Institute for Research in Fundamental Sciences

مقاله نامه ی بیست و ششمین کنفرانس بهاره فیزیک- ۲۲-۲۳ خرداد ماه ۱۳۹۸

شماره(۳۶)

حل تحلیلی معادله کلاین-گوردون برای پتانسیل دنگ-فن با استفاده از روش Nikiforov-Uvarov

علی اصغر قاسم‌پور، نرگس تعظیمی

گروه فیزیک، دانشگاه کاشان

چکیده

پتانسیل Deng-fan یکی از پتانسیل های مهمی است که از سال‌ها پیش برای مطالعه سیستم‌های مولکولی مورد استفاده قرار گرفته است. در این مقاله معادله نسبیتی کلاین-گوردون را با استفاده از این پتانسیل مورد بررسی قرار می‌دهیم و ویژه مقدار انرژی متناسب با سیستم‌های مولکولی را برای حالت‌های مختلف n و l با حل معادله کلاین-گوردون به روش NU بدست می آوریم.

معادله کلاین-گوردون یک معادله نسبیتی است که برای توصیف رفتار ذرات با اسپین صفر به کار می‌رود. در سال‌های اخیر، مطالعات فراوانی بر روی معادله کلاین-گوردون با پتانسیل های متنوع مانند پتانسیل هالتن [۲-۱]، مورس، ایکارت [٤-۳]، کولن، دنگ-فن و ... با روش‌های متفاوت تحلیلی، جبری و تقریبی صورت گرفته است. در این مقاله حل تحلیلی معادله کلاین-گوردون را برای پتانسیل دنگ-فن با استفاده از روش NU انجام داده و مقدار انرژی را برای مولکول های دو اتمی مختلف بدست می آوریم.

روش Nikiforov-Uvarov (NU)

معادله شرودینگر می‌تواند به یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم با پیروی از فرم زیر تبدیل شود:

$$\sigma^2(s)\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2}+\sigma(s)\tilde{\tau}(s)\frac{d\Psi(s)}{ds}+\tilde{\sigma}(s)\Psi(s)=0 \qquad (۱)$$

برای پیدا کردن راه حل، فرم زیر را به کار می‌بریم:

$$\Psi(s)=\Psi(s)\Phi(s) \qquad (۲)$$

با استفاده از معادله (۱) نتیجه زیر بدست می‌آید:

$$\sigma(s)\frac{d^2\Phi(s)}{ds^2}+\tau(s)\frac{d\Phi(s)}{ds}+\lambda\Phi(s)=0 \qquad (۳)$$

که $\Phi(s)$ در فرم رودریگز بدین صورت نوشته می‌شود:

$$\Phi_n(s)=\frac{B_n}{\rho(s)}\frac{d^n}{ds^n}\left[\sigma^n(s)\rho(s)\right] \qquad (٤)$$

فرم کلی معادله شرودینگر گونه که هر پتانسیلی را شامل می‌شود، بدین شکل است:

$$\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2}+\left(\frac{\alpha_1-\alpha_2 s}{s(1-\alpha_3 s)}\right)\frac{d\Psi(s)}{ds}+\left(\frac{-As^2+Bs-C}{s^2(1-\alpha_3 s)^2}\right)\Psi(s)=0 \qquad (۵)$$

با مقایسه‌ی رابطه (۱) و رابطه (۵)، پارامترهای زیر را بدست می آوریم:

$$\tilde{\tau}(s)=\alpha_1-\alpha_2 s,\quad \sigma(s)=s(1-\alpha_3 s),\quad \tilde{\sigma}(s)=-As^2+Bs-C \qquad (٦)$$

پارامترهای ثابتی نیز با توجه به رابطه‌ها بدین شکل تعریف می‌شود:

$$\alpha_4=\frac{1}{2}(1-\alpha_1),\quad \alpha_5=\frac{1}{2}(\alpha_2-2\alpha_3),\quad \alpha_6=\alpha_5^{\,2}+A,\quad \alpha_7=2\alpha_4\alpha_5-B,\quad \alpha_8=\alpha_4^{\,2}+C$$

$$\alpha_9=\alpha_3\alpha_7+\alpha_3^{\,2}\alpha_8+\alpha_6,\quad \alpha_{10}=\alpha_1+2\alpha_4+2\sqrt{\alpha_8},\quad \alpha_{11}=\alpha_2-2\alpha_5+2\left(\sqrt{\alpha_9}+\alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right)$$

$$\alpha_{12}=\alpha_4+\sqrt{\alpha_8},\qquad \alpha_{13}=\alpha_5-\left(\sqrt{\alpha_9}+\alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right) \tag{۷}$$

معادله‌ی انرژی از این رابطه بدست می آید:

$$\alpha_2 n-(2n+1)\alpha_5+(2n+1)\left(\sqrt{\alpha_9}+\alpha_3\sqrt{\alpha_8}\right)+n(n-1)\alpha_3+\alpha_7+2\alpha_3\alpha_8+2\sqrt{\alpha_8\alpha_9}=0 \tag{۸}$$

حل حالت پایه

قسمت شعاعی معادله کلین-گوردون برای یک ذره با جرم m و پتانسیل $V(r)$ بدین صورت است:

$$\frac{d^2\Phi(r)}{dr^2}+\left\{\left(E^2-m^2\right)-2(E+m)V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\Phi(r)=0 \tag{۹}$$

پتانسیل دنگ-فن [۵] و تقریب $\frac{1}{r^2}$ در نظر گرفته برای حل به صورت زیر می‌باشد:

$$V(r)=D\left(\frac{-2b}{e^{\alpha r}-1}+\frac{b^2}{\left(e^{\alpha r}-1\right)^2}\right),\qquad \frac{1}{r^2}\approx\alpha^2\left(d_0+\frac{1}{e^{\alpha r}-1}+\frac{1}{\left(e^{\alpha r}-1\right)^2}\right) \tag{۱۰}$$

با جایگذاری پتانسیل دنگ-فن و تقریب $\frac{1}{r^2}$ در رابطه‌ی (۹) بدست می‌آوریم:

$$\frac{d^2\Phi(r)}{dr^2}+\left\{E^2-m^2+\frac{4bD(E+m)}{e^{\alpha r}-1}-\frac{2b^2D(E+m)}{\left(e^{\alpha r}-1\right)^2}\right.$$

$$\left.-l(l+1)\alpha^2 d_0-\frac{l(l+1)\alpha^2}{e^{\alpha r}-1}-\frac{l(l+1)\alpha^2}{\left(e^{\alpha r}-1\right)^2}\right\}\Phi(r)=0 \tag{۱۱}$$

با استفاده از تغییر متغیر $e^{-\alpha r}=s$، معادله‌ی (۱۱) تبدیل می‌شود به:

$$\frac{d^2\Phi(s)}{ds^2}+\frac{(1-s)}{s(1-s)}\frac{d\phi}{ds}+\left\{\frac{E^2-m^2}{s^2\alpha^2}+\frac{4bD(E+m)}{s(1-s)\alpha^2}-\frac{2b^2D(E+m)}{\alpha^2(1-s)^2}\right.$$

$$\left.-\frac{l(l+1)d_0}{s^2}-\frac{l(l+1)}{s(1-s)}-\frac{l(l+1)}{(1-s)^2}\right\}\Phi(s)=0 \tag{۱۲}$$

با مقایسه‌ی رابطه‌ی (۱۲) و رابطه‌ی (۵)، مقادیر زیر حاصل می‌شود:

$$\gamma^2=-\left(\frac{E^2-m^2}{\alpha^2}\right),\quad \beta^2=\frac{4bD(E+m)}{\alpha^2},\quad \nu^2=\frac{2b^2D(E+m)}{\alpha^2}$$

$$A=\gamma^2+\beta^2+\nu^2+l(l+1)d_0,\ B=2\gamma^2+\beta^2+(2d_0-1)l(l+1),\ C=\gamma^2+l(l+1)d_0 \tag{۱۳}$$

و پارامترهای رابطه‌ی (۷) بدین صورت بدست می‌آید:

$$\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=1,\quad \alpha_4=0,\quad \alpha_5=-\frac{1}{2},\quad \alpha_6=\frac{1}{4}+A,\quad \alpha_7=-B,\quad \alpha_8=C$$

$$\alpha_9=A-B+C+\frac{1}{4},\quad \alpha_{10}=1+2\sqrt{C}\ \alpha_{11}=2+2\left(\sqrt{A-B+C+\frac{1}{4}}+\sqrt{C}\right)$$

$$\alpha_{12}=\sqrt{C},\quad \alpha_{13}=-\frac{1}{2}-\left(\sqrt{A-B+C+\frac{1}{4}}+\sqrt{C}\right) \tag{۱۴}$$

با در نظر گرفتن $\delta'=\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{4\nu^2+(2l+1)^2}\right)$ و استفاده از معادله (۸)، ویژه مقدار انرژی را بدست می‌آوریم:

$$E^2 - m^2 = -\alpha^2 \left(\frac{-n^2 + \beta^2 - l(l+1) - (2n+1)\delta'}{2(n+\delta')} \right)^2 + l(l+1) d_0 \alpha^2 \qquad (۱۵)$$

جدول۱ : پارامترهای پتانسیل برای بعضی از مولکول های دو اتمی

$D(cm^{-1})$	$r_e(A^0)$	$\alpha(A^{0^{-1}})$	$\mu(amu)$	*molecule*
38,266	0.7416	1.9426	0.50391	H_2
20,287	1.5956	1.1280	0.8801221	LiH
90,540	1.1283	2.2994	6.8606719	CO
37,255	1.2746	1.8677	0.9801045	HCl

در جدول ۱، پارامترهای پتانسیل که از رفرنس‌های [۷-۵] برای مولکول های دو اتمی H_2، LiH، CO و HCl بدست آمده، آورده شده است. همچنین با در نظر گرفتن $1amu = 931.494028 Mev/c^2$، $\hbar c = 1973.27 evA^0$، $d_0 = \frac{1}{12}$، $V(r) = \frac{V(r)}{2}$، $E - M = E_{nl}$ و $E + M = \frac{2\mu}{\hbar^2}$، می توانیم ویژه مقدار انرژی را برای مولکول های دو اتمی ذکر شده در جدول ۲ بدست آوریم:

جدول۲ : مقدار انرژی بدست آمده از پتانسیل دنگ-فن و پتانسیل اسکالر مورس برای مولکول های دو اتمی

n	l	*molecule*	$-E_{nl}(ev)NU$	$-E_{nl}(ev)AP$	$-E_{nl}(ev)[6,7]$
0	0	H_2	4.39444	4.39444	4.47601
0	5	H_2	4.17644	4.18054	4.25880
5	0	H_2	1.75835	1.75835	2.22052
0	0	LiH	2.41195	2.41195	2.42886
0	5	LiH	2.38348	2.38458	2.40133
5	0	LiH	1.51628	1.51628	1.64771
0	0	CO	11.08068	11.08068	11.0915
0	5	CO	11.07247	11.07354	11.0844
5	0	CO	9.68809	9.68809	9.79518
0	0	HCl	4.41705	4.41705	4.43556
0	5	HCl	4.37403	4.37843	4.39682
5	0	HCl	2.66574	2.66574	2.80506

نتیجه گیری

در این مقاله، ما حل تحلیلی معادله کلاین-گوردون را برای پتانسیل دنگ-فن با استفاده از روش NU انجام داده و مقدار انرژی را محاسبه کرده ایم. در جدول۲، مقدار انرژی مولکول های دو اتمی مختلف، و مقادیر دلخواه n و l نشان می‌دهد که پتانسیل دنگ-فن استفاده شده بسیار به واقعیت نزدیک است و این مقدارهای عددی درستی مقاله‌ی ما را نشان می‌دهد.

مرجع‌ها

1. Altuğ Arda, Ramazan Sever and Cevdet Tezcan, *Phys. Scr.* **79** (2009) 015006
2. Qiang W C, Zhou R S and Gao Y, *Phys. Lett. A* **371** (2007) 201
3. C. Eckart, *Phys. Rev.* **35**, 1303 (1930)
4. M. Hamzavi, S. M. Ikhdair and K.-E. Thylwe, *J Math Chem* 51:227-238(2013)
5. W.C. Qiang, S.H. Dong, *Phys. Lett. A* **363**, 169 (2007)
6. S.M. Ikhdair, *Chem. Phys*. **361**, 9 (2009)
7. S.M. Ikhdair, *Mol. Phys*. **110**, 1415 (2012)