



## محاسبه‌ی تابع موج مولکول‌های نامتقارن سه جسمی در اولین حالت برانگیخته

هادی خواجه‌آزاد\*، محمدرضا اسکندری

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شیراز، صندوق پستی: ۵-۷۱۹۹۳، شیراز - ایران

**چکیده:** ویژه مقادارها و ویژه بردارهای سیستم‌های سه جسمی برهم‌کنش‌کننده تحت پتانسیل کولنی، در حالت‌های برانگیخته، بدون استفاده از تقریب یا وردش و صرفاً با حل مستقیم معادله‌ی شرودینگر محاسبه شد. این کار با بیان مختصه‌های سیستم در دستگاه مختصات ژاکوبی و فوق‌کروی و بسط متعاقب قسمت زاویه‌ای تابع موج سیستم برحسب تابع‌های فوق‌کروی و قسمت شعاعی برحسب تابع‌های توسعه‌یافته‌ی لاگر انجام شد. به این ترتیب معادله‌ی شرودینگر برای سیستم‌های سه جسمی به یک معادله‌ی غیر دیفرانسیل ماتریسی برای محاسبه‌ی ویژه مقادارهای انرژی و ویژه بردارهای این سیستم‌ها تبدیل شد که با حل آن، ضریب‌های بسط (تابع موج) و ویژه مقادارهای انرژی به دست آمد. با محاسبه‌ی تابع موج، مقدار انتظاری پارامترهای ساختاری مختلف سیستم، مانند فاصله‌ی بین ذرات را می‌توان محاسبه کرد.

**کلیدواژه‌ها:** سیستم‌های سه جسمی، حالت‌های برانگیخته، ویژه مقادارها، ویژه بردارها، مقادارهای انتظاری

## Wave Function of Nonsymmetrical Three Body Molecules in the First Excited States

H. Khajehazad\* and M.R. Eskandari

Physics Department, School of Science, Islamic Azad University, Shiraz Branch, P.O.Box: 71993-5, Shiraz-Iran

**Abstract:** Eigenvalues and eigenvectors of the excited states of three body molecular systems contacting under the coulomb potential are calculated parametrically by the direct solution of Schrodinger equation without using any approximation or variation parameters. This has done by expressing the coordinates of system in Jacobi and then in hyperspherical coordinates and consequently by the expansion of the angular part of wave function in hyperspherical harmonics and the spherical part of the wave function in extended Laguerre functions. Thus, the Schrodinger equation for three body molecular system becomes a non-differential matrix equation for eigenvalues and eigenvectors (expansion coefficients). After computing the expansion coefficients (wave function) the expectation value of various parameters of the system such as separation between particles can be determined.

**Keywords:** Tree Body Systems, Excited States, Eigen Values, Eigen Vectors, Expected Values



## ۱. مقدمه

مختصات فضایی  $\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k$  وجود دارد در این مقاله از تعریف زیر برای بردارهای ژاکوبی  $\vec{x}, \vec{y}$  و بردار مکانی مرکز جرم  $\vec{R}$  استفاده شد

$$\vec{x}_i = d_i^{-1}(\vec{r}_j - \vec{r}_k), \quad \vec{y}_i = d_i \left[ \vec{r}_i - \frac{m_j \vec{r}_j + m_k \vec{r}_k}{m_j + m_k} \right],$$

$$\vec{R} = \frac{1}{M}(m_i \vec{r}_i + m_j \vec{r}_j + m_k \vec{r}_k) \quad (1)$$

که در آن،

$$d_i = \sqrt{\frac{m_i}{\mu} \left( 1 - \frac{m_i}{M} \right)}, \quad M = \sum_{i=1}^r m_i, \quad \mu = \sqrt{\frac{m_i m_j m_k}{M}} \quad (2)$$

و  $i, j$  و  $k$  سه عدد از مجموعه‌ی  $\{1, 2, 3\}$  است. جهت بردار  $\vec{x}_i$  با این شرط که  $(i, j, k)$  باید تشکیل یک تعویض چرخه‌ای بدهند تعیین می‌شود. معادله‌ی (۱) سه مجموعه‌ی معادل از مختصات را برای توصیف مسئله‌ی سه جسمی ارائه می‌دهد که ارتباط بین آن‌ها این است

$$\begin{bmatrix} \vec{x}_k \\ \vec{y}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \psi_{ki} & \sin \psi_{ki} \\ -\sin \psi_{ki} & \cos \psi_{ki} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{x}_i \\ \vec{y}_i \end{bmatrix} \quad (3)$$

که در آن  $\tan(\psi_{ki}) = -\frac{m_j}{\mu}$ . با توجه به معادله‌ی (۳) مشاهده می‌شود که

$$x_i^2 + y_i^2 = x_j^2 + y_j^2 = x_k^2 + y_k^2 = \rho^2 \quad (4)$$

در نتیجه، فوق شعاع ( $\rho$ ) تحت دوران سه بعدی ناوردا و در قسمت‌های مختلف یکسان است. به این ترتیب  $\rho$  تحت تعویض شاخص ذرات ناوردا بوده و تغییر نمی‌کند. با استفاده از مختصات ژاکوبی معادله‌ی سه جسمی شرویدینگر به دو قسمت حرکت مرکز جرم و حرکت نسبی ذرات تفکیک می‌شود. معادله‌ی مربوط به حرکت نسبی چنین است

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla_{\vec{x}_i}^2 + \nabla_{\vec{y}_i}^2) + V_{jk}(\vec{x}_i) + V_{ki}(\vec{x}_i, \vec{y}_i) + V_{ij}(\vec{x}_i, \vec{y}_i) - E \right] \Psi(\vec{x}_i, \vec{y}_i) = 0 \quad (5)$$

## ۱.۲ مختصات ژاکوبی

مسئله‌ی سیستم‌های سه جسمی در فیزیک هنوز هم توجهات بسیاری را به خود معطوف می‌کند. اخیراً تعداد قابل توجهی روش محاسباتی سنگین وردشی با دقت بسیار بالا برای محاسبه‌ی انرژی بستگی لایه‌های بسته‌ی این نوع مولکول‌ها ابداع شده است [۱، ۲]. مولکول‌های میونی به واسطه‌ی اهمیت‌شان در فرایند هم‌جوشی سرد مورد توجه ویژه قرار گرفته‌اند. تعداد بسیار زیادی روش آزمایشگاهی و محاسباتی از قبیل روش هارمونیک‌های فوق کروی [۳]، معادله‌های فدوروف [۴] و معادله‌ی یاکوبوویسکی، برای بررسی ویژگی‌های این سیستم‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. در اغلب موارد برای بررسی حالت مقید این سیستم‌ها از روش هارمونیک‌های فوق کروی استفاده می‌شود.

## ۲. روش کار

برای محاسبه‌ی ویژه مقادارها و ویژه بردارهای حالت پایه و اولین حالت برانگیخته‌ی سیستم‌های چند جسمی از روش کروی استفاده شد [۵، ۶، ۷، ۸، ۹، ۱۰، ۱۱، ۱۲، ۱۳]. برای انجام این مهم، پارامترهای فوق کروی براساس مختصات ژاکوبی بیان و حرکت مرکز جرم هنگام استفاده از مختصه‌های ژاکوبی کنار گذاشته شده و حرکت نسبی  $N$  ذره‌ی درون سیستم تنها با  $(N-1)$  بردار ژاکوبی توصیف شد. در ادامه با بیان بردارهای ژاکوبی برحسب مختصات فوق کروی و بسط تابع موج سیستم برحسب مجموعه‌ی کاملی از هارمونیک‌های فوق کروی [۱۴] مجموعه‌ای از معادله‌های دیفرانسیلی درجه‌ی دوم جفت شده برای ویژه تابع‌های شعاعی به دست آمد. برای حل مستقیم آن‌ها ویژه تابع‌های شعاعی برحسب تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر بسط داده شد [۱۵]. در این روش از هیچ پارامتر وردشی استفاده نشد. بنابراین ویژه مقادارهای انرژی و شکل صریح تابع موج به راحتی قابل دسترسی بود. یکی از قسمت‌های مشکل محاسبات در این روش، محاسبه‌ی عنصرهای ماتریسی پتانسیل برهم‌کنش بود. این عنصرها با استفاده از ضرایب راینال-ریوای [۱۶] به صورت تحلیلی محاسبه شد. پس از محاسبه‌ی ویژه مقادارها و ویژه تابع‌های سیستم مقدار انتظاری کمیت‌های مختلف برای سیستم محاسبه شد.

روش‌های مختلفی برای بیان مختصات ژاکوبی سه ذره با برچسب‌های  $i, j$  و  $k$ ، به جرم‌های متفاوت  $m_i, m_j$  و  $m_k$  و



## ۲.۲ مختصات فوق کروی

اندازه‌ی بردارهای ژاکوبی  $\vec{x}_i$  و  $\vec{y}_i$  را می‌توان به صورت زیر برحسب پارامترهای فوق کروی  $\rho$  و زاویه‌ی  $\alpha_i$  نوشت

$$x_i = \rho \cos \alpha_i, \quad y_i = \rho \sin \alpha_i \quad (۶)$$

اگر زوج بردارهای ژاکوبی ( $\vec{y}_i$  و  $\vec{x}_i$ ) با مختصات فوق کروی معادل آن‌ها، شامل فوق شعاع  $\rho$  و پنج مختصه‌ی زاویه‌ای:

$$\Omega_i = (\alpha_i, \hat{x}_i, \hat{y}_i) = (\alpha_i, \theta_{x_i}, \varphi_{x_i}, \theta_{y_i}, \varphi_{y_i}) \quad (۷)$$

تعویض شود، معادله‌ی شرودینگر برای اتم‌ها و مولکول‌های سه جسمی برهم‌کنش‌کننده تحت پتانسیل کولنی به صورت زیر خواهد بود

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\hat{K}^2(\Omega_i)}{\rho^2} \right) - \frac{Z(\Omega)}{\rho} - E \right] \Psi(\rho, \Omega_i) = 0 \quad (۸)$$

که در آن  $Z(\Omega) = Z_{jk}(\Omega_j) + Z_{ki}(\Omega_i) + Z_{ij}(\Omega_k)$  است. برای برهم‌کنش کولنی جمله‌های مربوط به پتانسیل در معادله‌ی (۵) می‌تواند با استفاده از رابطه‌های (۱) و (۶) چنین نوشته شود

$$V_{jk}(\vec{x}_i) = \frac{z_j z_k e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_k|} = \frac{z_j z_k e^2}{d_i \rho \cos \alpha_i} = \frac{Z_{jk}(\Omega_i)}{\rho} \quad (۹)$$

عملگر  $\hat{K}^2(\Omega_i)$  در معادله‌ی (۸) توان دوم عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای در مختصات فوق کروی است [۳]

$$\hat{K}^2(\Omega_i) = -\frac{\partial^2}{\partial \alpha_i^2} - 4 \cot \alpha_i \frac{\partial}{\partial \alpha_i} + \frac{1}{\cos^2 \alpha_i} \hat{L}^2(\hat{x}_i) + \frac{1}{\sin^2 \alpha_i} \hat{L}^2(\hat{y}_i) \quad (۱۰)$$

که در آن  $\hat{L}(\hat{x}_i)$  و  $\hat{L}(\hat{y}_i)$  عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای معمولی وابسته به زوایای مربوط به بردارهای ژاکوبی  $\vec{x}_i$  و  $\vec{y}_i$  است. عملگر  $\hat{K}^2(\Omega_i)$  در معادله‌ی ویژه مقداری زیر صدق می‌کند

$$\hat{K}^2(\Omega_i) y_{Kl_i l_{y_i} m_{x_i} m_{y_i}}(\Omega_i) = K(K+4) y_{Kl_i l_{y_i} m_{x_i} m_{y_i}}(\Omega_i) \quad (۱۱)$$

که ویژه تابع‌های بهنجار شده‌ی آن می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$y_{Kl_i l_{y_i} m_{x_i} m_{y_i}}(\Omega_i) = N_K^{l_{x_i} l_{y_i}} (\cos \alpha_i)^{l_{x_i}} (\sin \alpha_i)^{l_{y_i}} \times Y_{l_{x_i}}^{m_{x_i}}(\hat{x}_i) Y_{l_{y_i}}^{m_{y_i}}(\hat{y}_i) P_{n_i}^{l_{y_i} + \frac{1}{2}, l_{x_i} + \frac{1}{2}}(\cos(\alpha_i)) \quad (۱۲)$$

که در آن  $P_n^{a,b}$  تابع ژاکوبی است و

$$N_K^{l_{x_i} l_{y_i}} = \left( \frac{\nu(K+\nu)n!(n+1_{x_i}+1_{y_i}+1)!}{\Gamma(n+1_{x_i}+\nu)\Gamma(n+1_{y_i}+\nu)} \right)^{1/2}, \quad n_i = \frac{K-1_{x_i}-1_{y_i}}{2} \quad (۱۳)$$

بسیار مناسب است که از ویژه تابع‌های با تکانه‌ی زاویه‌ای کل معین استفاده شود. این کار می‌تواند به صورت زیر و با استفاده از ضریب‌های کلبش-گوردون انجام شود

$$y_{K\mu_i}(\Omega_i) = \sum_{m_{x_i} m_{y_i}} \langle l_{x_i} m_{x_i} l_{y_i} m_{y_i} | LM \rangle y_{Kl_i l_{y_i} m_{x_i} m_{y_i}}(\Omega_i) \quad (۱۴)$$

$\mu$  به صورت زیرنویس نماینده‌ی مجموعه اعداد کوانتومی  $[l_x l_y LM]$  است. تابع‌های  $y_{K\mu_i}(\Omega_i)$  تشکیل یک مجموعه‌ی کامل و بهنجار می‌دهند، بنابراین تابع موج  $\Psi(\rho, \Omega_i)$  می‌تواند برحسب آن‌ها بسط داده شود

$$\Psi(\rho, \Omega_i) = \sum_{K\mu_i} \Phi_{K\mu_i}(\rho) y_{K\mu_i}(\Omega_i) \quad (۱۵)$$

با قرار دادن این معادله در معادله‌ی (۸) و با استفاده از رابطه‌ی (۱۱) و با توجه به متعامد بودن هارمونیک‌های فوق کروی، یک مجموعه معادله‌ی دیفرانسیلی درجه دوم جفت شده به دست می‌آید که در شکل ماتریسی چنین نوشته می‌شود

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\bar{K}}{\rho^2} \right) - \frac{\bar{Z}}{\rho} - E \right] \bar{\Phi}(\rho) = 0 \quad (۱۶)$$

که در آن  $\bar{\Phi}(\rho)$  یک ماتریس ستونی شامل ضریب‌های بسط،  $\bar{K}$  یک ماتریس قطری با عنصرهای  $K(K+4)$  و  $\bar{Z}$  ماتریس متقارن پتانسیل است که عضوهای آن با استفاده از ضریب‌های راینال-ریوای در بخش ۴.۲ محاسبه خواهد شد.



### ۳.۲ بسط بر حسب تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر

یک روش تحلیلی و مؤثر برای حل معادله‌ی (۱۶)، بسط دادن ویژه تابع  $\Phi_{K\mu}(\rho)$  بر حسب مجموعه‌ای کامل از تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر است [۱۵]. برای انجام این کار ابتدا ویژه تابع  $\Phi_{K\mu}(\rho)$  چنین نوشته می‌شود

$$\bar{\Phi}(\rho) = e^{-\xi\rho} \bar{\phi}(\rho) \quad (۱۷)$$

که در آن  $\xi = \sqrt{-2\mu E}/\hbar^2$ . هم‌چنین با تغییر متغیر  $\rho = r/\xi$ ، معادله‌ی (۱۶) به معادله‌ی زیر می‌انجامد

$$\frac{d^2 \bar{\phi}(r)}{dr^2} + \left(\frac{\delta}{r} - 1\right) \frac{d\bar{\phi}(r)}{dr} + \left(\frac{\mu\bar{Z}}{\hbar^2 \xi} - \frac{\delta}{r}\right) \frac{\bar{\phi}(r)}{r} - \frac{\bar{K}}{r^2} \bar{\phi}(r) = 0 \quad (۱۸)$$

ویژه تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر،  $L_n^v(r)$ ، با عدد درست و مثبت  $n$ ، جواب‌های معادله‌ی دیفرانسیلی لاگر هستند

$$\frac{d^2 L_n^v(r)}{dr^2} + \left(\frac{v+1}{r} - 1\right) \frac{dL_n^v(r)}{dr} + \frac{n}{r} L_n^v(r) = 0 \quad (۱۹)$$

این تابع‌ها تشکیل یک مجموعه‌ی کامل را می‌دهند و دارای شرایط مرزی یکسان با تابع موج شعاعی سیستم در صفر و بی‌نهایت، هستند. بنابراین  $\Phi_{K\mu}(r)$  می‌تواند بر حسب ویژه تابع‌های لاگر بسط داده شود

$$\bar{\phi}(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{C}^n L_n^v(r) \quad \text{یا} \quad \phi_{K\mu}(r) = \sum_{n=0}^{\infty} C_{K\mu}^n L_n^v(r) \quad (۲۰)$$

با توجه به معادله‌های (۱۸) و (۱۹)،  $v = 4$  انتخاب شده و با قرار دادن معادله‌ی (۲۰) در معادله‌ی (۱۸) چنین به دست می‌آید

$$\sum_{n=0}^{\infty} \bar{C}^n \left[ \left( \frac{2n+5}{2} - \frac{\mu\bar{Z}}{\hbar^2 \xi} \right) r + \bar{K} \right] L_n^v(r) = 0 \quad (۲۱)$$

استفاده از روابط بازگشتی و تعامد تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر به رابطه‌ی بازگشتی زیر برای ضریب‌های بسط  $\bar{C}^n$  می‌انجامد

$$-\overbrace{(n+5)}^{\bar{A}_n} \left( \frac{(2n+7)\xi}{2} - \frac{\mu\bar{Z}}{\hbar^2} \right) \bar{C}^{n+1} - n \overbrace{\left( \frac{(2n+3)\xi}{2} - \frac{\mu\bar{Z}}{\hbar^2} \right)}^{\bar{B}_n} \bar{C}^{n-1} + \overbrace{(2n+5)}^{\bar{D}_n} \left[ \left( \frac{(2n+5)\xi}{2} - \frac{\mu\bar{Z}}{\hbar^2} \right) r + \bar{K} \right] \bar{C}^n = 0 \quad (۲۲)$$

که در آن  $\bar{A}_n$ ،  $\bar{B}_n$ ،  $\bar{D}_n$  ماتریس‌های مربعی  $M \times M$  بعدی هستند که در آن تعداد جمله‌های بسط زاویه‌ای  $y_{K\mu}(\Omega)$  است. ویژه مقادیرهای انرژی  $\xi$  و ضریب‌های بسط  $C_{K\mu}^n$  با حل معادله‌ی (۲۲) محاسبه می‌شوند. هم‌چنین با محاسبه‌ی ضریب‌های بسط  $C_{K\mu}^n$  ویژه تابع‌های سیستم با استفاده از معادله‌های (۱۵) و (۲۰) کاملاً مشخص می‌شوند

$$\Psi(\rho, \Omega_i) = \sum_{K\mu_i} \sum_{n=0}^{K_{\max} N_{\max}} C_{K\mu_i}^n e^{-\xi\rho} L_n^v(2\xi\rho) y_{K\mu_i}(\Omega_i) \quad (۲۳)$$

### ۴.۲ محاسبه‌ی عنصرهای ماتریس پتانسیل

جمله‌ی  $Z_{ijk}(\alpha_i)$  در معادله‌ی (۹) به صورت تحلیلی محاسبه می‌شود

$$\langle K | \cos(\alpha)^p | K' \rangle_{l_x l_y} = N_K^{l_x l_y} N_{K'}^{l_x l_y} (-1)^{n+n'} \nu^{-(l_x+l_y+p/2+\nu)} \times C(l_x+p/2+\nu; n, l_x+\nu, l_x+\nu, l_y+\nu; n', l_x+\nu, l_y+\nu) \quad (۲۴)$$

که در آن  $x = -\cos(2\alpha)$  و  $C$  این است

$$C(t; n, a, b; m, r, s) = \int_{-1}^1 dx (1-x)^t (1+x)^b P_n^{a,b}(x) P_m^{r,s}(x) = \frac{\nu^{b+t+1} \Gamma(a-t+n) \Gamma(b+n+1) \Gamma(r+m+1) \Gamma(t+1)}{m! n! \Gamma(r+1) \Gamma(a-t) \Gamma(b+t+n+2)} \times {}_4F_1(-m, r+s+m+1, t+1, t-a+1; r+1, b+t+n+2, t-a-n+1; 1) \quad (۲۵)$$

به جز این عبارت، محاسبه‌ی سایر جمله‌ها در قسمت بندی «i» بسیار مشکل است. با توجه به این که هر مجموعه‌ی کاملی از هارمونیک‌های فوق کروی  $\{y_{K\mu_i}(\Omega_i)\}$ ،  $\{y_{K\mu_j}(\Omega_j)\}$  یا  $\{y_{K\mu_k}(\Omega_k)\}$  فضای پنج بعدی یکسانی از فوق زاویه‌ها را توصیف می‌کند، یک عضو خاص از هر کدام از مجموعه‌ها، به عنوان مثال،  $y_{K\mu_i}(\Omega_i)$  می‌تواند با استفاده از یک تبدیل یکانی، بر حسب مجموعه‌ی کاملی از دیگر مجموعه‌ها، بسط داده شود

$$y_{Kl_{x_i} l_{y_i} LM}(\Omega_i) = \sum_{l_{x_k} l_{y_k}} \langle l_{x_k} l_{y_k} | l_{x_i} l_{y_i} \rangle_{KL} y_{Kl_{x_k} l_{y_k} LM}(\Omega_k) \quad (۲۶)$$



عنصرهای ماتریسی در طرف راست این معادله دارای شکل عنصرهای ماتریسی عبارت  $Z_{ijk}(\alpha_i)$  در قسمت بندی «i» است که به صورت تحلیلی محاسبه می‌شوند. با استفاده از تقارن‌های ضریب‌های راینال-ریوای و نماد  $\lambda$  یک روش بهینه برای محاسبه‌ی تحلیلی ضریب‌های راینال-ریوای توسعه داده شده است.

### ۵.۲ محاسبه‌ی پارامترهای ساختاری

پس از محاسبه‌ی ضریب‌های بسط با استفاده از معادله‌ی (۲۳) تابع موج سیستم به صورت کاملاً پارامتری محاسبه می‌شود. بنابراین مقدار انتظاری کمیت‌های مختلف می‌تواند به روش زیر محاسبه شود. برای محاسبه‌ی مقدار انتظاری توان‌های مختلف فاصله بین ذرات، از آن‌جا که،

$$\langle r_{jk}^m \rangle = \langle \Psi(\rho, \Omega_i) | r_{jk}^m | \Psi(\rho, \Omega_i) \rangle \quad (31)$$

با استفاده از معادله‌های (۱) تا (۶)،  $r_{jk}^m$  می‌تواند چنین نوشته شود

$$\left. \begin{aligned} \bar{x}_i &= d_i^{-1} (\bar{r}_j - \bar{r}_k) \\ x_i &= \rho \cos \alpha_i \end{aligned} \right\} \Rightarrow r_{jk}^m = [d_i \rho \cos(\alpha_i)]^m \quad (32)$$

فاصله‌ی بین ذره‌ی i تا مرکز جرم دو ذره‌ی jk نیز می‌تواند به همین ترتیب محاسبه شود

$$\left. \begin{aligned} \bar{y}_i &= d_i \left[ \bar{r}_i - \frac{m_j \bar{r}_j + m_k \bar{r}_k}{m_j + m_k} \right] \\ y_i &= \rho \sin \alpha_i \end{aligned} \right\} \Rightarrow r_{i-jk}^m = [d_i^{-1} \rho \sin(\alpha_i)]^m \quad (33)$$

به این ترتیب  $\langle r_{jk}^m \rangle$  می‌تواند با استفاده از تابع موج سیستم، معادله‌ی (۲۳)، چنین محاسبه شود

$$\langle r_{jk}^m \rangle = d^m \sum_{n'=0}^{N_{\max, K_{\max}}} \sum_{K'_{\mu'_i}}^{K_{\max}} \sum_{n=0}^{N_{\max, K_{\max}}} \sum_{K_{\mu_i}}^{K_{\max}} C_{K'_{\mu'_i}}^{n'} C_{K_{\mu_i}}^n \times \langle y_{K'_{\mu'_i}}(\Omega_i) | \cos^m(\alpha_i) | y_{K_{\mu_i}}(\Omega_i) \rangle \times \langle L_n^v(\rho) | \rho^m | L_n^v(\rho) \rangle \quad (34)$$

بنابراین  $\langle r_{jk}^m \rangle$  می‌تواند برحسب ماتریس پتانسیل و ضریب‌های بسط در شکل ماتریسی چنین نوشته شود

$$\langle r_{jk}^m \rangle = d^m \bar{C}^T \bar{Z}(\cos^m \alpha_i) \bar{L}(\rho^m) \bar{C} \quad (35)$$

که در آن،  $\langle 1_{x_k} 1_{y_k} | 1_{x_i} 1_{y_i} \rangle_{KL}$  نمایانگر ضریب‌های راینال-ریوای است [۱۲]

$$\langle 1_{x_k} 1_{y_k} | 1_{x_i} 1_{y_i} \rangle_{KL} = \frac{\pi}{\mathcal{F}} [C_{1_{x_i} 1_{y_i}}^{n_i} C_{1_{x_k} 1_{y_k}}^{n_k}]^{-1/2} \times \sum_{\lambda, \lambda_r, \lambda_\nu, \lambda_\phi} i^{\lambda_r + \lambda_\nu + 1_{y_i} - 1_{y_k}} (-1)^{\lambda_i + \lambda_r} f(\lambda, \lambda_r; 1_{x_k}) f(\lambda_\phi, \lambda_\nu; 1_{y_k}) \times \left\{ \begin{matrix} \lambda_i & \lambda_r & 1_{x_k} \\ \lambda_\phi & \lambda_\nu & 1_{y_k} \\ 1_{x_i} & 1_{y_i} & L \end{matrix} \right\} \times \sum_{\mu\nu} C_{\lambda_r, \lambda_\phi}^\mu C_{\lambda_i, \lambda_\nu}^\nu \cos(\varphi_{ki})^{2\nu + \lambda_i + \lambda_r} \sin(\varphi_{ki})^{2\mu + \lambda_r + \lambda_\phi} \quad (27)$$

که در آن  $\langle | | \rangle$  نماد ضریب‌های کلبش-گوردون و  $\{ \}$  نماد  $9j$  است. عبارت‌های  $C_{\beta\gamma}^\alpha$  و  $f(a, b; c)$  چنین داده می‌شوند

$$C_{\beta\gamma}^\alpha = \frac{\Gamma(2\alpha + \beta + \gamma + 2)}{\Gamma(\alpha + \beta + \frac{3}{2}) \Gamma(\alpha + \gamma + \frac{3}{2}) \Gamma(\alpha + 1) \Gamma(\alpha + \beta + \gamma + 2)} f(a, b; c) = \sqrt{(2a+1)(2b+1)} \langle a \cdot b | c \rangle \quad (28)$$

و عبارت جمع در معادله‌ی (۲۷) تا زمانی ادامه می‌یابد که شرط‌های زیر برقرار باشند، در غیر این صورت ضرایب راینال-ریوای برابر صفر می‌شوند.

$$\begin{aligned} \bar{L} &= \bar{L}_{x_j} + \bar{L}_{y_j} = \bar{L}_{x_i} + \bar{L}_{y_i} \\ K &= 2n_j + 1_{x_j} + 1_{y_j} = 2n_i + 1_{x_i} + 1_{y_i} \\ K &= 2\mu + 2\nu + \lambda_i + \lambda_r + \lambda_\nu + \lambda_\phi \end{aligned} \quad (29)$$

معادله‌ی (۳) بیانگر این واقعیت است که اعداد کوانتمی  $M, L$  و  $K$  تحت این تبدیل باید ثابت بمانند. با استفاده از ضریب‌های راینال-ریوای عنصرهای ماتریسی مربوط به عبارت  $Z_{ij}(\alpha_k)$  در قسمت بندی «i» چنین به دست می‌آید

$$\langle y_{K'_{\mu'_i}}(\Omega_i) | Z_{ij}(\alpha_k) | y_{K_{\mu_i}}(\Omega_i) \rangle = \sum_{l_{xk}, l_{yk}, l_{xk'}, l_{yk'}} \left[ \langle 1_{x_k} 1_{y_k} | 1_{x_i} 1_{y_i} \rangle_{KL}^* \langle l'_{x_k} l'_{y_k} | l'_{x_i} l'_{y_i} \rangle_{KL'} \times \langle y_{K'_{\mu'_k}}(\Omega_k) | Z_{ij}(\alpha_k) | y_{K_{\mu_k}}(\Omega_k) \rangle \right] \quad (30)$$



در جدول‌های ۱ و ۲ ویژه مقادارهای انرژی و مقادارهای انتظاری فاصله بین ذرات، برای حالت‌های برانگیخته‌ی مولکول  $dt\mu$  آورده شده است. مولکول  $dt\mu$  برای ارزیابی توانایی روش ارایه شده برای حل یک سیستم سه جسمی با سه ذره‌ی نایکسان و جرم‌های متفاوت انتخاب شده است. جرم هیچ کدام از ذرات این مولکول آن قدر زیاد نیست که بتوان آن را در مرکز جرم سیستم در نظر گرفت و از حرکت نسبی آن چشم‌پوشی کرد (از تقریب بورن نمی‌توان برای این

و مقدار انتظاری فاصله‌ی بین ذره‌ی  $i$  تا مرکز جرم دو ذره‌ی  $jk$  این است

$$\langle r_{i-jk}^m \rangle = d^{-m} \sum_{n=0}^{N_{\max}} \sum_{K'_{\mu'_i}}^{K_{\max}} \sum_{n=0}^{N_{\max}} \sum_{K_{\mu'_i}}^{K_{\max}} C_{K'_{\mu'_i}}^{n'} C_{K_{\mu'_i}}^n \times \langle y_{K'_{\mu'_i}}(\Omega_i) | \sin^m(\alpha_i) | y_{K_{\mu'_i}}(\Omega_i) \rangle \times \langle L_n^v(\rho) | \rho^m | L_n^v(\rho) \rangle \quad (36)$$

یا در شکل ماتریسی

$$\langle r_{i-jk}^m \rangle = d^{-m} \bar{C}^T \bar{Z}(\sin^m \alpha_i) \bar{L}(\rho^m) \bar{C} \quad (37)$$

جدول ۱. ویژه مقادارها و ویژه بردار (ضریب‌های بسط)‌های حالت پایه و اولین حالت‌های برانگیخته با  $N_{\max}=5$  و  $K_{\max}=1$

$C_{K\mu}^n$	-E(eV)	n, [K, L, $l_x$ , $l_y$ ]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]	2219,348992	0, [0, 0, 0, 0]
[0, 0, 980,52670,99, 0, 10,28749285x10 <sup>-1</sup> , 0, -0,19610,53424, -0,20,57498573x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,4094218450x10 <sup>-1</sup> , 0,4157870,482x10 <sup>-12</sup> , 0, 0,5680,989582x10 <sup>-11</sup> , 0,5594395843x10 <sup>-12</sup> , 0, 0,1273325615e10 <sup>-11</sup> , 0,1224339917x10 <sup>-12</sup> , 0, 0,2938451851x10 <sup>-12</sup> , 0]	360,4074372	0, [1, 1, 0, 1]
[0, 0, 10,28749285x10 <sup>-1</sup> , -0,980,526710, 0, -0,20,57498565x10 <sup>-1</sup> , 0,19610,53416, 0, -0,210,380,1479x10 <sup>-12</sup> , 0,337922468x10 <sup>-10</sup> , 0, 0,1128180,173x10 <sup>-12</sup> , 0,46892920,78x10 <sup>-11</sup> , 0, 0,1544180,52x10 <sup>-12</sup> , 0,10,51175920x10 <sup>-11</sup> , 0, 0,7135874670x10 <sup>-14</sup> , 0,2424158923x10 <sup>-12</sup> ]	52,7948918	0, [1, 1, 1, 0]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]	1132,320916	1, [0, 0, 0, 0]
[0, -0,680,3763712, -0,7132874694x10 <sup>-1</sup> , 0, -0,680,3763712, -0,7132874694x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,272150,5490, 0,2855349882x10 <sup>-1</sup> , 0, -0,5359561247x10 <sup>-1</sup> , -0,4818187373x10 <sup>-12</sup> , 0, -0,83744780,35x10 <sup>-11</sup> , -0,6345497975x10 <sup>-12</sup> , 0, -0,1674910,449x10 <sup>-11</sup> , -0,10,92522430x10 <sup>-12</sup> ]	2180,242522	1, [1, 1, 0, 1]
[0, -0,7132874694x10 <sup>-1</sup> , 0,680,3763712, 0, -0,7132874694x10 <sup>-1</sup> , 0,680,3763712, 0, 2855349882x10 <sup>-1</sup> , -0,272150,5483, 0, 0,35420,8434x10 <sup>-12</sup> , -0,2822230,92x10 <sup>-11</sup> , 0, 0,6843970,595x10 <sup>-12</sup> , -0,450,3157793x10 <sup>-11</sup> , 0, 0,1666921929x10 <sup>-12</sup> , -0,900,6632780x10 <sup>-12</sup> ]	31,93765061	1, [1, 1, 1, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]	684,9842570	2, [0, 0, 0, 0]
[0, 0,54551470,17, 0,5723432663x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,54551470,17, 0,5723432663x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,54551470,19, 0,5723432663x10 <sup>-1</sup> , 0, -0,32730,88214, -0,34340,59595x10 <sup>-12</sup> , 0, 0,1998110,312x10 <sup>-9</sup> , 0,270,3339354x10 <sup>-11</sup> , 0, 0,2854345655x10 <sup>-11</sup> , 0,6641576381x10 <sup>-12</sup> ]	1459,501193	2, [1, 1, 0, 1]
[0, 0,5723432663x10 <sup>-1</sup> , -0,54551470,17, 0, 0,5723432663x10 <sup>-1</sup> , -0,54551470,17, 0, 0,5723432663x10 <sup>-1</sup> , -0,54551470,21, 0, -0,34340,59593x10 <sup>-12</sup> , 0,32730,88213, 0, 0,225586280,8x10 <sup>-11</sup> , -0,7440,42819x10 <sup>-11</sup> , 0, 0,620,5436925x10 <sup>-12</sup> , -0,10,62598672x10 <sup>-11</sup> ]	21,37974960	2, [1, 1, 1, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]	458,5431799	3, [0, 0, 0, 0]
[0, -0,4642127959, -0,4870,4290,99x10 <sup>-1</sup> , 0, -0,4642127959, -0,4870,4290,99x10 <sup>-1</sup> , 0, -0,4642127960, -0,4870,4290,97x10 <sup>-1</sup> , 0, -0,4642127964, -0,4870,42910,1x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,371370,2386, 0,3896343295x10 <sup>-12</sup> , 0, 0,240,27710,92x10 <sup>-9</sup> , 0,170,13220,93x10 <sup>-11</sup> ]	1044,968310	3, [1, 1, 0, 1]
[0, 0,4870,42910,4x10 <sup>-1</sup> , -0,4642127965, 0, 0,4870,42910,4x10 <sup>-1</sup> , -0,4642127965, 0, 0,4870,42910,5x10 <sup>-1</sup> , -0,4642127967, 0, 0,4870,42910,1x10 <sup>-1</sup> , -0,4642127964, 0, -0,3896343299x10 <sup>-12</sup> , 0,371370,2362, 0, 0,239660,9260x10 <sup>-11</sup> , -0,1160,728987x10 <sup>-9</sup> ]	15,30739468	3, [1, 1, 1, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]	328,306637	4, [0, 0, 0, 0]
[0, 0,408258225, 0,42830,24814x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,408258225, 0,42830,24814x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,408258226, 0,42830,24812x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,408258228, 0,42830,24814x10 <sup>-1</sup> , 0, 0,408258234, 0,42830,24822x10 <sup>-1</sup> , 0, -0,408258228, -0,42830,24816x10 <sup>-1</sup> ]	784,8873082	4, [1, 1, 0, 1]
[0, -0,42830,24813x10 <sup>-1</sup> , 0,408258225, 0, -0,42830,24813x10 <sup>-1</sup> , 0,408258225, 0, -0,42830,24814x10 <sup>-1</sup> , 0,408258227, 0, -0,42830,24812x10 <sup>-1</sup> , 0,408258225, 0, -0,42830,24810x10 <sup>-1</sup> , 0,408258223, 0, 0,42830,24828x10 <sup>-1</sup> , -0,408258239]	11,49755422	4, [1, 1, 1, 0]
	319,136967	[17] مرجع حالت پایه



جدول ۲. مقدار انتظاری فاصله‌ی بین ذرات در حالت پایه و اولین حالت برانگیخته‌ی مولکول dtμ

$r_{\mu-d}(10^{-12}m)$	$r_{t-d\mu}(10^{-12}m)$	$r_{d-t\mu}(10^{-12}m)$	$r_{d-t}(10^{-12}m)$	$r_{d-\mu}(10^{-12}m)$	$r_{t-\mu}(10^{-12}m)$	$n, [K, L, I_x, I_y]$
۰,۱۴۹۹۲۸۲۳۶	۰,۴۹۸۲۷۸۶۷۱	۰,۵۰۲۷۵۴۴۴۸	۰,۴۹۴۶۵۰۳۳۹	۰,۱۴۸۸۳۶۴۹۸	۰,۱۴۷۵۱۱۴۸	۰, [۰, ۰, ۰, ۰]
۰,۱۱۹۷۴۸۶۵۲	۰,۵۲۸۳۲۷۲۱۷	۰,۵۳۱۶۰۵۱۷۱	۰,۵۲۶۷۳۶۷۵۱	۰,۱۱۹۵۵۵۶۹	۰,۱۱۸۹۲۱۹۸۶	۰, [۱, ۱, ۰, ۱]
۱,۳۱۸۹۰۲۴۷۹	۳,۳۰۶۴۸۸۷۲۴	۳,۳۴۸۳۱۴۱۵	۳,۲۶۳۷۶۹۳۲۲	۱,۳۰۳۶۸۹۲۱۸	۱,۲۸۸۵۲۵۵۶۶	۰, [۱, ۱, ۱, ۰]
۰,۲۹۳۸۵۹۳۴۳	۰,۹۷۶۶۲۶۱۹۷	۰,۹۸۵۳۹۸۷۱۷	۰,۹۶۹۵۱۴۶۶۵	۰,۲۹۱۷۱۹۵۳۷	۰,۲۸۹۱۲۲۵۰۱	۱, [۰, ۰, ۰, ۰]
۰,۱۴۰۹۴۰۰۷۴	۰,۶۲۱۸۲۳۰۹۴	۰,۶۲۵۶۸۱۱۳۵	۰,۶۱۹۹۵۱۱۷	۰,۱۴۰۷۱۲۹۶۴	۰,۱۳۹۹۶۷۱۱۷	۱, [۱, ۱, ۰, ۱]
۱,۵۵۲۳۰۳۱۸	۳,۸۹۱۶۲۴۳۲۲	۳,۹۴۰۸۵۱۴۲	۳,۸۴۱۳۴۵۰۴۸	۱,۵۳۴۳۹۷۶۹۲	۱,۵۱۶۵۵۰۵۹۲	۱, [۱, ۱, ۱, ۰]
۰,۴۸۵۷۶۷۴۸۴	۱,۶۱۴۴۲۲۸۹۶	۱,۶۲۸۹۲۴۴۱۲	۱,۶۰۲۶۶۷۱	۰,۴۸۲۲۳۰۲۵۵	۰,۴۷۷۹۳۷۱۹۶	۲, [۰, ۰, ۰, ۰]
۰,۱۷۹۷۸۶۵۱۶	۰,۷۹۳۲۱۲۳۵۳	۰,۷۹۸۱۳۳۷۶۱	۰,۷۹۰۸۲۴۴۸۲	۰,۱۷۹۴۹۶۸۰۹	۰,۱۷۸۵۴۵۳۸۹	۲, [۱, ۱, ۰, ۱]
۱,۹۸۰۱۵۴۹۱۷	۴,۹۶۴۲۴۸۶۹	۵,۰۲۷۰۴۳۹۵	۴,۹۰۰۱۱۱۲۴۸	۱,۹۵۷۳۱۴۲۴۸	۱,۹۳۴۵۴۸۰۶۲	۲, [۱, ۱, ۱, ۰]
۰,۷۲۵۶۵۲۶۶۱	۲,۴۱۱۶۶۸۷۶۶	۲,۴۳۳۳۳۱۵۲۲	۲,۳۹۹۱۰۷۶۳۶	۰,۷۲۰۳۶۸۶۵۲	۰,۷۱۳۵۵۵۵۶۳	۳, [۰, ۰, ۰, ۰]
۰,۲۳۲۵۴۶۴۳۶	۱,۰۲۵۸۷۷۴۳	۱,۰۳۲۳۵۳۰۶۸	۱,۰۲۲۸۹۸۸۱۸	۰,۲۳۲۱۷۱۷۱۳	۰,۲۳۰۹۴۱۰۸۹	۳, [۱, ۱, ۰, ۱]
۲,۵۶۱۲۴۸۶۳۸	۶,۴۲۱۰۵۰۷۴	۶,۵۰۲۲۷۳۸۱۵	۶,۳۳۸۰۹۱۶۱	۲,۵۳۱۷۰۵۱۷۶	۲,۵۰۲۲۵۸۰۵۵	۳, [۱, ۱, ۱, ۰]
۱,۰۱۳۵۱۴۸۱۳	۳,۳۶۸۳۶۳۸۱۴	۳,۳۹۸۶۲۰۰۶	۳,۳۴۳۳۶۲۸۷	۱,۰۰۶۱۳۴۷۲۸	۰,۹۹۷۱۷۷۶۰۴	۴, [۰, ۰, ۰, ۰]
۰,۲۹۹۲۱۷۲۱۶	۱,۳۲۰۱۳۶۷۷۳	۱,۳۲۸۳۲۷۴۳۴	۱,۳۱۶۱۶۲۶۶	۰,۲۹۸۸۷۳۵۰۵۹	۰,۲۹۷۱۵۱۶۱۸	۴, [۱, ۱, ۰, ۱]
۳,۲۹۵۵۵۵۴۸۸	۸,۲۶۱۹۵۸۱۳۵	۸,۳۶۶۴۶۷۷۶۵	۸,۱۵۵۲۱۴۷۲	۳,۲۵۷۵۴۱۹۵۱	۳,۲۱۹۶۵۲۳۷۷	۴, [۱, ۱, ۱, ۰]
۱,۳۴۹۳۵۴۱۲	۴,۴۸۴۵۰۸۰۳۴	۴,۵۲۴۷۹۰۰۱۹	۴,۴۵۱۸۵۳۰۴	۱,۳۳۹۵۲۸۴۸۲	۱,۳۲۷۶۰۳۳۱۸	۵, [۰, ۰, ۰, ۰]
۰,۱۲۰۰۴۷۷۵۲	۰,۵۲۹۶۴۶۸۳۶	۰,۵۳۲۹۳۲۹۸۲	۰,۵۲۸۰۵۲۴	۰,۱۱۹۸۵۴۳۰۸	۰,۱۱۹۲۱۹۰۲۲	۵, [۱, ۱, ۰, ۱]
۱,۳۲۲۱۹۶۷۵	۳,۳۱۴۷۴۷۴۶	۳,۳۵۶۶۷۷۳۶	۳,۲۷۱۹۲۱۳۵۳	۱,۳۰۶۹۴۵۴۹	۱,۲۹۱۷۴۳۹۶۳	۵, [۱, ۱, ۱, ۰]

مقادیرها برحسب الکترون ولت هستند و محاسبات مولکول نامتقارن dtμ با مقادیرهای زیر انجام شده است

$$m_i = m_{\mu} = ۰,۱۸۳۵۳۱۰۹۱۹۸۷۰۵ \times ۱۰^{-۲۷} \text{kg}, m_j = m_d = ۰,۳۳۳۵۸۳۰۹۲۵۵۴۵۹ \times ۱۰^{-۲۶} \text{kg}$$

$$m_k = m_t = ۰,۵۰۰۸۲۷۱۰۵۳۸۶۴۳۰ \times ۱۰^{-۲۶} \text{kg}, e = ۰,۱۶۰۲۱۷۶۶۲۲ \times ۱۰^{-۱۸} \text{C}$$

$$m_e = ۰,۹۱۰۹۳۸۱۸۸۲ \times ۱۰^{-۳۰} \text{kg}, \hbar = ۰,۱۰۵۴۵۷۱۵۹۶ \times ۱۰^{-۳۳} \frac{\text{m}^2 \text{kg}}{\text{s}} \quad (۳۸)$$

در جدول ۱ ترتیب قرار گرفتن ضریب‌های بسط در ویژه برادرها، که در ستون اول جدول نشان داده شده‌اند، متناظر است با ترتیب قرار گرفتن حالت‌های کوانتومی در سطرهای جدول. به عنوان مثال در لیست ضریب‌های بسط متناظر با حالت اولین حالت در جدول یعنی حالت  $[K, L, I_x, I_y] = [۰, ۰, ۰, ۰]$ ، عدد یک، ضریب بسط برای اولین حالت در جدول یعنی حالت  $[۰, ۰, ۰, ۰]$ ، و عدد صفر متناظر با حالت دوم در جدول یعنی حالت  $[۱, ۱, ۰, ۱]$ ، است و برای دیگر ضریب‌های بسط و عددهای کوانتومی موجود در جدول نیز به همین ترتیب عمل می‌شود. لازم به ذکر است که  $n$  بدون شاخص مانند مورد معادله‌های (۱۹) تا (۲۳) تعداد تابع‌های لاگر استفاده شده در بسط را مشخص می‌کند و جزء اعداد کوانتومی سیستم،  $[K, L, M, I_x, I_y]$ ، نیست. هم‌چنین  $n$  با شاخص‌های  $i, j$  و  $k$  که در معادله‌های (۱۳)، (۲۴) و (۲۹) به کار

مولکول استفاده کرد). در این جدول‌ها  $K_{\max}$  بیشینه عدد کوانتومی زاویه‌ای اصلی سیستم است که در این محاسبات مورد استفاده قرار گرفته و با تعداد جمله‌های بسط زاویه‌ای برحسب هارمونیک‌های فوق کروی متناسب است. به عنوان مثال با  $K_{\max} = 1$  سیستم دارای سه حالت غیرتبهگن  $[۱, ۱, ۰, ۱]$ ،  $[۱, ۱, ۱, ۰]$ ،  $[۰, ۰, ۰, ۰]$  است.  $N_{\max}$  تعداد جمله‌های بسط شعاعی برحسب تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر است. در ردیف آخر جدول‌ها بهترین مقادیر محاسبه شده برای این کمیت‌ها با استفاده از روش وردشی (در صورت وجود)، به منظور مقایسه آورده شده است. با مقایسه‌ی نتایج به دست آمده از این روش و بهترین نتایج روش وردشی ملاحظه می‌شود که روش بسط برحسب هارمونیک‌های فوق کروی و تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر این مزیت را دارد که می‌توان تابع موج سیستم را به صورت پارامتری در حالت پایه و حالت‌های برانگیخته به دست آورد که با استفاده از آن می‌توان مقدار انتظاری هر کمیتی را برای سیستم محاسبه کرد.

در جدول ۱ ویژه مقادیرها و ویژه بردارهای سیستم برای حالت پایه و اولین حالت‌های برانگیخته آورده شده است. در این پژوهش از سیستم مقیاس‌بندی SI استفاده شده است. ویژه



از نوشتن بردار  $\vec{X}$  دستگاه ژاکوبی (فاصله بین دو ذره‌ی  $t$  و  $d$ ) در دستگاه قطبی  $K$  روی ناشی می‌شود. معادله‌های (۱) تا (۱۰) و  $I_y$  از نوشتن بردار  $\vec{Y}$  دستگاه ژاکوبی (فاصله بین میون  $\mu$  تا مرکز جرم دو ذره‌ی  $t$  و  $d$ ) در دستگاه قطبی  $K$  روی به دست می‌آید. بنابراین حالت  $[0, 0, 0, 0]$  به معنای متقارن بودن شکل مولکول و فاصله‌ی بین ذرات است. حالت  $[1, 1, 0, 1]$  به معنای حرکت میون تحت اثر نیروی تقریباً هم‌جهت از طرف  $t$  و  $d$  است که منجر به انرژی بستگی بیش‌تری برای این حالت خواهد شد. حالت  $[1, 1, 1, 0]$  به معنای حرکت میون در فاصله‌ی میانی دو ذره‌ی  $t$  و  $d$  است به این ترتیب انرژی بستگی سیستم در این حالت از انرژی بستگی سیستم در حالت  $[0, 0, 0, 0]$  کم‌تر خواهد بود.

در جدول ۲ مقدار انتظاری فاصله‌ی بین ذرات محاسبه شده با استفاده از معادله‌های (۳۵) و (۳۷)، نشان داده شده است. می‌توان دید که برای مقدارهای مختلف تعداد جمله‌های بسط شعاعی مقدار انتظاری فاصله‌ی بین  $t$  و  $d$  در حالت  $[1, 1, 1, 0]$  به وضوح از حالت‌های  $[0, 0, 0, 0]$  و  $[1, 1, 0, 1]$  بیش‌تر است.

برای یک حالت با اعداد کوانتومی  $K\mu$  مشخص، تابع موج شعاعی سیستم می‌تواند با توجه به معادله‌های (۱۵)، (۱۷) و (۲۳) به دست آید

$$\Phi(\rho) = \sum_{n=0}^{N_{\max}} C_{K\mu}^n e^{-\xi\rho} L_n^f(\zeta\xi\rho) \quad (39)$$

در شکل ۱ تابع موج شعاعی سیستم در حالت‌های  $K\mu$  مختلف و با در نظر گرفتن  $N_{\max}=4$  رسم شده است. شکل کلی قسمت شعاعی تابع موج یکسان است زیرا برای هر سه حالت از تعداد یکسان تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر استفاده شده است. قسمت‌های متفاوت در تابع موج شعاعی، ویژه مقدارهای انرژی  $E_n$  و ضرایب‌های بسط  $C_{K\mu}$  هستند. در این نمودار نیز بزرگ‌تر بودن مولکول در حالت  $[1, 1, 1, 0]$  و کوچک‌تر بودن آن در حالت  $[1, 1, 0, 1]$  قابل مشاهده است.

با افزایش تعداد جمله‌های بسط همان‌گونه که انتظار می‌رود ویژه مقدارهای انرژی به مقدار واقعی خود و هم‌چنین تابع موج به شکل واقعی خود نزدیک‌تر خواهند شد. این، در شکل ۲ نشان داده شده است.

رفته خود یک عدد کوانتومی مستقل نیست و به عدد کوانتومی  $K$  وابسته است.

با توجه به ضرایب‌های بسط می‌توان دید که ویژه بردارها یا ضرایب‌های بسط  $C_{KL_xI_y}^n$  برای حالت‌های اولیه با افزایش تعداد جمله‌های بسط شعاعی  $n$  به شدت کاهش می‌یابند. به عنوان نمونه در ضرایب‌های بسط مربوط به حالت  $[1, 1, 0, 1]$  در جدول ۱، می‌توان دید که ضرایب بسط مربوط به حالت  $[0, 0, 0, 0]$  صفر است و دومین ضرایب بسط که متناظر با همین حالت است بیش‌ترین مقدار،  $0.9805267099$  را دارد و ضرایب‌های بسط متناظر با حالت‌های  $[1, 1, 0, 0]$  و  $[1, 1, 1, 0]$  (هشتمین و نهمین عدد در فهرست ضرایب‌های بسط) که دارای سه جمله‌ی بسط شعاعی هستند به ترتیب از مرتبه‌های  $10^{-11}$ ،  $10^{-12}$  هستند و با افزایش تعداد جمله‌های بسط شعاعی همان‌گونه که در جدول آورده شده است کوچک‌تر نیز می‌شوند. این امر بیان‌گر آن است که برای حالت‌های نزدیک به حالت پایه در نظر گرفتن تنها چند جمله‌ی اول از بسط شعاعی برای دست‌یابی به دقت بالا کافی است. ولی این وضعیت برای حالت‌هایی که از حالت پایه فاصله دارند صادق نبوده و هیچ‌یک از ضرایب‌های بسط قابل صرف‌نظر کردن نیستند. در این حالت‌ها باید تعداد جمله‌های بیش‌تری در بسط شعاعی و بسط زاویه‌ای به کار گرفته شود تا دقت موردنظر حاصل شود. محاسبات نشان داد که برای این حالت‌ها نیز افزایش تعداد جمله‌های بسط شعاعی باعث کاهش شدید ضرایب‌های بسط می‌شود، به گونه‌ای که در نظر گرفتن شش جمله از بسط شعاعی برای رسیدن به دقتی از مرتبه‌ی  $10^{-11}$  در ضرایب‌های بسط کافی است. نکته‌ی قابل توجه در این جدول آن است که جمله‌های غیرصفر در ویژه بردارها همگی دارای عدد کوانتومی  $L$  یکسان هستند. این امر برای تمام حالت‌های دیگر نیز صادق است و نتیجه‌ی ویژگی مرکزگرایی نیروی کولنی است.

با توجه به ویژه مقدارهای انرژی ملاحظه می‌شود که حالت  $[1, 1, 0, 1]$  سیستم دارای انرژی بستگی بیش‌تری نسبت به حالت  $[0, 0, 0, 0]$  آن است؛ این وضعیت را می‌توان برای دیگر سیستم‌های سه جسمی مانند اتم هلیم نیز مشاهده کرد [۱۸]. دلیل این امر را می‌توان با توجه به تعریف  $I_x$ ،  $I_y$  و فاصله‌ی بین دو تریوم ( $d$ ) و تریتم ( $t$ ) و هم‌چنین فاصله‌ی بین میون تا مرکز جرم  $dt$  به صورت نیمه کلاسیک در حالت  $[0, 0, 0, 0]$  و حالت‌های دیگر دریافت.  $I_x$

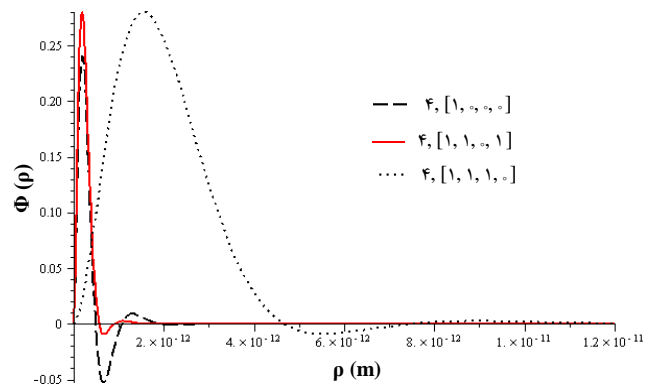


حرکت خاص خود را دارند. در مولکول  $dt\mu$  ذرات مشابه وجود ندارد، بنابراین محاسبات بدون ساده‌سازی و به صورت کامل باید انجام شود. هر مولکول دیگری حالت خاصی از این مولکول خواهد بود و می‌توان صرفاً با تغییر جرم ذرات بدون نیاز به تغییر محاسبات، مقادارهای موردنیاز برای دیگر مولکول‌ها را محاسبه کرد. علاوه بر ویژه مقادارها در حالت‌های پایه و برانگیخته، تابع موج نیز به صورت تحلیلی (معادله‌ی (۲۳)) ارائه شده است. این تابع موج (شامل قسمت‌های زاویه‌ای و شعاعی) برای هر سیستم سه جسمی کوانتومی که تحت اثر نیروی کوئنی برهم‌کنش می‌کند، چه دارای ذرات مشابه باشد چه نباشد قابل استفاده است. صرفاً باید ضریب‌های بسط و ویژه مقادارهای انرژی با حل معادله‌ی ویژه مقاداری (ماتریسی) (۲۲) برای آن سیستم (مولکول خاص) محاسبه شود. نحوه‌ی محاسبه‌ی مقدار انتظاری فاصله‌ی بین ذرات، هم‌چنین فاصله‌ی بین یک ذره تا مرکز جرم دو ذره‌ی دیگر در بخش ۵.۲ آورده شده است. تمام محاسبات تحلیلی حتی ضریب‌های راینال-ریوای انجام شد. تنها زمانی که این محاسبات برای مولکول خاصی استفاده شود و مقادارهای عددی کمیت‌ها مدنظر باشد لازم است جرم ذرات به صورت عددی در محاسبات وارد شود. تابع موج، ویژه مقادارها و مقادارهای انتظاری فاصله بین ذرات و نحوه‌ی محاسبه‌ی آن به صورت هم‌زمان در اولین حالت برانگیخته با استفاده از روش هارمونیک‌های فوق‌کروی و تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر برای سیستمی با سه ذره‌ی غیریکسان ارائه شده است.

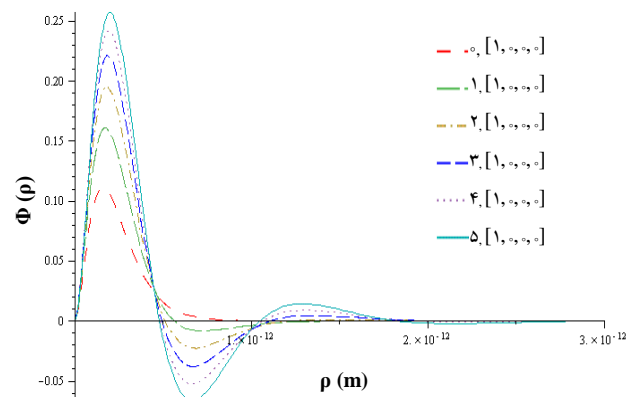
تنها تقریب به کار رفته در این روش محدود کردن تعداد جمله‌های بسط شعاعی و زاویه‌ای است که می‌توان آن را با توجه به توان محاسباتی تا دقت دلخواه افزایش داد. از نتایج به دست آمده می‌توان دید که بسط قسمت شعاعی تابع موج برحسب تابع‌های توسعه یافته‌ی لاگر بسیار سریع است و تنها در نظر گرفتن شش جمله از این بسط ما را به دقت‌های بالا در محاسبات می‌رساند. ولی بسط قسمت زاویه‌ای برحسب هارمونیک‌های فوق‌کروی به دلیل تعدد مختصه‌ها و تبهگنی بالا کند است. در نتیجه برای بررسی حالت‌های برانگیخته‌ی بالاتر باید تعداد جمله‌های بسط زاویه‌ای بیش‌تری را در محاسبات وارد کرد.

### ملاحظه

این مقاله بخشی از نتایج طرح پژوهشی با عنوان «محاسبه‌ی میزان هم‌جوشی دوتریم و تریتیم در اولین حالت برانگیخته‌ی مولکول  $dt\mu$ » است که با حمایت دانشگاه آزاد اسلامی واحد شیراز به انجام رسیده است.



شکل ۱. تابع موج شعاعی سیستم سه جسمی  $dt\mu$  در حالت پایه و اولین حالت‌های برانگیخته.



شکل ۲. تغییر شکل تابع موج شعاعی سیستم  $dt\mu$  در حالت پایه با افزایش تعداد جمله‌های بسط شعاعی.

### ۳. نتیجه‌گیری

معادله‌ی شرودینگر برای سیستم‌های سه جسمی مستقیماً بدون استفاده از تقریب‌هایی که حرکت هسته‌ها را مستقل از حرکت الکترون‌ها (میون) در نظر می‌گیرند، حل شد. به دلیل عدم استفاده از وردش، تابع موج سیستم برای حالت‌های برانگیخته نیز قابل محاسبه است و می‌توان خصوصیات موضعی سیستم را به دقت بررسی کرد. سیستم‌های سه جسمی در مطالعه‌های متعددی به روش هارمونیک‌های فوق‌کروی مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۱۰، ۱۱، ۱۲] ولی در اغلب موارد مولکول‌های بررسی شده دارای یک ذره‌ی سنگین و دو ذره‌ی مشابه هستند، که این، ساده‌سازی‌های زیادی را در محاسبات وارد می‌کند. در این مقاله سعی شده است یک سیستم سه جسمی کوانتومی برهم‌کنش‌کننده تحت اثر نیروی کوئنی در کلی‌ترین حالت بررسی شود. برای این منظور مولکول  $dt\mu$  در نظر گرفته شد زیرا هیچ‌کدام از سه ذره‌ی تشکیل‌دهنده‌ی آن آن‌قدر سنگین نیست که بتوان آن را در مرکز جرم مولکول ثابت در نظر گرفت. بنابراین سه ذره‌ی  $t$ ،  $\mu$ ، و  $d$ ، هر یک در برهم‌کنش با دو ذره‌ی دیگر، حول مرکز جرم



1. M. R. Eskandari, M. Mahdavi, The minimum binding energy and size of doubly muonic D3 molecule, *Int. J. Mod. Phys. C* 13 (2002) 265.
2. M. R. Eskandari, F. Faghihi, Minimum binding energy and size of the doubly muonic T<sub>3</sub> molecule, *Int. J. Quantum Chem.* 93 (2003) 377.
3. M. R. Eskandari, M. Mahdavi, H. Khajehazad, Calculation of binding energy for non-symmetric muonic helium hydride ions in the hyperspherical approach, *Phys. Rev. A* 71, (2005) 042507-042513.
4. D. V. Fedorov, A. S. Jensen, Efimov effect in coordinate space Faddeev equations, *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 4103-4106.
5. C. D. Lin, Hyperspherical coordinate approach to atomic and other Coulombic three-body systems, *Phys. Rep.* 257 (1995) 1-83.
6. R. Chattopadhyay, T. K. Das, Adiabatic approximation in atomic three-body systems, *Phys. Rev. A* 56 (1997) 1281-1287.
7. M. R. Eskandari, M. Mahdavi, Calculation of binding energy for muonic three-body systems in the hyperspherical approach, *Phys. Rev. A* 68 (2003) 032511-032517.
8. N. Barnea, A. Novoselsky, Construction of hyperspherical functions symmetrized with respect to the orthogonal and the symmetric groups, *Ann. Phys.* 256 (1997) 192-225.
9. S. Watanabe, Y. Hosoda, D. Kato, Hyperspherical close-coupling method extended to the two-electron continuum region: test on the s-wave model for e-H scattering, *J. Phys. B* 26, L495 (1993).
10. Zhong-Qi Ma, An-Ying Dai, Quantum three-body problem, arXiv:physics/9905051.
11. Md. A. Khan, Hyperspherical three-body calculation for muonic atoms, *Eur. Phys. J. D* 66 (2012) 83.
12. Md. A. Khan, S. K. Dutta, T. K. Das, Computation of raynal-revai coefficients for the hyperspherical approach to a three-body system, *Fizika B*, 8 (1999) 469-482.
13. M. R. Eskandari, H. Khajehazad, *Inter. J. Modern Physics E*, 19 (2010) 419-435.
14. J. L. Ballot and M. Fabre de la Ripelle, Application of the hyperspherical formalism to the trinucleon bound state problems, *Ann. Phys.* 127 (1980) 62-125.
15. C. Deng, R. Zhang, D. Feng, Solution of atomic and molecular Schrödinger equation described by hyperspherical coordinates, *Int. J. Quan. Chem.* 45 (1993) 385.
16. J. Raynal and J. Revai, Transformation coefficients in the hyperspherical approach to the three-body problem, *Nuovo Cimento*, 68 (1970) 612-622.
17. J. Ackermann, Global and local properties of the S states of the dtμ molecular ion: A finite-element study, *Phys. Rev. A* 57 (1998) 4201-4203.
18. C. D. Lin, Classification and supermultiplet structure of doubly excited states, *Phys. Rev. A*. 29 (1984) 1019-1033.