محاسبه تحلیلی پارامترهای همجوشی مولکولهای سه جسمی در مختصات ژاکوبی با استفاده از بسط تابع موج برحسب هارمونیکهای فوق کروی و توابع توسعه یافته لاگر

محمدرضا اسکندری[1]، هادی خواجه آزاد[2]، مهدی کاوه نیا[3]

[1]بخش مهندسی هسته ای، دانشکده مهندسی، دانشگاه شیراز، [2]بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز،
[3]گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد آباده

چکیده

در این تحقیق با استفاده از مختصات ژاکوبی حرکت مرکز جرم را در مولکولهای سه جسمی جدا کرده و نتایج حاصل را در مختصات فوق کروی بیان می کنیم سپس تابع موج سیستم را برحسب مجموعه کامل و متعامد هارمونیکهای فوق کروی $Y_{K\mu_i}(\Omega_i)$ در پارتیشن یا کانال " i " از مختصات ژاکوبی بسط می دهیم. عناصر ماتریسی پتانسیل برهم کنش دو به دو در مختصات فوق کروی را می توان با استفاده از ضرایب راینال-ریوای برای تبدیل مجموعه $Y_{K\mu_i}(\Omega_i)$ به دیگر مجموعه ها مانند $Y_{K\mu_j}(\Omega_j)$، محاسبه کرد. در آخر با استفاده از توابع توسعه یافته لاگر معاد لات دیفرانسیل جفت شده از درجه دو را به یک معادله غیر دیفرانسیل ماتریسی برای محاسبه ویژه مقادیر انرژی و ویژه بردار های این سیستمها تبدیل می کنیم. در نتیجه با محاسبه تحلیلی تابع موج، می توان تمام خصوصیات سیستمهای ذکر شده را مورد بررسی قرار داد.