1)}$ و $\boldsymbol{V}_{(2)}$ داریم. همچنین N شرط باید روی مؤلفه‌های $\mathbf{y}$ در نقطه‌ی تطبیق x_f برقرار باشد (مثلاً برای یک معادله‌ی مرتبه دوم باید جواب معادله و مشتق اول آن در این نقطه پیوسته باشند) یعنی باید داشته باشیم

$$y_i(x_f; \boldsymbol{V}_{(1)}) = y_i(x_f; \boldsymbol{V}_{(2)}) \qquad i = 1, \ldots, N \tag{۲۵-۴}$$

مانند روش پرتاب آرایه‌ی N مؤلفه‌ای $\boldsymbol{F}$ که میزان فاصله‌ی ما از برآورده کردن شرایط پیوستگی در x_f را تعیین می‌کند، تعریف می‌کنیم. در واقع باید

$$F_i\left[\mathbf{y}(x_f;\boldsymbol{V}_{(1)})\right]=F_i\left[\mathbf{y}(x_f;\boldsymbol{V}_{(2)})\right],\qquad i=1,\ldots,N \tag{۲۶-۴}$$

در این مرحله به طریق مشابه با روش پرتاب، الگوریتم نیوتون رافسن برای یافتن ویژه مقداری که اختلاف توابع سمت راست و چپ رابطه‌ی (۴-۲۶) را صفر می‌کند به‌کار گرفته می‌شود.

۴-۵- نتایج حاصل از حل چند مسأله‌ی کوانتومی با استفاده از روش عددی پرتاب

در انتهای این فصل برای بررسی قدرت روش عددی پرتاب در حل معادله‌ی شرودینگر، نتایج حاصل از حل دو مسأله ی بنیادی فیزیک اتمی و هسته ای یعنی اتم هیدروژن و دوترون و همچنین دو مسأله‌ی کوانتومی دیگر را که به این روش انجام داده‌ایم، ارائه خواهیم کرد. جواب‌های حاصل از روش پرتاب با جواب‌های تحلیلی دقیق و یا تقریبی مقایسه شده است.

۴-۵-۱- اتم هیدروژن

معادله‌ی شرودینگر شعاعی برای اتم هیدروژن به همان شکل معادله‌ی (۲-۲) است، با این تفاوت که در آن μ جرم کاهش یافته‌ی اتم هیدروژن ${}^{1}_{1}\mathrm{H}$ عبارت است از

$$\mu=\frac{mM}{m+M}=0.510\quad MeV/c^2 \tag{۲۷-۴}$$

که در آن m جرم الکترون و M جرم هسته است. همچنین $V(r)$ پتانسیل کولنی بین هسته و الکترون است

$$V(r)=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=-\frac{14.39976}{r}\qquad eV \tag{۲۸-۴}$$

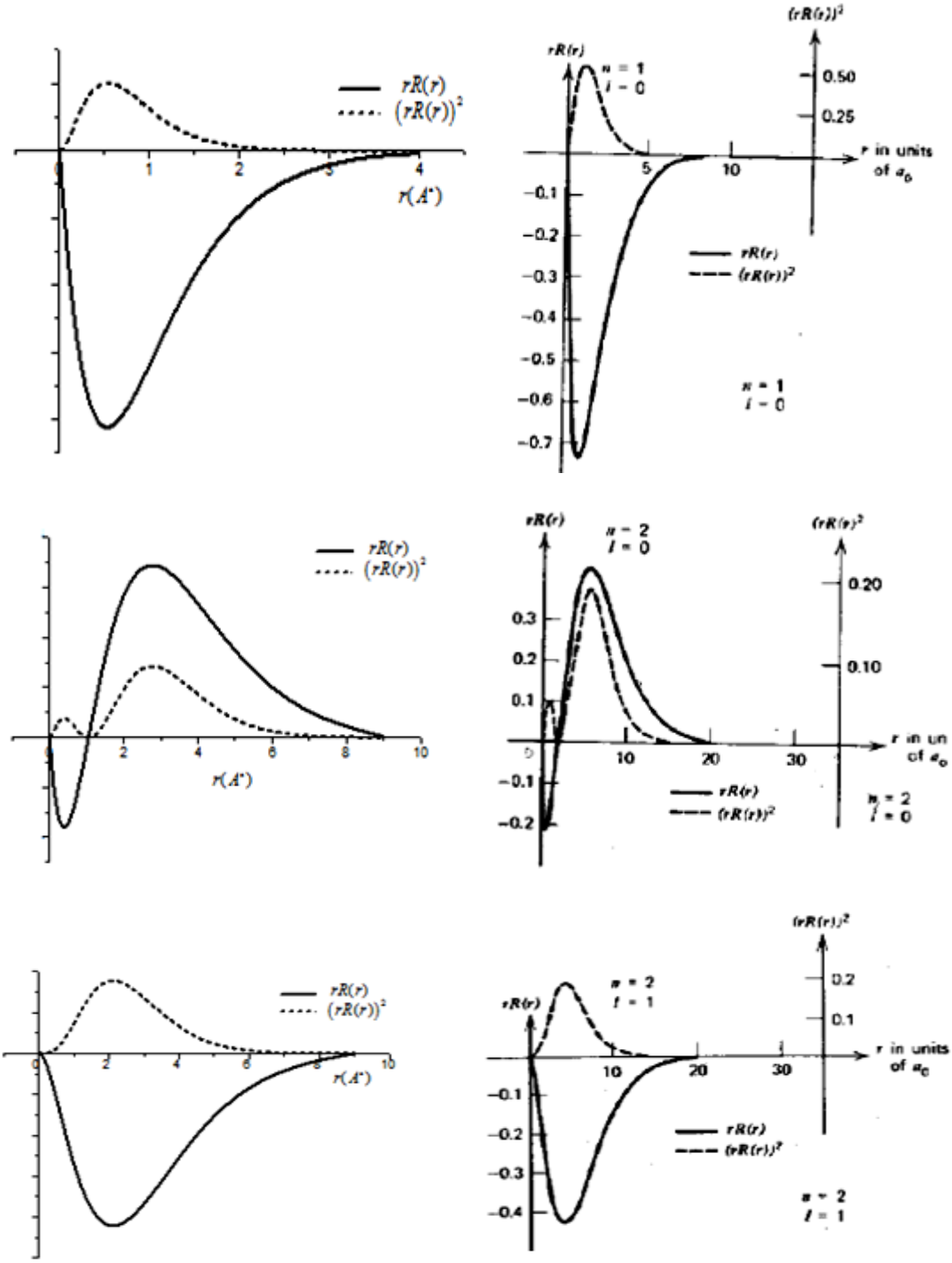
در ادامه نتایج ویژه مقادیر انرژی و توابع موج شعاعی حاصل از روش تحلیلی [۵] و روشی که ما استفاده کرده ایم (روش پرتاب) برای تعدادی از حالات انرژی اتم هیدروژن آمده است.

جدول (۴-۲) ویژه مقادیر انرژی تحلیلی و عددی برای برخی حالات اتم هیدروژن

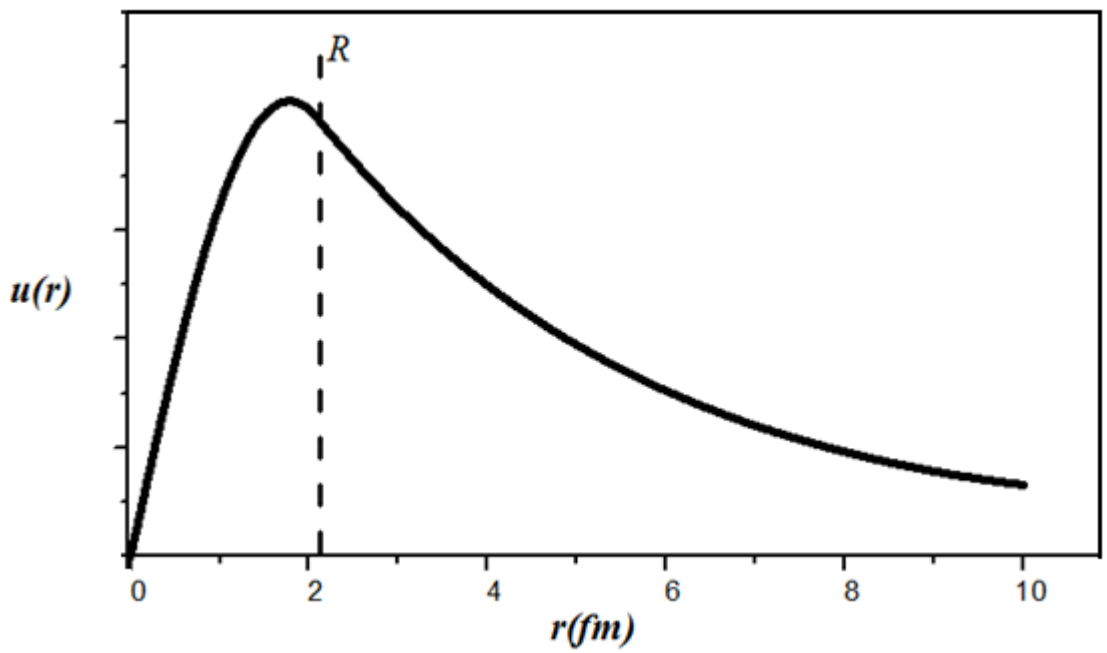
حالت انرژی (n,l)	انرژی (eV) (روش پرتاب)	انرژی (eV) (حل تحلیلی)
(1,0)	-13.5910	-13.6058
(2,0)	-3.3962	-3.4014
(2,1)	-3.3991	-3.4014
(3,0)	-1.5107	-1.5117
(3,1)	-1.5112	-1.5117
(3,2)	-1.5113	-1.5117
(4,0)	-0.8500	-0.8503
⋮	⋮	⋮

۴-۵-۲- دوترون

برای دوترون در پتانسیل چاه مربعی نتایج تحلیلی در بخش (۲-۲) ارائه گردید. ما این مسأله را به روش پرتاب نیز حل کردیم که نتیجه برای انرژی بستگی دوترون در تقریب پتانسیل چاه مربعی مقدار $2.71MeV$ به‌دست آمد (علت اختلاف جزیی با مقدار 2.22 تقریب‌هایی است که هنگام حل تحلیلی معادله اعمال شده است) و تابع موج حاصل نیز در شکل (۴-۲) رسم شده که با شکل (۲-۱) مطابقت کامل دارد.



شکل (۴-۱). توابع موج شعاعی برای حالات $(1,0)$ (ردیف اول) ، $(2,0)$ (ردیف دوم) و $(2,1)$ (ردیف سوم) اتم هیدرورژن. شکلهای سمت راست نتایج تحلیلی [۲۴] و شکل های سمت چپ نتایج حاصل از روش پرتاب را نشان می دهند. در شکل های سمت راست، فاصله ی شعاعی برحسب $a_0 = 0.529A^{\circ}$ است.



شکل (۴-۲). تابع موج دوترون برای پتانسیل چاه مربعی با $R = 2.1\,fm$

۴-۵-۳- حالات مقید معادله‌ی شرودینگر دوجسمی در حضور پتانسیل منینگ- روزن[1]

پتانسیل منینگ-روزن معمولاً برای توصیف ارتعاشات مولکولی دو اتمی استفاده می شود [۲۵]. این پتانسیل همچنین در بسیاری از شاخه های فیزیک برای مطالعه ی حالات مقید و خواص پراکندگی مورد استفاده قرار می گیرد [۲۶]. فرم عمومی این پتانسیل با رابطه ی زیر داده می شود

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu b^2}\left[\frac{\alpha(\alpha-1)e^{-2r/b}}{(1-e^{-r/b})^2} - \frac{Ae^{-r/b}}{1-e^{-r/b}}\right] \qquad (۲۹-۴)$$

که در آن α و A دو پارامتر بدون بعد هستند، b مربوط به برد پتانسیل است و بعد طول دارد [۲۷]. حل تحلیلی دقیق این پتانسیل برای حالات تکانه زاویه‌ای غیر صفر وجود ندارد اما در سال‌های اخیر فیزیک‌دانان برخی حل‌های تقریبی برای آن ارائه کرده‌اند که در اینجا جواب‌های حاصل از روش پرتاب را

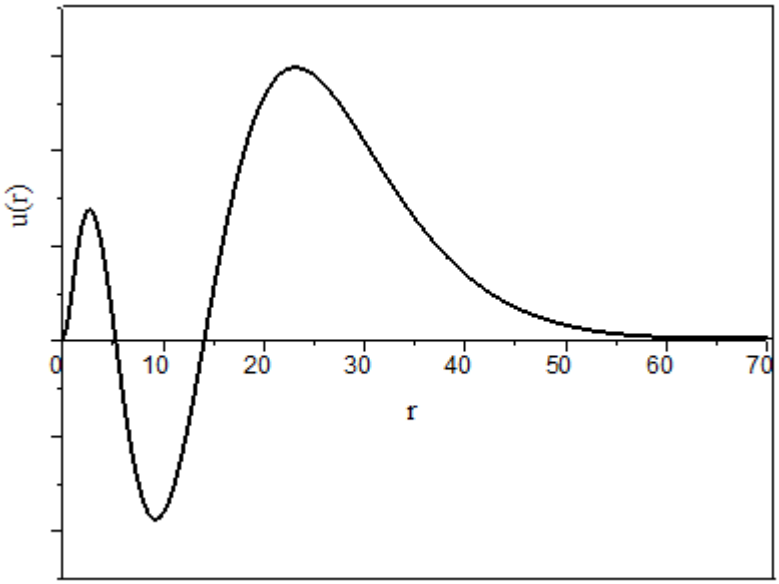
[1] Manning–Rosen potential

با آنها و روش عددی ارائه شده توسط لوچا و همکارش [۲۸] مقایسه کرده و در جدول (۴-۳) آورده‌ایم (معادله‌ی مورد استفاده همان معادله‌ی (۲-۳) است).

جدول (۴-۳). برخی ویژه مقادیر انرژی $(-E_{nl})$ پتانسیل منینگ- روزن حاصل از روش های مختلف (به ازای $b=40$, $\alpha=0.75$, $A=2b$ و $\hbar=\mu=1$)

حالت انرژی	حل تحلیلی تقریبی [۲۷]	حل تحلیلی تقریبی [۲۹]	حل عددی [۲۸]	حل عددی (روش پرتاب)
$2p$	0.120527	0.120579	0.120527	0.120527
$3p$	0.045877	0.045929	0.045878	0.045877
$3d$	0.044773	0.044929	0.044774	0.044774
$4p$	0.020808	0.020860	0.020809	0.020810
$4d$	0.020299	0.020455	0.020301	0.020302
$4f$	0.019976	0.020288	0.019979	0.019979

نمودار یکی از ویژه توابع شعاعی متناظر نیز در شکل (۴-۳) ارائه شده است.



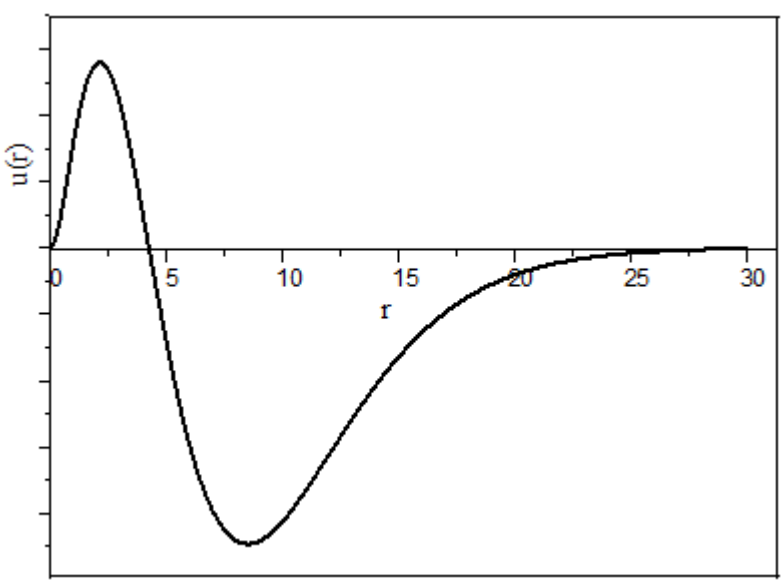
شکل (۴-۳). تابع موج شعاعی حالت $4p$ برای پتانسیل منینگ- روزن

۴-۵-۴- حالات مقید معادله‌ی شرودینگر دوجسمی در حضور پتانسیل یوکاوا[1]

معادله‌ی شرودینگر (۲-۳) برای پتانسیل یوکاوا نیز همانند پتانسیل منینگ-روزن دارای حل تحلیلی دقیق برای تمام حالات l نیست. اما با اعمال تقریب‌هایی در شکل پتانسیل می توان به جواب‌های تحلیلی دست یافت. رابطه‌ی عمومی پتانسیل یوکاوا (راجع به این پتانسیل در فصل بعد بیشتر خواهیم گفت) به شکل

$$V(r) = -V_0 \frac{\exp(-kr)}{r} \qquad (۳۰-۴)$$

است که در آن V_0 و k ضرایب ثابتی هستند. تقریبی که گفتیم فقط برای مقادیر $kr \ll 1$ معتبر است. در جدول (۴-۴) نتایج برخی ویژه مقادیر در طیف انرژی که به وسیله‌ی روش‌های مختلف محاسبه شده‌اند، آمده است. همچنین در شکل (۴-۴) نمودار یکی از ویژه توابع شعاعی متناظر را رسم کرده ایم.



شکل (۴-۴). تابع موج شعاعی حالت $3p$ برای پتانسیل یوکاوا به ازای $V_0 = \sqrt{2}$ و $k = 0.002V_0$

[1] Yukawa potential

جدول (۴-۴). برخی ویژه مقادیر انرژی $(-E_{nl})$ (برحسب (fm^{-1})) پتانسیل یوکاوا به ازای $V_0=\sqrt{2}$ و $\hbar=m=1$

حالت انرژی	$k\ (fm^{-1})$	حل تحلیلی تقریبی به روش N-U، [۳۰]	حل تحلیلی به روش ابرتقارن [۳۱]	حل عددی ما (روش پرتاب)
$1s$	0.00282 0.00707	0.99600 0.99002	0.99601 0.99004	0.99600 0.99003
$2s$	0.00282 0.00707	0.24601 0.24010	0.26402 0.24014	0.24602 0.24014
$2p$	0.00282 0.00707	0.24601 0.24010	0.24602 0.24012	0.24602 0.24012
$3p$	0.00282 0.00707	0.10714 0.10133	0.10716 0.10142	0.10716 0.10141
$3d$	0.00282 0.00707	0.10714 0.10133	0.10715 0.10140	0.10715 0.10136

همانطور که مشاهده می‌شود روش عددی پرتاب از قدرت و دقت بالایی در حل معادله شرودینگر و محاسبه‌ی ویژه مقادیر انرژی و ویژه توابع متناظر آنها برخوردار می باشد.

فصل پنجم

نتایج

۵-۱- مقدمه

در این فصل سعی داریم معادله‌ی شرودینگر فوق شعاعی (۳-۴۱) را به منظور بررسی حالات انرژی و ویژه توابع شعاعی تریتون در حضور پتانسیل‌های مناسب به روش عددی بیان شده در فصل چهارم حل کرده و به بحث درباره نتایج حاصل بپردازیم.

۵-۲- تریتون $(^{3}_{1}\mathrm{H})$

هسته‌ی اتم تریتیوم (ایزوتوپ اتم هیدروژن با عدد جرمی ۳) ، تریتون نامیده می شود. بررسی حالات مقید این هسته روش مطلوبی برای مطالعه و شناخت برهم‌کنش هسته‌ای به‌شمار می‌آید. بررسی‌ها نشان می‌دهد که از حدود 8.5 MeV انرژی بستگی تریتون در حدود 7 MeV مربوط به برهم‌کنش های دوجسمی و 1.5 MeV مربوط به وجود برهم‌کنش سه جسمی در این هسته است. اسپین-پاریته حالت پایه‌ی تریتون $1/2^{+}$ است و شعاع باری آن با استفاده از پراکندگی الکترون در حدود $1.75\pm0.03\,fm$ برآورد شده است [۳۲]. در حدود 99.985 درصد از هیدروژن موجود در طبیعت به‌صورت $^{1}_{1}\mathrm{H}$ و بقیه به‌صورت $^{2}_{1}\mathrm{H}$ وجود دارد. تریتون فقط در واکنش‌های هسته‌ای تولید می‌شود.

۵-۳- یکاها و ابعاد مناسب

از آنجا که در فیزیک هسته‌ای معمولاً انرژی‌ها از مرتبه‌ی مگا الکترون ولت (MeV) و فواصل شعاعی از مرتبه‌ی فرمی (fm) هستند، ما نیز برای آنکه انرژی و تابع موج را بر حسب این یکاها به‌دست آوریم، باید در معادله از ثابت‌های مناسب استفاده کنیم. با چشم‌پوشی از اختلاف جرم ناچیز میان پروتون و نوترون جرم میانگین آنها را به عنوان جرم m در معادله وارد می‌کنیم. یعنی:

$$m = 938.926 \quad MeV/c^2 \tag{۱-۵}$$

و از آنجا که $\hbar c = 197.329 \;\; MeV.fm$ [۱]، داریم

$$\frac{m}{\hbar^2} = \frac{938.926}{197.329^2} \quad MeV/(MeV.fm)^2 \quad = 0.0241 \quad MeV^{-1}.fm^{-2} \tag{۲-۵}$$

با وارد کردن این مقدار در معادله ی شرودینگر و حل آن، انرژی ها بر حسب MeV و توابع موج بر حسب فاصله ی شعاعی برحسب fm به دست می آیند.

۵-۴- روش پرتاب برای معادله‌ی شرودینگر

معادله‌ی شرودینگر یک معادله‌ی دیفرانسیل ویژه مقداری خطی مرتبه دوم است که باید شرایط مرزی را در دو نقطه‌ی ابتدایی و انتهایی یک بازه برآورده نماید. بنابراین در معادله‌ی (۴-۱۱) مقدار $N = 2$ است و

$$u_1 = u(x), \quad u_2 = \frac{du(x)}{dx}, \quad u_3 = Energy(E) \tag{۳-۵}$$

(در اینجا به‌جای $y(x)$ از نماد تابع موج شعاعی $u(x)$ استفاده می‌کنیم). همچنین مطابق با آنچه در بخش (۴-۴-۱) گفته شد، تعداد شرایط مرزی در نقطه‌ی ابتدایی (x_1) برابر $n_1 = 2$ (که یکی از آنها به مقدار اولیه‌ی تابع موج و دیگری به مشتق اول آن اختصاص دارد) ، در نقطه‌ی انتهایی x_2 برابر $n_2 = 1$ (که به مقدار تابع موج در این نقطه اختصاص دارد) و همچنین تعداد مقادیر اولیه‌ی اختیاری $n_2 = 1$ است که همان حدس اولیه برای ویژه مقدار انرژی است. بنابراین آرایه‌های n_2 مؤلفه ای V و F نیز هرکدام دارای تنها یک مؤلفه به شکل زیر هستند

V_1 : حدس اولیه برای ویژه مقدار انرژی

F_1 : مقدار $u(x_2)$ی حاصل از پیشروی (انتگرال‌گیری عددی) در معادله به ازای مقدار حدسی انرژی

ماتریس ژاکوبین نیز تنها دارای یک عنصر به شکل

$$J_{11} = \frac{\partial u(x_2)}{\partial E_{guess}} \qquad (۴-۵)$$

است که در آن مشتق‌گیری به کمک رابطه‌ی (۴-۱۸) انجام می‌گیرد. در هر مرحله ویژه مقدار انرژی حدسی طبق رابطه‌ی (۴-۲۲) تصحیح می‌شود تا نهایتاً ویژه مقدار انرژی‌ای که به ازای آن، تابع موج شرط مرزی را در x_2 برآورده می‌کند، پیدا شود. در اینجا نقاط x_1 و x_2 به ترتیب در $0.0001fm$ (به منظور کاهش خطاهای محاسباتی از قراردادن x_1 دقیقاً در نقطه‌ی صفر اجتناب می‌کنیم) و بی‌نهایت واقع هستند $(x_1 = 0.0001fm, x_2 \to \infty)$. البته بی‌نهایت جایی است که تابع موج فوق شعاعی در آنجا به سمت صفر میل می‌کند و بنابراین برای هر حالت انرژی متفاوت خواهد بود اما مسلم است که مقدار انرژی در یک حالت مقید نباید به مکان دقیق بی‌نهایت وابسته باشد. شرایط مرزی را به صورت زیر درنظر می‌گیریم

$$u(x_1) = cte \ \text{(مثلاً یک)} \qquad \left.\frac{du(x)}{dx}\right|_{x=x_1} = 1000, \qquad u(x_2) \to 0 \qquad (۵-۵)$$

علت انتخاب مقدار بزرگ برای مشتق تابع موج در نقطه‌ی ابتدایی، خیز شدید تابع موج در حوالی این نقطه است.

۵-۵- بررسی حالات انرژی تریتون در حضور پتانسیل یوکاوا

ذره‌ی میدان در نیروی هسته‌ای یعنی مزون π $(M_\pi c^2 \simeq 140MeV)$ برخلاف ذره‌های میدان در نیروهای الکترومغناطیسی و گرانشی دارای جرم محدودی است. به عبارت دیگر برد این نیرو خیلی کوتاه است. برای روشن شدن مطلب می‌بینیم که پیدایش مزونی که از یک نوکلئون به نوکلئون دیگر برای

انتقال نیروی هسته‌ای فرستاده می‌شود، اصل پایستگی انرژی را به میزان ΔE که در حدود جرم مزون در حال سکون، $M_\pi c^2$، است نقض می‌کند

$$\Delta E \simeq M_\pi c^2 \qquad (۶-۵)$$

نقض پایستگی انرژی نمی‌تواند بیش از زمان Δt دوام بیاورد چون از اصل عدم قطعیت داریم

$$\Delta t = \frac{\hbar}{M_\pi c^2} \qquad (۷-۵)$$

حتی اگر فرض کنیم که مزون با سرعت نور حرکت کند، بیشترین فاصله‌ای را که می‌تواند در این مدت طی کند برابر خواهد بود با

$$x = c\Delta t = \frac{\hbar}{M_\pi c^2} = \frac{1}{k} \qquad (۸-۵)$$

این برد نیروی هسته‌ای است که مقدار عددی آن برابر $1.4\ fm$ می‌شود. این محاسبه برای میدان الکترومغناطیسی و گرانشی برد بی‌نهایت را به‌دست می‌دهد زیرا جرم ذره‌ی میدان در آنها صفر است.

یک مدل مقدماتی از نظریه مزونی، انرژی پتانسیل برهم کنش نوکلئون-نوکلئون را به شکل

$$V(x) = -V_0 \frac{\exp(-kx)}{x} \qquad (۹-۵)$$

بیان می‌کند. این پتانسیل در سال ۱۹۳۵ توسط هیدکی یوکاوا [۳۳] به منظور نمایش برهم‌کنش نوکلئون- نوکلئون ارائه گردید و پتانسیل یوکاوا نامیده می شود.

در رابطه‌ی (۵-۹) V_0 یک ثابت است و k که به جرم ذره میدان بستگی دارد و تعیین کننده برد نیرو است با رابطه‌ی (۵-۸) داده می شود. با توجه به جرم سکون پایون ($M_\pi c^2 = 140\ MeV$) مقدار k برای نیروی هسته ای برابر $0.7\ fm^{-1}$ به‌دست می‌آید.

در سال‌های گذشته تلاش‌های فراوانی برای حل معادله‌ی شرودینگر در حضور پتانسیل یوکاوا انجام گرفته است. برخی از روش های به‌کار گرفته شده عبارتند از : روش تکرار مجانبی (AIM) [1] [۳۴]، روش خطی سازی گوسی (QLM) [2] [۳۵] و روش حل اختلالی معادله ی ریکاتی [۳۱ و ۳۶]. اما همانطورکه گفتیم این معادله برای پتانسیل یوکاوا دارای حل تحلیلی دقیق نیست و تمام این روش‌ها تقریبی هستند.

در حد $k \ll 1$، پتانسیل یوکاوا به پتانسیل کیلینگبک[3] با نمایش زیر تبدیل می‌شود

$$V(x) = ax^2 + bx - c/x \qquad (۱۰-۵)$$

که در آن b, a و c ثابت‌های پتانسیل هستند که از بسط پتانسیل یوکاوا حاصل می‌شوند [۳۷ و ۳۸]. پتانسیل یوکاوا همچنین می‌تواند به پتانسیل کرنل[4] با رابطه‌ی زیر تبدیل شود

$$V(x) = bx - c/x \qquad (۱۱-۵)$$

این دو پتانسیل معمولاً در مطالعه‌ی مزون‌ها و باریون‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرند [۳۹ و ۴۰]. همچنین به ازای $k = 0$ پتانسیل یوکاوا به پتانسیل کولنی تبدیل می‌شود.

با قرار دادن پتانسیل یوکاوا در معادله‌ی (۳-۴۱) به فرم معادله‌ی فوق شعاعی سه جسمی شرودینگر در حضور این پتانسیل برهم‌کنشی می‌رسیم

$$-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{(\gamma+2)^2 - \frac{1}{4}}{x^2}\right)u_{[\gamma]}(x) - V_0\frac{\exp(-kx)}{x}u_{[\gamma]}(x) = Eu_{[\gamma]}(x) \qquad (۱۲-۵)$$

---

[1] Alternative Iteration Method
[2] Quasi-Linearization Method
[3] Killingbeck potential
[4] Cornell potential

۵-۵-۱- انرژی بستگی و شعاع باری تریتون

ریشه‌ی میانگین مربعی شعاع باری[1] تریتون را می‌توان با استفاده از تعریف ابرشعاع محاسبه نمود. با توجه به رابطه‌ی (۳-۴) می‌توانیم ریشه‌ی میانگین مربعی شعاع را به ریشه‌ی میانگین مربعی مجموع فواصل مرکز جرم از هر کدام از ذرات سیستم تعریف کنیم.

$$\left\langle R_{rms}^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}} = \left\langle \frac{1}{A}\sum_{i=1}^{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R})^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}} \qquad (۱۳-۵)$$

و از رابطه‌ی (۳-۴) داریم

$$x^2 = 2\sum_{i=1}^{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R})^2 \qquad (۱۴-۵)$$

پس از روابط (۵-۱۳) و (۵-۱۴) برای $A=3$ به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم

$$R_{rms} = \frac{\left\langle x^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{6}} \qquad (۱۵-۵)$$

در (۵-۱۵) مقدار میانگین مربعی ابرشعاع $\left\langle x^2 \right\rangle$ از رابطه‌ی زیر به‌دست می آید

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{\int \psi^*(x)x^2\psi(x)d^3x}{\int \psi^*(x)\psi(x)d^3x} = \frac{\int_0^\infty x^{-5}u^*(x)x^2u(x)x^5dx\int Y_\gamma^*(\Omega)Y(\Omega)d\Omega}{\int_0^\infty x^{-5}u^*(x)u(x)x^5dx\int Y_\gamma^*(\Omega)Y(\Omega)d\Omega} = \frac{\int_0^\infty x^2\left|u(x)\right|^2dx}{\int_0^\infty \left|u(x)\right|^2dx} \qquad (۱۶-۵)$$

نتایج مربوط به حل عددی معادله بالا برای انرژی بستگی (قدر مطلق انرژی حالت پایه) و شعاع باری تریتون به ازای چند مقدار مختلف V_0 در جدول (۵-۱) ارائه شده است. هرچند تابع موج پایه‌ی تریتون شامل حالتی با مقدار $\gamma=2$ (موج d) نیز می باشد اما از آنجا که تریتون در حالت پایه حدود ۹۵ درصد اوقات را در حالت $\gamma=0$ (موج s) قرار دارد، با تقریب خوبی می‌توان انرژی بستگی تریتون را با لحاظ

[1] Rms charge radius

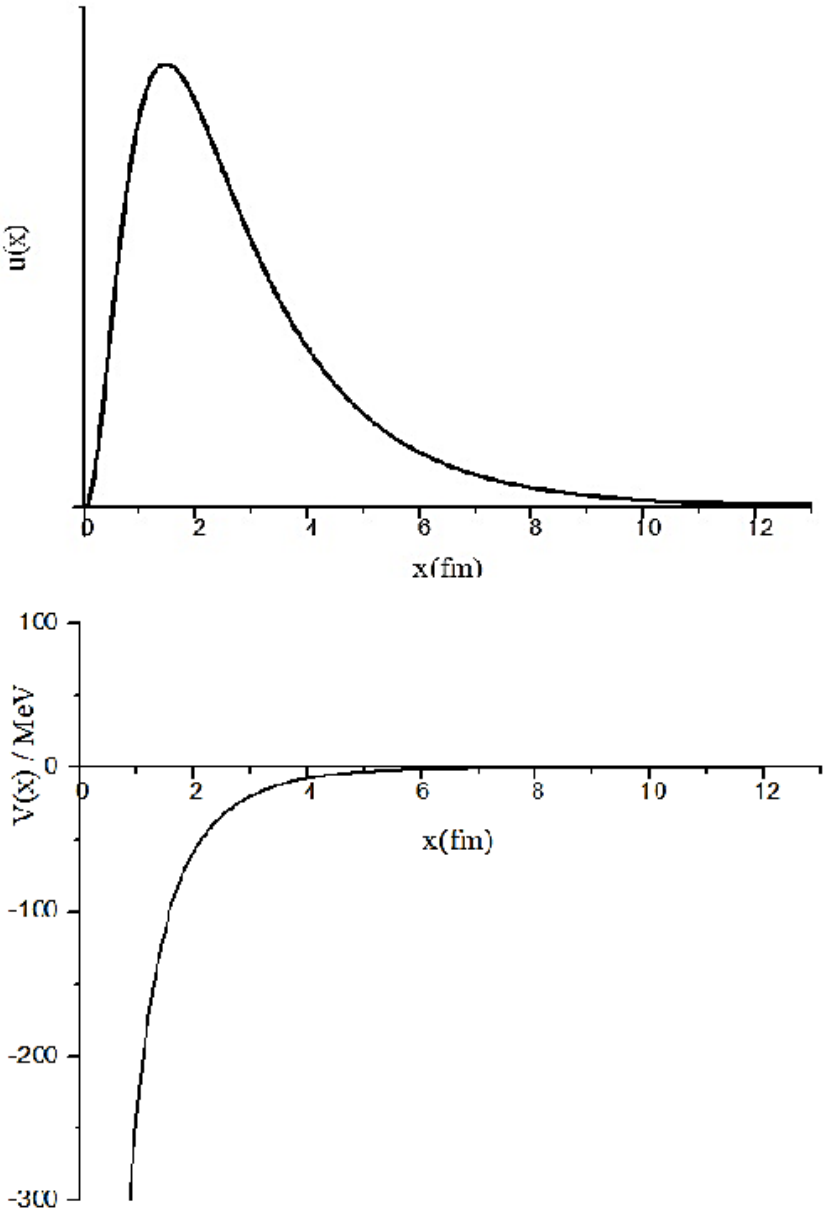
کردن این مقدار برای γ در معادله‌ی (۵-۹) محاسبه نمود. البته سهم حالت‌های مختلف بسته به نوع پتانسیل اندکی متفاوت است اما در اکثر محاسبات تئوری و تجربی نرخ مجانبی تریتون (η_t) که نسبت سهم حالت d به حالت s در تابع موج شعاعی حالت پایه می‌باشد در حدود 0.043 ذکر شده است [۴۱]. در جدول (۵-۱) جرم هسته‌ای که با استفاده از معادله‌ی (۵-۱) به انرژی بستگی مربوط می‌شود نیز محاسبه شده است.

جدول ۵-۱. انرژی بستگی (قدر مطلق انرژی حالت پایه) و جرم هسته ای تریتون
به ازای $k = 0.7\ fm^{-1}$ و مقادیر مختلف V_0

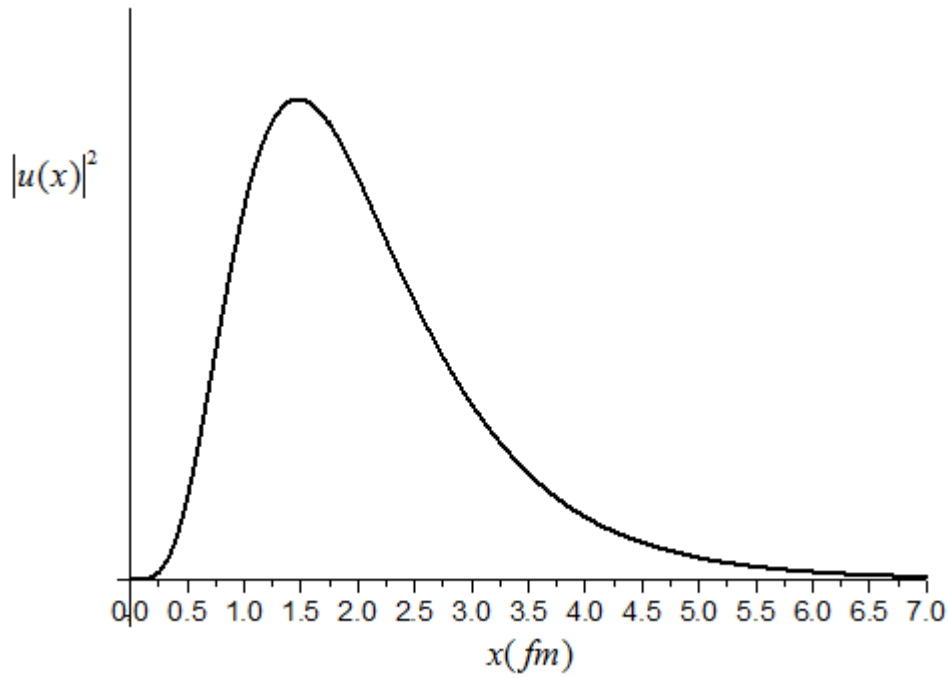
شعاع باری (fm)	جرم هسته (u)	انرژی بستگی (MeV)	V_0(MeV)
1.023	3.01786	6.2804	465.0
1.008	3.01738	6.7228	467.0
0.987	3.01666	7.4021	470.0
0.980	3.01641	7.6327	471.0
0.974	3.01616	7.8654	472.0
0.967	3.01591	8.1001	473.0
0.961	3.01565	8.3369	474.0
0.958	3.01550	8.4800	474.6
0.955	3.01540	8.5758	475.0
0.949	3.01521	8.8167	476.0
0.943	3.01495	9.0596	477.0
1.759 ± 0.036	3.01550	8.4818	**مقدار تجربی**

با توجه به جدول مقدار انرژی بستگی محاسبه شده برای تریتون به ازای V_0 =474.6 MeV به مقدار تجربی نزدیک است، اما در مقادیر محاسبه شده برای شعاع باری با مقدار تجربی اختلاف وجود دارد.

در بخش بعد سعی خواهیم کرد با اصلاح پتانسیل به مقدار تجربی شعاع باری تریتون نزدیک‌تر شویم. در شکل (۵-۱) تابع موج حالت پایه‌ی تریتون (به همراه پتانسیل) و در شکل (۵-۲) چگالی احتمال حالت پایه به ازای این مقدار پتانسیل رسم شده است.



شکل (۵-۱). تابع موج حالت پایه تریتون در حضور پتانسیل یوکاوا



شکل (۵-۲). چگالی احتمال شعاعی حالت پایه تریتون در حضور پتانسیل یوکاوا

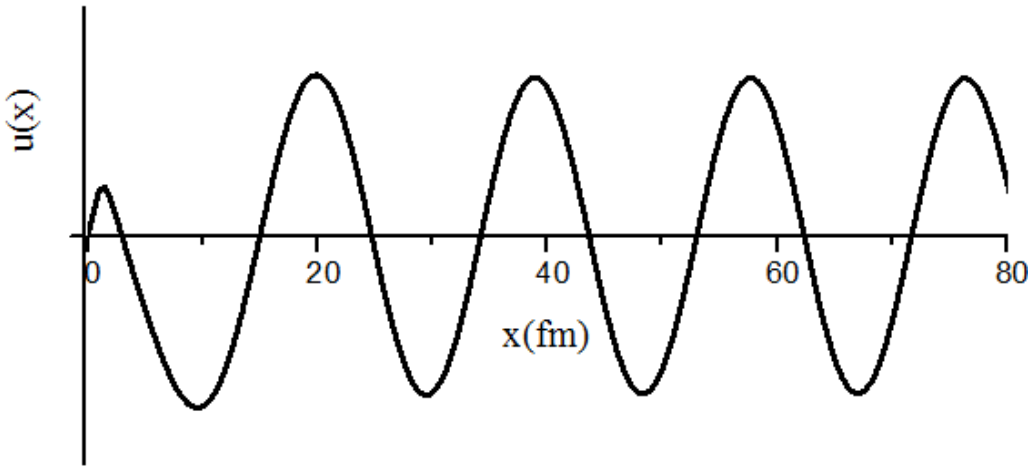
۵-۵-۲- حالات برانگیخته

برای محاسبه‌ی حالات مقید برانگیخته‌ی احتمالی در طیف انرژی تریتون باید با مقادیر انرژی حدسی بزرگتر از مقدار انرژی حالت پایه، کار محاسبه‌ی عددی را در حضور پتانسیل شکل (۵-۱) ادامه دهیم. هنگامی که این کار را انجام می‌دهیم، با یک طیف انرژی مثبت به ازای تمامی مقادیر γ روبرو می‌شویم که نشان دهنده‌ی عدم وجود حالت مقید برانگیخته در تریتون است. مثلاً در اولین تراز برانگیخته برای حالت $\gamma=0$ مقدار انرژی با در نظر گرفتن بی‌نهایت در فاصله‌ی 15 فرمی برابر 4.7251 MeV به‌دست می‌آید که با تغییر مکان بی‌نهایت این مقدار به‌صورت مثبت تغییر می‌کند (هرچه نقطه‌ی بی‌نهایت به فاصله‌ی دورتری می‌رود در واقع طول موج دوبروی ذره افزایش می‌یابد که این خود باعث کاهش انرژی ذره می‌شود). تابع موج حالت برانگیخته برای تریتون به ازای این مقدار انرژی در شکل (۵-۲) رسم شده است. همانطورکه مشاهده می شود، تابع موج رفتار سینوسی دارد که رفتار مربوط به

سیستم نامقید (ذره آزاد) است. مقادیر انرژی مثبت با افزایش γ رفته رفته افزایش می یابند. در جدول (۵-۲) مقادیر انرژی جاصل برای چند حالت مختلف برانگیخته آمده است. همانطور که از جدول مشخص است برای حالات برانگیخته با طیفی از ترازهای مثبت روبرو هستیم.

جدول (۵-۲). طیف انرژی مثبت (نامقید) برای حالات برانگیخته در تریتون در حضور پتانسیل یوکاوا

γ	حالت انرژی	$x_2(fm)$	$E(MeV)$
0	حالت دوم	15	+4.7251
		16	+4.2062
		17	+3.7295
1	حالت اول	15	+7.2792
		16	+6.4401
		17	+5.7335
2	حالت اول	15	+10.510
		16	+9.2597
		17	+8.2171



شکل (۵-۳). تابع موج حالات برانگیخته در تریتون

۵-۵-۳- بررسی حل تحلیلی با استفاده از شکل تقریبی جمله‌ی $\frac{1}{x^2}$

معادله (۵-۹) را می توان با اعمال تقریب با استفاده از روش NU نیز حل کرد. در این قسمت برای بررسی میزان اعتبار این تقریب در حوزه‌ی فیزیک هسته‌ای به حل تحلیلی معادله می پردازیم. برای حل یک معادله به روش NU باید معادله مورد نظر فرم کلی زیر را دارا باشد [۳۰]

$$\left[\frac{d^2}{ds^2}+\frac{\alpha_1-\alpha_2 s}{s(1-\alpha_3 s)}\frac{d}{ds}+\frac{-\xi_1 s^2+\xi_2 s-\xi_3}{\left[s(1-\alpha_3 s)\right]^2}\right]\psi(s)=0 \qquad (۱۷-۵)$$

بر طبق روش NU ، اگر معادله قابل تبدیل به فرم بالا باشد، ویژه توابع و ویژه مقادیر انرژی از رابطه زیر قابل محاسبه خواهند بود

$$\psi(s)=s^{\alpha_{12}}(1-\alpha_3)^{-\alpha_{12}-\frac{\alpha_{13}}{\alpha_3}}P_{\upsilon}^{(\alpha_{10}-1,\frac{\alpha_{11}}{\alpha_3}-\alpha_{10}-1)}(1-2\alpha_3 s) \qquad (۱۸-۵)$$

$$\alpha_2\upsilon-(2\upsilon+1)\alpha_5+(2\upsilon+1)(\sqrt{\alpha_9}+\alpha_3\sqrt{\alpha_8})+\upsilon(\upsilon-1)\alpha_3+\alpha_7+2\alpha_3\alpha_8+2\sqrt{\alpha_8\alpha_9}=0 \qquad (۱۹-۵)$$

که در آن $P_{\upsilon}^{(a,b)}$ چندجمله ای های ژاکوبی هستند و α_iها $(i>3)$ با روابط زیر داده می شوند

$$\alpha_4=\frac{1}{2}(1-\alpha_1),\quad \alpha_5=\frac{1}{2}(\alpha_2-2\alpha_3),$$

$$\alpha_6=\alpha_5^2+\xi_1,\quad \alpha_7=2\alpha_4\alpha_5-\xi_2,$$

$$\alpha_8=\alpha_4^2+\xi_3,\quad \alpha_9=\alpha_3\alpha_7+\alpha_3^2\alpha_8+\alpha_6,$$

$$\alpha_{10}=\alpha_1+2\alpha_4+2\sqrt{\alpha_8},\quad \alpha_{11}=\alpha_2-2\alpha_5+2(\sqrt{\alpha_9}+\alpha_3\sqrt{\alpha_8}),$$

$$\alpha_{12}=\alpha_4+\sqrt{\alpha_8},\quad \alpha_{13}=\alpha_5-(\sqrt{\alpha_9}+\alpha_3\sqrt{\alpha_8}) \qquad (۲۰-۵)$$

به دلیل آنکه معادله‌ی (۵-۹) با پتانسیل یوکاوا حل تحلیلی دقیق ندارد، از تقریب (۵-۲۱) برای ترم مرکزی استفاده می کنیم

$$\frac{1}{x^2} \approx 4k^2 \frac{e^{-2kx}}{(1-e^{-2kx})^2}, \quad kx \ll 1 \tag{۲۱-۵}$$

و یا به صورت معادل

$$\frac{1}{x} \approx 2k \frac{e^{-kx}}{(1-e^{-2kx})} \tag{۲۲-۵}$$

با اعمال این تقریب ها معادله ی (۵-۹) به معادله ی (۵-۲۳) تبدیل می شود

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{mE}{\hbar^2} + \frac{4mkV_0}{\hbar^2} \frac{e^{-2kx}}{(1-e^{-2kx})} - \left[4\gamma(\gamma+4)+15\right] k^2 \frac{e^{-2kx}}{(1-e^{-2kx})^2} \right) u_{\upsilon\gamma}(x) = 0 \tag{۲۳-۵}$$

اگر در معادله (۵-۲۳) تغییر متغیر $s = e^{-2kx}$ را اعمال کنیم به رابطه زیر می رسیم

$$\frac{d^2 u_{\upsilon\gamma}(s)}{ds^2} + \frac{(1-s)}{s(1-s)} \frac{du_{\upsilon\gamma}(s)}{ds} + \frac{1}{s^2(1-s)^2} \left[\left(\frac{mE}{4\hbar^2 k^2} - \frac{mV_0}{2\hbar^2 k}\right) s^2 + \right.$$

$$\left. \left(-\frac{mE}{2\hbar^2 k^2} + \frac{mV_0}{2\hbar^2 k} - \frac{(4\gamma(\gamma+4)+15)}{4}\right) s + \frac{mE}{4\hbar^2 k^2} \right] u_{\upsilon\gamma}(s) = 0 \tag{۲۴-۵}$$

اکنون معادله به فرم استاندارد روش NU تبدیل شده است. از مقایسه روابط (۵-۱۷) و (۵-۱۰) عبارات مربوط به ξ_iها و α_iها قابل حصول است.

$$\xi_1 = \frac{mV_0}{2\hbar^2 k} - \frac{mE}{4\hbar^2 k^2}, \quad \xi_2 = -\frac{mE}{2\hbar^2 k^2} + \frac{mV_0}{2\hbar^2 k} - \frac{(4\gamma(\gamma+4)+15)}{4}, \quad \xi_3 = -\frac{mE}{4\hbar^2 k^2}$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1, \quad \alpha_4 = 0, \quad \alpha_5 = -\frac{1}{2},$$

$$\alpha_6 = \frac{1}{4} + \frac{mV_0}{2\hbar^2 k} - \frac{mE}{4\hbar^2 k^2}, \quad \alpha_7 = \frac{mE}{2\hbar^2 k^2} - \frac{mV_0}{2\hbar^2 k} + \frac{(4\gamma(\gamma+4)+15)}{4}, \quad \alpha_8 = -\frac{mE}{4\hbar^2 k^2},$$

$$\alpha_9 = \gamma(\gamma+4)+4, \quad \alpha_{10} = 1 + 2\sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2 k^2}}, \quad \alpha_{11} = 2 + 2\left(\sqrt{\gamma(\gamma+4)+4} + \sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2 k^2}} \right),$$

$$\alpha_{12}=\sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2k^2}},\quad \alpha_{13}=-\frac{1}{2}-\left(\sqrt{\gamma(\gamma+4)+4}+\sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2k^2}}\right) \qquad (۲۵-۵)$$

با استفاده از این ضرایب ویژه مقادیر انرژی به کمک رابطه (۵-۱۲) به صورت زیر به‌دست می‌آیند

$$E_{\upsilon\gamma}=-\frac{4k^2\hbar^2}{m}\left(\frac{-\upsilon(\upsilon+1)+(\frac{m}{\hbar^2})(\frac{V_0}{2k})-\gamma(\gamma+4)-(2\upsilon+1)\sqrt{\gamma(\gamma+4)+4}-\frac{17}{4}}{2\upsilon+1+2\sqrt{\gamma(\gamma+4)+4}}\right)^2 \qquad (۲۶-۵)$$

ویژه توابع متناظر نیز از رابطه ی (۵-۱۱) به شکل زیر حاصل می شوند

$$\psi(s)=s^{\sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2k^2}}}(1-s)^{-\sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2k^2}}+\frac{1}{2}+\left(\sqrt{\gamma(\gamma+4)+4}+\sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2k^2}}\right)}P_{\upsilon}^{\left(2\sqrt{-\frac{mE}{4\hbar^2k^2}},2+2\sqrt{\gamma(\gamma+4)+4}\right)}(1-2s) \qquad (۲۷-۵)$$

برخی مقادیر انرژی حاصل از رابطه‌ی (۵-۲۶) در جدول (۵-۲) به‌منظور مقایسه با نتایج عددی جدول (۵-۱) ارائه شده است.

جدول ۵-۳. انرژی بستگی محاسبه شده با روش تحلیلی تقریبی به ازای $k=0.7\ fm^{-1}$ و مقادیر مختلف V_0

$V_0\ /\ MeV$	انرژی بستگی (MeV)
465	10.0155
470	11.0221
475	12.0760

همانطور که مشاهده می‌شود نتایج روش تحلیلی با نتایج عددی اختلاف زیادی دارند. وجود این اختلاف به علت تقریبی است که در روش تحلیلی استفاده شده است (رابطه (۵-۱۴)). در واقع این تقریب، پتانسیل یوکاوا را به صورت حدی به پتانسیل کیلینگبک و یا کولنی نزدیک می‌سازد. با افزایش kx این اختلاف بیشتر می‌شود و خطای روش تحلیلی رفته رفته افزایش می یابد. این در حالی است که برای $k<<1$ نتایج تحلیلی بر جواب های عددی منطبق می‌شود. از آنجا که در محدوده‌ی فیزیک هسته‌ای، به علت برد

کم نیروی نوکلئون- نوکلئون، عمدتاً حاصلضرب kx با یک قابل مقایسه است، بنابراین نتایج حاصل از این تقریب برای این حوزه معتبر نیست و با خطای زیادی همراه است.

۵-۶- بررسی تریتون در حضور مدل پتانسیل یوکاوای اصلاح شده

همانطورکه گفته شد پتانسیل یوکاوا یک مدل مقدماتی و بسیار ساده برای توصیف پتانسیل هسته‌ای است و همواره ممکن است با خطای قابل توجهی همراه باشد. ما برای آنکه توصیف دقیق‌تری از پتانسیل هسته‌ای ارائه دهیم و به نتایج قابل اعتماد تری دست یابیم، سعی داریم جمله‌ای را به این پتانسیل اضافه کنیم. با انجام این کار قادر خواهیم بود عمق تقریبی پتانسیل نوکلئون-نوکلئون در تریتون را نیز تخمین بزنیم.

جمله‌ی تصحیحی مربوط به نیروی دافعه‌ی هسته‌ای در فواصل کم بین نوکلئون‌ها است. همانطور که در فصل دوم گفتیم از آزمایش‌های پراکندگی مشخص شده که نیروی نوکلئون-نوکلئون در فواصل کمتر از $0.5\ fm$ به‌شدت دافعه است. عقیده بر این است که این نیروی دافعه مربوط به نیروهای ناشی از تبادل مزون‌های ω است. می‌توانیم برای بیان این نیروی دافعه از یک پتانسیل با شکل تابعی (۵-۹) ولی با علامت مثبت استفاده کنیم. با توجه به چند برابر بودن جرم مزون‌های ω نسبت به جرم پایون‌ها ($M_\omega c^2 = 783\ MeV$) بحث قبلی منجر به ارائه‌ی یک نیروی دافعه با برد بسیار کم و با $k \simeq 4.9\ fm^{-1}$ می‌شود. بنابراین شکل عمومی پتانسیل اصلاح شده‌ی ما با رابطه (۵-۲۸) بیان می‌شود

$$V(\mathrm{x}) = -V_{0,1}\frac{\exp(-k_1 x)}{x} + V_{0,2}\frac{\exp(-k_2 x)}{x} \qquad (۲۸-۵)$$

که در آن $V_{0,1}$، $V_{0,2}$ مقادیری مثبت دارند و

$$k_1 = 0.7\ fm^{-1}, \quad k_2 = 4.9\ fm^{-1} \qquad (۲۹-۵)$$

۵-۶-۱- انرژی بستگی و شعاع باری

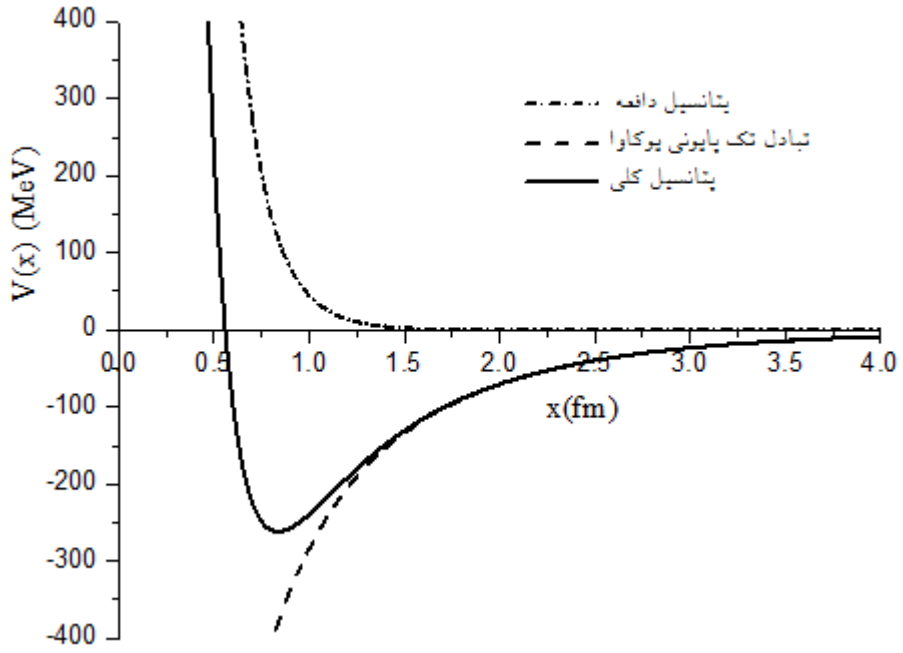
در جدول (۵-۳) نتایج حل معادله شرودینگر (۳-۴۱) را در حضور پتانسیل (۵-۲۸) برای حالت پایه‌ی تریتون به ازای برخی مقادیر $V_{0,1}$ و $V_{0,2}$ آورده‌ایم. $V_{0,2}$را به‌گونه‌ای انتخاب کرده‌ایم که پتانسیل در نزدیکی $0.5\ fm$ به سمت $+\infty$ میل کند.

جدول (۵-۴). انرژی بستگی، جرم هسته‌ای و شعاع باری محاسبه شده برای تریتون به ازای برخی مقادیر پارامترهای پتانسیل (۵-۲۸)

$V_{0,1}$ / MeV	$V_{0,2}$ / MeV	انرژی بستگی (MeV)	جرم هسته (u)	شعاع باری (fm)
556	6000	6.2263	3.01792	1.153
558	6000	6.4980	3.01763	1.144
560	6000	6.7732	3.01733	1.135
562	6000	7.0512	3.01703	1.124
564	6000	7.3322	3.01673	1.116
567	6000	7.7595	3.01627	1.103
570	6000	8.1934	3.01581	1.091
572	6000	8.4863	3.01549	1.083
575	6000	8.9312	3.01501	1.076
577	6000	9.2314	3.01469	1.065
مقدار تجربی		8.4818	3.01550	1.759 ± 0.036

مقایسه‌ی نتایج جدول (۵-۳) با جدول (۵-۴) نشان می‌دهد که با افزودن جمله‌ی جدید به پتانسیل، برآورد ما از شعاع تریتون در حدود $0.15\ fm$ به مقدار تجربی نزدیکتر شده و این نشان می‌دهد که شباهت پتانسیل ما با پتانسیل واقعی بین نوکلئون‌ها در تریتون افزایش یافته است. در واقع بهترین مقادیر محاسبه شده برای انرژی توسط ما مقادیری هستند که به‌طور همزمان برآورد مناسب‌تری از شعاع تریتون نیز

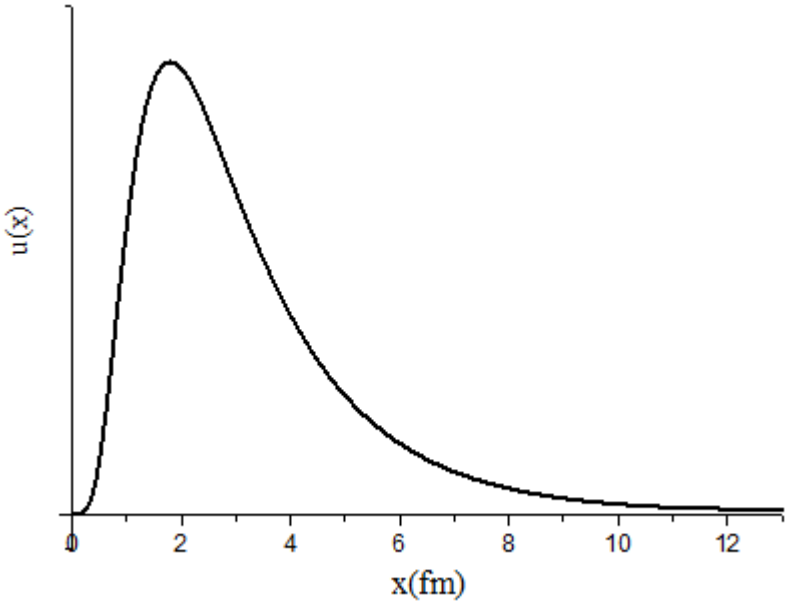
داشته باشند یعنی در حدود 6.2 MeV تا 7 MeV . در شکل (۵-۳) رفتار هرکدام از جملات پتانسیل به همراه ترکیب آنها که پتانسیل کلی (۵-۲۱) را تشکیل می‌دهند، رسم شده است. همانطور که در شکل (۵-۳) مشخص است، این پتانسیل رفتار مورد نظر ما را ارائه می دهد، یعنی در حدود فاصله‌ی ۴ تا ۵ فرمی تقریباً صفر می شود و در فواصل کمتر از 0.5 فرمی به سمت $+\infty$ میل می‌کند. اکنون رفتار کیفی پتانسیل بسیار شبیه رفتار پتانسیل با مغزی نرم راید است.



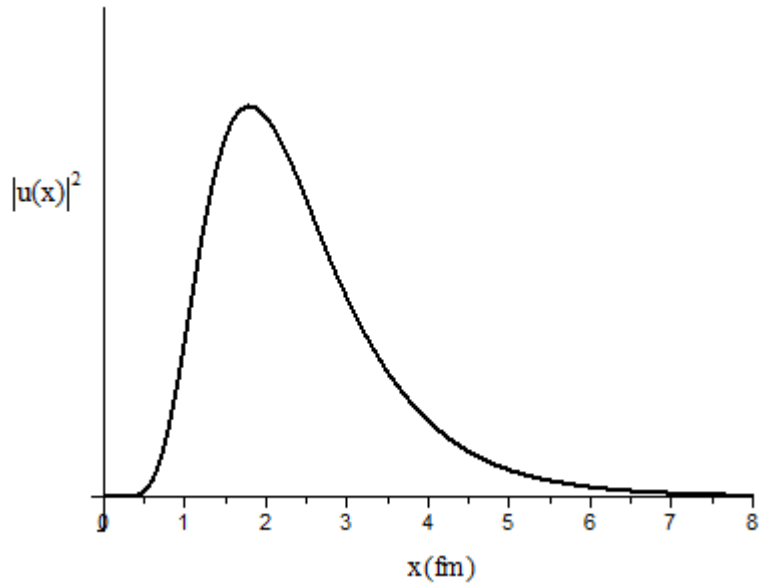
شکل (۵-۴). رفتار هریک از جملات و جمله کلی پتانسیل رابطه (۵-۲۱)

همچنین با توجه به شکل، عمق تقریبی چاه پتانسیل نوکلئون- نوکلئون در تریتون با استفاده از مدل پتانسیل اصلاح شده‌ی ما در حدود 250 MeV برآورد شده است. از آنجا که انرژی بستگی تریتون در حدود 8.5 MeV است بنابراین حالت پایه آن با این مقدار انرژی خیلی نزدیک به لبه‌ی چاه پتانسیل شکل (۵-۳) قرار می‌گیرد. این مطلب بیان می‌کند که تریتون در حالت پایه قیدی بسیار سست دارد و بنابراین

احتمال وجود حالت مقید برانگیخته در تریتون بسیار ضعیف است. در شکل‌های (۵-۴) و (۵-۵) نمودار تابع موج (بهنجار نشده) و چگالی احتمال فوق شعاعی حالت پایه در حضور پتانسیل شکل (۵-۳) به ازای انرژی $-8.4863\ MeV$ رسم شده است.



شکل (۵-۵). تابع موج حالت پایه‌ی تریتون در حضور پتانسیل (۵-۲۱)



شکل (۵-۶). چگالی احتمال شعاعی حالت پایه‌ی تریتون در حضور پتانسیل (۵-۲۱)

۵-۶-۲- حالات برانگیخته

برای محاسبه‌ی حالات برانگیخته در حضور پتانسیل جدید نیز به همان روش قبلی عمل می‌کنیم. با انجام این کار بازهم برای حالات برانگیخته در تریتون یک طیف از انرژی مثبت (جدول (۵-۲۱)) حاصل می‌شود که بیانگر عدم وجود حالت مقید برانگیخته در تریتون است. توابع موج شعاعی نیز رفتاری مشابه شکل (۵-۲) دارند. بنابراین طبق محاسبات ما وجود حالت انرژی مقید برانگیخته در تریتون منتفی است و این هسته به صورت تک حالت مقید وجود دارد. در داده های معتبر تجربی شامل ترازهای انرژی هسته‌ها نیز هیچ حالت برانگیخته‌ی مقیدی برای تریتون ذکر نشده است [۴۲].

جدول (۵-۵). طیف انرژی مثبت (نامقید) برای حالات برانگیخته در تریتون در حضور پتانسیل (۵-۲۱)

γ	حالت انرژی	$x_2(fm)$	$E(MeV)$
0	حالت دوم	15	+4.7827
		16	+4.2062
		17	+3.7295
1	حالت اول	15	+7.2162
		16	+6.3976
		17	+5.7044
2	حالت اول	15	+10.487
		16	+9.2446
		17	+8.2070

نتیجه‌گیری:

در این پایان‌نامه نخست با درنظرگرفتن پتانسیل یوکاوا به عنوان پتانسیل نوکلئون- نوکلئون و حل معادله شرودینگر فوق شعاعی سه جسمی برای آن، اقدام به محاسبه ی انرژی بستگی و تابع موج شعاعی تریتون کردیم .

از مقایسه نتایج حاصل با مقدار تجربی انرژی بستگی تریتون، ضریب مناسب پتانسیل یوکاوا را برای این هسته به‌دست آوردیم. با توجه به اینکه اکتفا به تنها یک پارامتر پدیده‌شناسی در این زمینه صحیح به نظر نمی‌آید، شعاع باری تریتون را نیز در حالت پایه محاسبه کردیم که مقداری با شعاع تجربی اختلاف داشت. سپس سعی کردیم با استفاده از این پتانسیل انرژی ترازهای برانگیخته در تریتون را به‌دست آوریم. نتیجه تمام حالات برانگیخته، طیف انرژی مثبت بود که به معنی عدم وجود حالت مقید برانگیخته است.

در اینجا به دلیل آنکه حل تحلیلی دقیق معادله‌ی شرودینگر برای پتانسیل یوکاوا غیرممکن است، برای یافتن جواب‌های دقیق از روش عددی پرتاب استفاده کردیم.

از آنجا که پتانسیل یوکاوا یک مدل مقدماتی از برهم‌کنش بین نوکلئون‌هاست و برآورد ضعیفی از شعاع باری تریتون دارد، در مرحله‌ی بعدی جمله‌ای به آن افزودیم تا آن را به پتانسیل واقعی بین نوکلئون‌ها در تریتون نزدیک‌تر کنیم. این جمله مربوط به تبادل مزون‌های سنگین ωی عامل نیروی دافعه در فواصل کمتر از نیم فرمی است که باعث شد مقدار محاسبه شده توسط ما برای شعاع باری در حدود 0.15 fm به مقدار تجربی نزدیک‌تر شود.

می‌توان گفت با پتانسیل‌های مرکزی بیش از این نمی‌توان به یک هماهنگی میان مقادیر انرژی بستگی و شعاع باری دست یافت و در واقع نتایج ما نشان می‌دهند که محاسبات مبتنی بر پتانسیل‌هایی مرکزی و

نیروهای دو جسمی مقدار انرژی بستگی و شعاع باری تریتون را اندکی کمتر از مقادیر تجربی پیش‌بینی می‌کنند.

برای هماهنگی بیشتر باید جملات شامل پتانسیل‌های تانسوری که حالات تکانه‌ی زاویه‌ای آمیخته را در تابع موج حالت پایه وارد محاسبات می‌کنند به پتانسیل اضافه کرد و همچنین اثرات نیروهای سه‌جسمی را نیز درنظر گرفت که کار را بسیار پیچیده می‌کنند. سایر اثرات مانند جملات اسپینی نیز می‌توانند به بهبود نتایج کمک کنند.

با انجام مراحل قبلی برای مدل پتانسیل یوکاوای اصلاح‌شده توانستیم تخمینی از عمق چاه پتانسیل هسته‌ای در تریتون نیز داشته باشیم. این مقدار در حدود 250 MeV برآورد شد که نشان از سست بودن حالت مقید تریتون (8.5MeV) دارد. در حضور این پتانسیل نیز طیف انرژی برای حالات برانگیخته‌ی تریتون شامل انرژی‌های مثبت پیش بینی شد که با اطلاعات تجربی مبنی بر عدم وجود حالت مقید برانگیخته در طیف تریتون کاملاً در توافق است.

پیوست

در این بخش قسمتی از برنامه‌ی کامپیوتری که معادله‌ی شرودینگر (۳-۴۱) را در حضور پتانسیل یوکاوا برای حالت $\gamma = 0$ حل کرده و ویژه مقادیر انرژی را محاسبه می کند، آمده است.

```
                                        ! Main program:
PROGRAM shootingmethod
IMPLICIT NONE
INTEGER nvar,N2
PARAMETER (N2=1)
REAl dx,x1,x2,v(N)
LOGICAL check
COMMON / shootingm / dx                 !Communicates with load, score, and derivs.
COMMON /caller/ x1,x2,nvar              !Communicates with shoot.
!    USES newt
dx=1.e-4                                !Avoid evaluating derivatives exactly at x = 0.
nvar=3                                  !Number of equations.
write(*,*) 'input initial guess for energy'
read(*,*) v(1)
x1=0.+dx !Set range of integration.
x2=15
call newt(v,N2,check)                   !Find v that zeros function f in score.
if(check)then
write(*,*)'shoot failed; bad initial guess'
else
write(*,'(1x,t6,a)') 'energy'
write(*,'(1x,f12.6)') v(1)
goto 1
endif
                                    END Program  shootingmethod
!……
SUBROUTINE newt(x,n,check)
    INTEGER n,nn,NP,MAXITS
    LOGICAL check
    REAL x(n),fvec,TOLF,TOLMIN,TOLX,STPMX
    PARAMETER                   (NP=40,MAXITS=200,TOLF=1.e-4,TOLMIN=1.e-6,TOLX=1.e-
7,STPMX=100.)
    COMMON /newtv/ fvec(NP),nn
    SAVE /newtv/
                                        !    USES fdjac,fmin,lnsrch,lubksb,ludcmp
    INTEGER i,its,j,indx(NP)
    REAL d,den,f,fold,stpmax,sum,temp,test,fjac(NP,NP),g(NP),p(NP),xold(NP),fmin
    EXTERNAL fmin
    nn=n
```

```
      f=fmin(x)
      test=0.
      do 11 i=1,n
     if(abs(fvec(i)).gt.test)test=abs(fvec(i))
11   continue
     if(test.lt..01*TOLF)then
     check=.false.
     return
     endif
     sum=0.
     do 12 i=1,n
     sum=sum+x(i)**2
12 continue
     stpmax=STPMX*max(sqrt(sum),float(n))
     do 21 its=1,MAXITS
     call fdjac(n,x,fvec,NP,fjac)
     do 14 i=1,n
     sum=0.
     do 13 j=1,n
      sum=sum+fjac(j,i)*fvec(j)
13 continue
      g(i)=sum
14 ontinue
      do 15 i=1,n
      xold(i)=x(i)
15 continue
      fold=f
      do 16 i=1,n
      p(i)=-fvec(i)
16 continue
      call ludcmp(fjac,n,NP,indx,d)
      call lubksb(fjac,n,NP,indx,p)
      call lnsrch(n,xold,fold,g,p,x,f,stpmax,check,fmin)
      test=0.
      do 17 i=1,n
      if(abs(fvec(i)).gt.test)test=abs(fvec(i))
17 continue
      if(test.lt.TOLF)then
      check=.false.
      return
      end if
      if(check)then
      test=0.
      den=max(f,.5*n)
      do 18 i=1,n
      temp=abs(g(i))*max(abs(x(i)),1.)/den
      if(temp.gt.test)test=temp
18 continue
      if(test.lt.TOLMIN)then
      check=.true.
```

```
      else
      check=.false.
      endif
      return
      endif
      test=0.
      do 19 i=1,n
      temp=(abs(x(i)-xold(i)))/max(abs(x(i)),1.)
      if(temp.gt.test)test=temp
19 continue
      if(test.lt.TOLX)return
21 continue
      pause 'MAXITS exceeded in newt'
      END
!.....................................................................................................
                !    SUBROUTINE shoot(n2,v,f) is named "funcv" for use with "newt"
      SUBROUTINE funcv(n2,v,f)
      INTEGER n2,nvar,kmax,kount,KMAXX,NMAX
      REAL f(n2),v(n2),x1,x2,dxsav,xp,yp,EPS
      PARAMETER (NMAX=50,KMAXX=500,EPS=1.e-6)
      COMMON /caller/ x1,x2,nvar
      COMMON /path/ kmax,kount,dxsav,xp(KMAXX),yp(NMAX,KMAXX)
                                        !  USES derivs,load,odeint,rkqs,score
      INTEGER nbad,nok
      REAL h1,hmin,y(NMAX)
      EXTERNAL derivs,rkqs
      kmax=0
      h1=(x2-x1)/100.
      hmin=0.
      call load(x1,v,y)
      call odeint(y,nvar,x1,x2,EPS,h1,hmin,nok,nbad,derivs,rkqs)
      call score(x2,y,f)
      return
      END
!.....................................................................................................
SUBROUTINE load(x1,v,y)
REAL dx,x1,v(1),y(3)
COMMON /shootingm/ dx
                                !Supplies starting values for integration at x1
y(3)=v(1)
y(2)=1000
y(1)=1
return
END
!.....................................................................................................
SUBROUTINE score(x2,y,f)
REAL dx,f(1),y(3)
COMMON /shootingm/ dx
                              !Tests whether boundary condition at x2 is satisfied.
f(1)=y(1)
```

```
return
END
!.....................................................................................
SUBROUTINE derivs(x,y,dydx)
REAL dx,x,dydx(3),y(3),v0,k
COMMON /shootingm/ dx
                                        !Evaluates derivatives for odeint.

v0=474
k=.7

dydx(1)=y(2)
dydx(2)=(-938.926/197.329**2)*(y(3)+v0*exp(-k*x)/x)*y(1)+15*y(1)/(4*x**2)
dydx(3)=0.0
return
END
!.....................................................................................
```

البته این برنامه از زیرروال های lubksb، ludcmp، lnsrch، fdjac، odeint، rkqs، rkck و تابع خارجی fmin نیز استفاده می‌کند که در اینجا به دلیل گسترده شدن بیش از حد مطلب از آوردن آنها پرهیز کرده‌ایم (خواننده می تواند به مرجع [۲۱] مراجعه کند). برای رسم توابع موج از برنامه‌ی جداگانه‌ای به شکل زیر استفاده کرده‌ایم.

```
                                        ! Main program:
PROGRAM wavefplot
                                        !    driver for routine odeint
IMPLICIT NONE
INTEGER  KMAXX,NMAX,NVAR
PARAMETER (KMAXX=200,NMAX=50,NVAR=3)
INTEGER  i,kmax,kount,nbad,nok,nrhs
REAL  dxsav,eps,h1,hmin,x1,x2,x,y,ystart(NVAR)
COMMON /path/ kmax,kount,dxsav,x(KMAXX),y(NMAX,KMAXX(
COMMON nrhs
EXTERNAL derivs,rkqs
OPEN(14,file="wave function.doc")
nrhs=0
x1=.0001
```

```
x2=30
ystart(1)=1                    !initial value for the wave function at x1
ystart(2)=1000                 !initial value for  the wave function derivative at x1
ystart(3)= -8.3369             !Energy eigenvalue
eps=1.0e-4
h1=.1
hmin=0.0
kmax=100
dxsav=(x2-x1)/200.0
call odeint(ystart,NVAR,x1,x2,eps,h1,hmin,nok,nbad,derivs,rkqs)
write(*,'(/1x,a,t30,i3)') 'Successful steps:',nok
write(*,'(1x,a,t30,i3)') 'Bad steps:',nbad
write(*,'(1x,a,t30,i3)') 'Function evaluations:',nrhs
write(*,'(1x,a,t30,i3)') 'Stored intermediate values:',kount
do 11 i=1,kount
write(*,'(1x,f10.4,2x,2f14.6)')   x(i),y(1,i)
write(14,*)  x(i),y(1,i)
11  continue
                                END PROGRAM wavefplot
!.....................................................................................
SUBROUTINE derivs(x,y,dydx)
REAL dx,x,dydx(3),y(3),v0,k
COMMON /shootingm/ dx
                                !Evaluates derivatives for odeint.
v0=474
k=.7

dydx(1)=y(2)
dydx(2)=(-938.926/197.329**2)*(y(3)+v0*exp(-k*x)/x)*y(1)+15*y(1)/(4*x**2)
dydx(3)=0.0
return
END
!.....................................................................................
```

این برنامه نیز از زیر روال های odeint، rkqs و rkck استفاده می کند.

مراجع

[۱] کنت کرین، (۱۳۷۴)، **"آشنایی با فیزیک هسته ای"** جلد اول، ابوکاظمی ا ، رهبر م ، چاپ ششم، مرکز نشر دانشگاهی، تهران

[2] D. Griffiths, (2004), **"Introduction to Elementary Particles"**, WILLEY VCH verlag GmbH & Co. KgaA, Germany, pp. 55

[۳] والتر می یرهوف، (۱۳۷۱)، **"مبانی فیزیک هسته ای"** ، رحیمی م، چاپ دوم، انتشارات دانشگاه فردوسی، مشهد

[۴] برنارد ال. کوهن، (۱۳۷۰)، **"مفاهیم فیزیک هسته ای"**، مدرس م، معصومی ر، چاپ اول، مرکز نشر دانشگاهی، تهران

[5] C. A. Bertulani, (2007), **"Nuclear Physics in a Nutshell"**, Princeton university press

[6] W. Greiner and J. A. Maruhn, (1996), **"Nuclear Models"**, Springer, Germany

[7] R. F. Casten, (1990), **"Nuclear Structure from a simple perspective"**, Oxford university press, pp. 6

[8] S. S. M. Wong, (1990), **"Introductory Nuclear Physics"**, Prentice-Hall

[9] M. Taketani, S. Nakamura and M. Sasaki, (1951),"On the method of the theory of nuclear forces", **Prog. Theor. Phys**. 3, 6, pp 169

[10] A. A. Rajabi, (2006), "Bound States for Hypercentral Singular and Exponential Potentials", **Commun. Theor. Phys**. 4, 45, pp 669.

[11] J. L. Ballot and M. Fabre de la Ripelle, (1980), "Application of the hyperspherical formalism to the trinucleon bound state problem", **Ann. Phys.** 127, pp 62

[12] A. A. Rajabi, (2005) “Exact analytical solution of the Schrödinger equation for an N-identical body-force system”, **Few. Body. Syst.** 37, pp 197

[13] G. Erens, J. L. Visschers and R. Van Wageningen, (1971) “Variational calculations on a simple triton model using a complete hyperspherical function basis”, **Ann. Phys.** 67, 2, pp 461

[۱۴] صفدری ا، (۱۳۹۱)، پایان نامه ارشد، " محاسبه ی انرژی بستگی و برخی خواص استاتیکی سیستم سه نوکلئونی با استفاده از یک پتانسیل فوق مرکزی مناسب آن"، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[15] M. Fabre de la Ripelle, S.A. Sofianos, R.M. Adam, (2005) “Method for solving the many-body bound state nuclear problem”, **Ann. Phys.** 316, pp107

[16] F. Zerinke and H. C. Brinkman, (1935) **Proc. Kon. Ned. Acad. Wetensch.** 33, pp 3.

[17] B. Kumar Bagchi, (2001), “**Supersymmetry In Quantum And Classical Mechanics”**, Chapman & Hall/CRC

[۱۸] حسن آبادی ح، (۱۳۸۶)، رساله‌ی دکتری، "محاسبه‌ی ویژگی های استاتیکی باریون ها با استفاده از معادله‌ی دیراک"، دانشکده‌ی فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود

[19] V. H. Badalov, H. I. Ahmadov and A. I. Ahmadov, (2009), “Analytical solutions of the Schrödinger equation with the Woods-Saxon potential for arbitrary l state”, **Int. J. Mod. Phys. E.** 18, 3, pp 631

[20] S. M. Ikhdair and R. Sever, (2010), “Any l-state solutions of the woods–saxon potential in arbitrary dimensions within the new improved quantization rule”, **Int. J. Mod. Phys. A.** 25, pp 3941

[21] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, (1992), "**Numerical Recipes in FORTRAN"** second edition, Cambridge University Press, pp 701-774

[22] J. R. Cash, A. H. Karp, (1990), "A variable order Runge-Kutta method for initial value problems with rapidly varying right-hand sides", **ACM Trans. Math. Softw.** 16, 3, pp 201

[23] N. J. Giordano, (1997), **"Computational Physics"**, Prentice-Hall, United States of America, pp 259

[24] S. Gasioriwicz, (1996), **"Quantum Physics"**, second edition, John Willey & Sons, pp 201

[25] J. M. Cai, P. Y. Cai, and A. Inomata, (1986), "Path-integral treatment of the Hulthén potential" ,**Phys. Rev. A.** 34, 6, pp 4621

[26] S.M. Ikhdair, R. Sever. (2008), "Approximate l-state solutions of the D-dimensional Schrödinger equation for Manning-Rosen potential", **Annalen der Physik ,** 17, 11, pp 897

[27] Zhao-You Chen, Min Li and Chun-Sheng Jia, (2009), "Approximate analytical solutions of the Schrödinger equation with the Manning-Rosen potential model", **Mod. Phys. Lett. A.** 24, 23, pp 1863

[28] W. Lucha and F. F. Schoberl, (1999), "Solving the Schrödinger equation for bound states with MATHEMATICA 3.0" **Int. J. Mod. Phys. C.** 10, 4, pp 607.

[29] W. C. Qiang and S. H. Dong, (2007), "Analytical approximations to the solutions of the Manning–Rosen potential with centrifugal term", **Phys. Lett. A.** 368, pp 13

[30] M. Hamzavi, M. Movahedi, K. E. Thylwe, A. A. Rajabi, (2012), "Approximate Analytical Solution of the Yukawa Potential with Arbitrary Angular Momenta", **Chin. Phys. Lett.** 29, 8, pp 080302

[31] B.Gonul, K. Koksal and E. Bakir, (2006), "An alternative treatment for Yukawa-type potentials", **Phys. Scr.** 73, 3, pp 279

[32] http://cdfe.sinp.msu.ru , "Center for Photonuclaer Experiments Data"

[33] H. Youkawa, (1935), "On the Interaction of Elementary Particles", **Pro. Phys. Math. Soc.** 17, pp 48

[34] M. Karakoc, I. Boztosun, (2006), "Accurate iterative and perturbative solutions of the Yukawa potential", **Int. J. Mod. Phys. E.** 15, 6, pp 1253

[35] E. Z. Liverts, E. G. Drukarev, R. Krivec, V. B. Mandelzweig, (2006), "Analytic presentation of a solution of the Schrödinger equation", **Few. Body. Syst.** 44, 1-4, pp 367

[36] B. Chakrabarti and T.K. Das, (2001) "Analytic superpotential for Yukawa potential by perturbation of the Riccati equation", **Phys. Lett. A**. 285, 1-2, pp 11

[37] J. Killingbeck, (1978), "Perturbation theory without wave functions", **Phys. Lett. A.** 65, 2, pp 87

[38] M. Hamzavi and A.A. Rajabi, (2011), "Solution of Dirac equation with Killingbeck potential by using wave function Ansatz method under spin symmetry limit", **Commun. Theor. Phys.** 55, 1, pp 35

[39] Z. Ghalenovi, A.A. Rajabi, M. Hamzavi, (2011), **"**The heavy baryon masses in variational approach and spin–isospin dependence", **Acta. Phys. Pol. B.** 42, 8, pp 1849

[40] M. Hamzavi, S. M. Ikhdair, and M. Solaimani, (2012), "A semirelativistic treatment of spinless particles subject to the Yukawa potential with arbitrary angular momenta", **Int. J. Mod. Phys. E.** 21, 2, pp 1250016

[41] B. Kozlowska, Z. Ayer, R. K. Das, H. J´. Karwowski, and E. J. Ludwig, (1994), "Determination of the asymptotic *D*- to *S*-state ratio of the triton from sub-Coulomb ($d\rightarrow,t$) reactions", **Phys. Rev. C.** 50, 6, pp 2695

[42] http://nndc.bnl.gov , "National Nuclear Data Center"

Abstract:

From the begining of the history of nuclear physics to now, using a model that is be able to provide a good description of the nucleons behavior which is affected by the nuclear force between them, has been in high importance. The hyperspherical harmonics expansion method is one of the safest and most successful methods to study the many-particles systems in the relativistic and nonrelativistic quantum mechanics. We want to find the correct form of the Schrödinger equation for Triton three-nucleon nuclear system by this method and then solve it in order to theoretical study of ground state and probability of existence of excited bound state. For this purpose, using a potential that provide a good estimation of ground state static propertice (energy and rms charge radius) is very important in reaching a phenomenological model. First, we have used the Yukawa potential as nuclear potential in Triton and in the next step for get closer to the experimental values and real potential, we have added a correction term. in both cases the results have been presented and compared whit experiment. We have used from the shooting numerical method for solving the Schrödinger equation. it's a suitable selection for exact solving of this equation specially in the presence of those of potentials that there is not exact solution for them (for example Yukawa potential). The shooting method is based on another numerical algorithm such as Newton-Rafson root-finding and Runge-Kutta methods.

Key words: Hyperspherical space, Schrödinger equation, Shooting numerical method, Triton, Binding energy

Shahrood University of Technology

Faculty of Physics

Nuclear Physics

Master of Science Thesis

Calculating the spectrum of Tritium Nucleus

Javad Rahmatabadi sani

Supervisor:

Prof. A. A. Rajabi

February 2014